

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

**XLIX Школа ПИЯФ
по физике
конденсированного состояния**

ФКС-2015
16–21 марта 2015 г., Санкт-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2015

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников XLIX Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2015), 16–21 марта 2015 г., Санкт-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the XLIX PNPI School on condensed state physics (CSP-2015). (16–21 of March, 2015, Saint Petersburg).

Проведению Школы оказали поддержку:

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

Сборник подготовили А. И. Огороков, Н. М. Чубова

© ФГБУ «ПИЯФ» НИЦ «Курчатовский институт», 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции	4
Стендовые доклады	
Секция «Нейтронное рассеяние»	15
Секция «Рассеяние синхротронного излучения»	38
Секция «Материалы и минералы»	57
Секция «Биофизика и наука о жизни»	130
Секция «Теория физики твердого тела»	144
Секция «Методика моделирования и приборы»	186
Список участников	204

Лекции

Физиологические механизмы представления пространства в мозге (Нобелевская премия за 2014 год в области физиологии и медицины)

В. Н. Мухин, К. И. Павлов, В. М. Клименко

*Физиологический отдел им. И. П. Павлова, Институт экспериментальной медицины,
Санкт-Петербург, Россия*

Нобелевская премия по физиологии и медицине за 2014 год присуждена Джону О'Кифу и супругам Эдварду и Мэй-Бритт Мозерам «за открытие клеток, представляющих собой систему позиционирования в мозге». Достижения этих учёных внесли существенный вклад в формирование современного представления о структурно-функциональной основе отображения пространства в мозге млекопитающих. В эту систему входят несколько типов нейронов, обнаруженных и у животных, и у человека и находящихся в гиппокампальной формации и некоторых других отделах мозга. Клетки места – нейроны, частота разрядов которых резко увеличивается, когда животное перемещается через определенное место, специфичное для каждого из таких нейронов.

О'Киф с соавторами установил, что активность клеток места согласована с гиппокампальным тета-ритмом – периодическим изменением активности нейронов гиппокампальной формации, частота которого зависит от скорости передвижения животного. Ансамбли клеток места в гиппокампе, по мнению их первооткрывателей О'Кифа с соавторами, являются структурно-функциональной основой когнитивных карт, существование которых показал в первой половине XX века психолог Эдвард Толман. Эти ансамбли могут являться клеточным субстратом для процессов, лежащих в основе памяти. Клетки направления головы (Taube et al., 1990) активируются, когда голова животного ориентирована в определённом направлении. Клетки границы (Lever et al., 2009) – нейроны, частота следования потенциалов действия которых зависит от расстояния до границ окружающего пространства и угла расположения тела по отношению к ним. Клетки решётки (клетки сетки), открытые супругами Мозерами с соавторами, – это нейроны, частота следования потенциалов действия которых резко увеличивается каждый раз, когда голова животного попадает в определенные зоны, являющиеся узлами воображаемой мозаичной сети равносторонних треугольников. У каждого из таких нейронов имеется своя сеть треугольников. Активность нейронов перечисленных видов зависит от всей совокупности поступающей в мозг от органов чувств информации и не меняется при затруднении или прекращении работы одной или нескольких сенсорных систем. Теория, основанная на открытиях О'Кифа и супругов Мозеров, в перспективе может оказать большое

влияние на развитие медицины. Считается, что повреждение мозговой системы представления пространства может вносить существенный вклад в патогенез и клиническую картину нейродегенеративных заболеваний, при которых патологический процесс затрагивает гиппокамп и энторинальную кору, в первую очередь – болезни Альцгеймера.

Ультраметрика в биофизике

В. А. Аветисов

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

В теоретической биофизике большой интерес проявляется сейчас к «сложным системам», структурные и/или динамические характеристики которых охватывают широкий спектр пространственных или временных масштабов, и возникает потребность в моделях, отражающих многомасштабность объекта явным образом. В докладе будет рассказано об одном из подходов, основная идея которого проста: строить описание непосредственно по иерархии масштабов, присущей самому объекту. Однако столь безобидный, на первый взгляд, шаг, ведет к математически нетривиальным последствиям: пространством состояний системы становится «дерево», метрика на нем оказывается ультраметрикой, и вся аналитика переходит на p -адическое числовое поле и p -адический математический анализ. Как это делается – будет пояснено на двух примерах. Один из них – классический ферментативный катализ, элементарный акт которого управляется перестройками белковой молекулы на временах до сотен миллисекунд и более. Тут пока нет понимания главного: что превращает полимер в «молекулярную машину». Другой пример – упаковка хромосомной ДНК в клеточном ядре – взят из достижений последних лет [1]. Гигантская молекула ДНК упакована в ядре максимально плотно, тем не менее фрагменты ДНК почти любого масштаба могут легко «распутываться» при считывании генетической информации.

Сейчас проясняется, что уникальные функции, которые выполняют биомакромолекулы, существенным образом связаны с их ультраметричностью. Более того, складывается впечатление, что там, где речь идет о «живых системах», особенно их «зарождении» и эволюции, p -адические (ультраметрические) конструкции выглядят более органичными, чем вещественные. Наблюдаемые конструкции, конечно, остаются вещественными, но извлекать их удастся из вполне простых и точно решаемых ультраметрических моделей [2].

1. E. Leiberman-Aiden et al. Science, 2009, 326, 289.
2. В. А. Аветисов и др. Труды МИАН, 2014, 285, 3.

Изучение физики твердых тел под давлением с помощью ядерного резонансного рассеяния синхротронного излучения

И. А. Сергеев

Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany

Ядерное резонансное рассеяние (ЯРР) синхротронного излучения – метод, базирующийся на эффекте Мессбауэра и использующийся для изучения электронных, магнитных и упругих свойств материалов с мессбауэровскими изотопами. Наиболее эффективно метод используется для экспериментов, в которых задействованы уникальные свойства источников синхротронного излучения 3-го поколения, такие как малый размер рентгеновского пучка и его малая расходимость. Одной из таких областей является изучение свойств твердых тел под высоким давлением, где ЯРР является одним из немногих методов, дающих информацию, например, о поведении магнетизма или скорости звука с изменением давления.

В этом обзорном докладе будут даны базовые принципы ЯРР и краткий обзор возможностей метода для измерений под высоким давлением. В качестве подробных примеров будут представлены исследование магнитных свойств Ni при давлениях выше 100 ГПа и применение метода для изучения природы низкой теплопроводности в новых термоэлектрических материалах.

Дифракция фемтосекундных импульсов XFEL на кристаллах, self-seeding и другие интересные явления

В. А. Бушуев

Московский государственный университет, Москва, Россия

В лекции будут рассмотрены следующие вопросы:

1. История вопроса и физические принципы, лежащие в основе генерации излучения рентгеновского лазера на свободных электронах (РЛСЭ). Особенности формирования импульсов в режиме SASE.

2. Основные параметры РЛСЭ [1]. Излучение РЛСЭ представляет собой импульсы с длиной волны 0,1 нм, длительностью 10–100 фс и угловой расходимостью 1–3 мкрад. Импульсы характеризуются практически полной пространственной когерентностью и весьма посредственной временной когерентностью, приводящей к спектральной ширине излучения 0,1 %. Яркость излучения РЛСЭ на 9–10 порядков превышает яркость современных источников синхротронного излучения.

3. Возможные применения: получение трехмерных изображений (imaging) нанообъектов, когерентная дифракция, проблема восстановления фазы, голография единичных макромолекул за один импульс РЛСЭ, рентгеновское «кино», эксперименты типа pump-probe и т. п.;

4. Влияние дифракции в кристаллах на параметры импульсов [2–4];

5. Когерентные свойства импульсов РЛСЭ, режим self-seeding («самопосев») для повышения степени временной когерентности [4–7].

6. Проблемы, связанные с гигантской яркостью излучения РЛСЭ [6]. Энергии импульсов Европейского РЛСЭ в каналах SASE 1, 2 составят 20–2 500 мкДж [1], что приведет к средним потокам энергии от 60 Вт · см⁻² до 80 кВт · см⁻² в области расположения элементов рентгеновской оптики на расстоянии 900 м от ондулятора и к серьезным проблемам по предотвращению сильнейшего теплового нагрева кристаллов и зеркал.

1. *Th. Tschentscher* // XFEL. EU TN-2011-001. 2011.
2. *V.A. Bushuev* // J. Synchrotron Rad. 15, 495 (2008).
3. *V.A. Bushuev, L. Samoylova* // Nucl. Instrum. Methods. A 635, S19 (2011).
4. *В.А. Бушуев, Л. Самойлова* // Кристаллография. 56, 876 (2011).
5. *G. Geloni, V. Kocharyan, E. Saldin* // Report DESY 10-053. Hamburg, Germany, 2010.
6. *В.А. Бушуев* // Известия РАН. Сер. физ. 77, 19 (2013).
7. *V.A. Bushuev* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 78, 1382 (2014).

Дифракционные методы в современной физике твердого тела и материаловедении

А. М. Балагуров

Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

Дифракция нейтронов как экспериментальный метод анализа структуры вещества на атомном уровне продолжает быстро развиваться. Новые идеи и технический прогресс позволили значительно улучшить светосилу и разрешающую способность нейтронных спектрометров, понизить уровень фона. На современных нейтронных дифрактометрах удается проводить эксперименты, которые сравнительно недавно были в принципе невозможны. Сейчас можно измерить дифракционный спектр с разрешением по межплоскостному расстоянию на уровне 0,1 %, провести анализ необратимого процесса, например твердофазной химической реакции, в реальном времени с секундным временным разрешением, провести эксперимент с образцом, объем которого составляет $\sim 1 \text{ мм}^3$. Значительное развитие дифракция нейтронов получила благодаря созданию импульсных источников 3-го поколения, средняя мощность которых составляет $\sim 1 \text{ МВт}$, появлению широкоформатных детекторов с телесным углом $\sim 1 \text{ ср}$, разработке эффективных корреляционных методов накопления экспериментальных данных. Не менее важным, чем развитие экспериментальной техники, стало появление новых математических методов анализа дифракционных данных. С их помощью удается одновременно обрабатывать когерентную и диффузную компоненты рассеяния и получать информацию о локальных нарушениях дальнего порядка. Значительное развитие получили и методы анализа микроструктуры вещества.

В докладе обсуждаются особенности рассеяния нейтронов как экспериментального метода, его применение для анализа атомной, магнитной и микроструктуры вещества и современная ситуация с развитием этого метода в России и других странах.

Вклад кристаллографии в разработку материалов для Li-ионных аккумуляторов

Е. В. Антипов

Московский государственный университет, Москва, Россия

Источником около 90 % используемой в настоящее время энергии является ископаемое топливо, что имеет очень серьезные последствия: быстрое истощение природных ресурсов, существенный экологический ущерб и прогнозируемое изменение климата. Поэтому актуальными задачами являются разработка и развитие возобновляемых источников энергии и одновременно с этим создание эффективных многоразовых накопителей энергии, что позволит существенно уменьшить потребление природных ресурсов в будущем.

Li-ионные аккумуляторы, изначально разработанные для портативных переносных устройств, сейчас уже находят применение в качестве стационарных накопителей энергии, в электромобилях и др. Для удовлетворения потребностей имеющихся и особенно новых применений материалы Li-ионных аккумуляторов нуждаются в существенном улучшении их удельных энергетических параметров, безопасности и стоимости.

Первое поколение широко используемых катодных материалов для Li-ионных аккумуляторов представляет собой тройные смешанные оксиды лития и переходных металлов (Mn, Fe, Co, Ni), относящиеся к структурам шпинели или производных от структуры каменной соли: LiM_2O_4 или LiMO_2 соответственно. Однако эти материалы имеют существенные ограничения для дополнительного улучшения их свойств, которые связаны с их структурными особенностями. Соединения лития и переходных металлов, содержащие различные полианионные группы $(\text{XO}_4)^{m-}$ ($X = \text{B}, \text{P}, \text{Si}$), в настоящее время считаются наиболее перспективными катодными материалами для следующего поколения Li-ионных аккумуляторов благодаря повышенному окислительно-восстановительному потенциалу, обусловленному индуктивным эффектом полианионной группы, а также заметной электрохимической и термической устойчивости, характерной для трехмерных каркасных структур. Следующий этап совершенствования катодных материалов связан с получением новых структур, содержащих группировки $(\text{XO}_4)^{m-}$ и F^- в анионной подрешетке, что увеличивает рабочее напряжение за счет более ионной связи M-F. Недавно были открыты различные фторидофосфаты и фторидосульфаты лития и переходных металлов, и некоторые из них демонстрируют многообещающие электрохимические характеристики.

В докладе представлен обзор различных типов катодных материалов для Li-ионных аккумуляторов с особым акцентом на роль кристаллографии в их создании и оптимизации важных для практического использования свойств.

Дифракционные *in situ* эксперименты для исследования сегнетоэлектриков и пьезоэлектриков в электрическом поле

С. Горфман

University of Siegen, Siegen, Germany

Пьезоэлектрики – это специальный класс твердых тел, способных преобразовывать механическую энергию в электрическую и обратно. Пьезоэлектрик поляризуется под внешним механическим воздействием и деформируется во внешнем электрическом поле. Современный мир был бы трудно узнаваем без приборов, основанных на пьезоэлектрических материалах: генераторов частот, сенсоров давления или пьезомоторов. В то же время сам феномен пьезоэлектричества остается чрезвычайно привлекательным для фундаментальных исследований, а его микроскопические механизмы далеки от полного понимания.

Пьезоэлектричество замечательным образом связано с сегнетоэлектричеством – способностью некоторых материалов принимать энергетически эквивалентные друг другу состояния спонтанных поляризации и переключаться между ними во внешнем электрическом поле. Так называемый гигантский пьезоэлектрический эффект в перовскитных кристаллах (например, PZT) всегда сочетается с сегнетоэлектричеством. Пьезоэлектричество сегнетоэлектриков может быть обусловлено как атомарными явлениями, в которых ключевую роль играет распределение зарядовой плотности и сила химических связей, так и мезоскопическими явлениями, в которых ключевая роль отводится смещению и мобильности доменных стенок.

В данной лекции мы поговорим о механизмах пьезоэлектричества и в особенности о современном взгляде на них, формирующемся в результате оригинальных *in situ* рентгенодифракционных экспериментов во внешнем электрическом поле. После краткого введения в тензорное описание пьезоэлектричества, его связь с симметрией кристалла, а также моно- и поликристаллические пьезоматериалы, мы обратимся к методологии дифракционного эксперимента в том виде, в котором он проводится ведущими научными группами мира. Мы обсудим, каким образом дифракционный эксперимент способен разделить ранее упомянутые атомарные и мезоскопические механизмы, какую роль он может сыграть в фундаментальном понимании явлений пьезо- и сегнетоэлектричества и создании новых материалов.

1. Gorfman S., Choe H., Shvartsman V.V., Ziolkowski M., Vogt M., Strempler J., Łukasiewicz T., Pietsch U., Dec J. Time-Resolved X-Ray Diffraction Reveals the Hidden Mechanisms of High Piezoelectric Activity in Uniaxial Ferroelectric. *Physical Review Letters* 114 (2015).
2. Gorfman S. Sub-Microsecond X-Ray Crystallography: Technique, Challenges and Applications for Materials Science. *Crystallography Reviews*. 20(3), 210–232 (2014).

Что такое физика элементарных частиц?

Я. И. Азимов

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

Лекция описывает, по необходимости конспективно, предмет и методы исследования физики элементарных частиц, а также ее важнейшие нерешенные проблемы. Рассмотрены также контакты с другими разделами физики, особенно с физикой конденсированных сред и с астрофизикой.

Как «увидеть» скрытую квантовую критическую точку?

*С. В. Демисhev^{1, 2}, Т. В. Иценко¹, А. Н. Самарин^{1, 2},
И. И. Лобанова^{1, 2}, С. В. Григорьев³*

¹ *Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

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

³ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

В ряде спиральных магнетиков, в частности в системе $Mn_{1-x}Fe_xSi$, T - x или T - p магнитные фазовые диаграммы характеризуются наличием скрытой квантовой критической точки (ККТ) [1–3]. Такая точка (отвечающая при $T = 0$ переходу между фазами с дальним и промежуточным магнитным порядком) в области конечных температур оказывается окруженной фазой с промежуточным магнитным порядком, что делает проблематичным наблюдение аномалий физических характеристик, обусловленных присутствием скрытой ККТ. На примере твердых растворов замещения $Mn_{1-x}Fe_xSi$ в настоящей работе рассматриваются два подхода к «визуализации» скрытой ККТ. Существенно, что система $Mn_{1-x}Fe_xSi$ обладает двумя ККТ различных типов: скрытой ($x^* \sim 0,11$) и обычной ($x_c \sim 0,24$) [3], что позволяет сравнить связанные с ними особенности физических свойств.

Исходя из теоретической модели T - x магнитной фазовой диаграммы $Mn_{1-x}Fe_xSi$, постулирующей сосуществование классических и квантовых критических флуктуаций [3], можно показать, что со скрытой ККТ x^* на T - x магнитной фазовой диаграмме связана новая линия кроссовера между магнитными флуктуациями различной природы, следствием которой является наблюдаемая особенность на температурных зависимостях удельного сопротивления [3]. Другой подход базируется на исследовании динамических магнитных свойств методом ЭПР [4]. Найдено, что замещение марганца железом сильно влияет на ширину линии ЭПР и ведет, во-первых, к нарушению корринговского механизма спиновой релаксации и, во-вторых, к возникновению универсального скейлингового поведения, из которого «выпадают» ККТ x^* и x_c . В этих точках возникает аномальная температурная зависимость спиновой релаксации, связанная с нефермижидкостными эффектами, которые могут быть количественно описаны в рамках теории Вольфле – Абрахамса [5].

Работа поддержана проектом РФФИ 13-02-00160 и программами РАН «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием» и «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии».

1. *S. Tewari et al. Phys. Rev. Lett. 96, 047207 (2006).*
2. *F. Kruger et al. Phys. Rev. Lett. 108, 067003 (2012).*
3. *S.V. Demishev et al. JETP Lett. 98, 829 (2013).*
4. *S.V. Demishev et al. JETP Lett. 100, 28 (2014).*
5. *P. Wölfle and E. Abrahams. Phys. Rev. B. 80, 235112 (2009).*

Первопринципные методы расчета изотропных и анизотропных обменных взаимодействий в соединениях переходных металлов

В. В. Мазуренко

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Доклад посвящен проблеме построения реалистичных магнитных моделей современных материалов на основе переходных металлов, для описания физических свойств которых важную роль играет учет одноузельного кулоновского взаимодействия. В первую очередь будет проведен обзор модельных подходов, основанных на идее Андерсона о сверхобменных взаимодействиях [1, 2]. Такие методы позволяют быстро оценить основные магнитные взаимодействия в системе без проведения сложных расчетов, однако их применимость в основном ограничена соединениями с $S = 1/2$.

Затем будут представлены первопринципные методы расчета изотропных и анизотропных обменных взаимодействий между магнитными моментами. Эти подходы, основанные на теореме локальных сил [3, 4], предполагают измерение отклика системы на малые магнитные возбуждения. Их преимущество заключается в возможности определения орбитальных вкладов в полное магнитное взаимодействие между атомами, что позволяет выполнять истинно микроскопический анализ магнитных свойств коррелированных материалов.

В последней части доклада будут представлены примеры расчетов магнитных взаимодействий в различных системах и материалах: антиферромагнетиках со слабым ферромагнетизмом, низкоразмерных квантовых магнетиках, поверхностных наносистемах и молекулярных магнетиках. Отдельное внимание будет уделено особенностям первопринципного моделирования магнитных и электронных свойств $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ и MnSi .

1. *P.W. Anderson*. Phys. Rev. 115, 2 (1959).
2. *T. Moriya*. Phys. Rev. 120, 91 (1960).
3. *A.I. Liechtenstein et al.* J. Magn. Magn. Mater. 67, 65 (1987).
4. *M.I. Katsnelson et al.* Phys. Rev. B 82, 100403 (2010).

Критические явления – методы вычислений, или Хорошие числа из плохих рядов

А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В критической области вещество представляет собой сильно нелинейную и сильно флуктуирующую систему. Описание термодинамики таких систем – сложнейшая задача теоретической физики. В рамках идеологии теоретико-полевой ренормализационной группы (РГ) удалось воссоздать физически содержательную картину критического поведения и рассчитать с высокой точностью критические индексы и другие универсальные величины [1–3]. Техника РГ использует теорию возмущений, которая позволяет найти наблюдаемые в виде рядов по степеням безразмерного перенормированного заряда (эффективной константы связи). Эти ряды, однако, являются расходящимися, а асимптотическое значение заряда для трехмерных и двумерных систем лежит между 1 и 2, т. е. параметр разложения в физически интересных случаях не мал.

В докладе рассказывается о методах, применяемых для обработки (пересуммирования) РГ-разложений и получения численных оценок. Показано, что использование преобразования Бореля и его обобщений в сочетании с различными способами аналитического продолжения борелевских образов позволяет построить итерационные процедуры, быстро сходящиеся к определенным значениям универсальных параметров. Эти значения, как правило, очень хорошо согласуются с результатами прецизионных физических и машинных экспериментов, а также с точными числами, когда они известны. Излагается также техника псевдоэпсилон-разложения, которая позволяет превращать «плохие» РГ-ряды в ряды с быстро убывающими коэффициентами. Структура псевдоэпсилон-разложений оказывается настолько благоприятной с вычислительной точки зрения, что для получения надежных численных оценок часто можно ограничиться прямым суммированием или использованием аппроксимант Паде. Приводятся результаты применения метода псевдоэпсилон-разложения для расчета критических индексов и универсальных отношений, демонстрирующие высокую численную эффективность этой техники.

1. *К. Вильсон, Дж. Когут.* Ренормализационная группа и эпсилон-разложение. Мир, 1975.
2. *J. Zinn-Justin.* Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Clarendon Press, 2002.
3. *A. Pelissetto, E. Vicari.* Phys. Reports, 368, 549 (2002).

Стендовые доклады
Секция «Нейтронное рассеяние»

Особенности фазового состояния NaNO_2 в сегнетоэлектрических композитах $(1-x)\text{NaNO}_2 + (x)\text{BaTiO}_3$

О. А. Алексеева¹, А. А. Набережнов^{1, 2}, Е. В. Стукова³

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

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

³ Амурский государственный университет, Благовещенск, Россия

В данной работе приведены результаты исследования влияния примеси BaTiO_3 на температурный диапазон существования несоразмерной фазы NaNO_2 в композитах на основе порошковых смесей NaNO_2 и BaTiO_3 , различающихся размером и процентным содержанием частиц BaTiO_3 .

Ранее проведенные диэлектрические исследования композитов $(1-x)\text{NaNO}_2 + (x)\text{BaTiO}_3$ (при $x = 0,05$ и $x = 0,1$ и с различным размером частиц BaTiO_3) [1] показали существование дополнительного температурного максимума диэлектрической проницаемости, величина которого различна при нагреве и охлаждении. Авторы предположили, что он появляется вследствие перехода сегнетоэлектрическая – несоразмерная фаза NaNO_2 и, таким образом, температурная область существования несоразмерной фазы NaNO_2 в композитах (≈ 18 К) существенно расширяется по сравнению с чистым NaNO_2 (≈ 1 К). Для проверки этого предположения мы провели исследования температурной эволюции структуры методом дифракции нейтронов.

В результате проведенных исследований получены температурные зависимости параметра порядка NaNO_2 . Обнаружено, что примесь BaTiO_3 приводит к уменьшению величины параметра порядка NaNO_2 в композитах по сравнению с чистым NaNO_2 в температурном диапазоне $\approx 360\text{--}433$ К. На основании этого можно утверждать, что в диапазоне температур $T \approx 360\text{--}433$ К наблюдается сосуществование несоразмерной и сегнетоэлектрической фаз NaNO_2 с преобладанием последней. Дифракционный профиль наилучшим образом описывается функцией Войта. Были проанализированы ширина и форма линии брэгговских пиков. Показано, что в исследованном температурном интервале ширина рефлексов NaNO_2 превышает инструментальное разрешение прибора. Проведенный анализ позволяет предположить, что в данном температурном диапазоне в композитах существуют упругие напряжения, влияние которых и приводит к расширению диапазона существования несоразмерной фазы.

1. Стукова Е.В., Королева Е.Ю., Трюхан Т.А., Барышников С.В. Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. Т. 146 (№ 2). С. 22–27.

Влияние допирования на стабильность геликоидальной спиновой структуры в MnGe

*Е. В. Алтынбаев^{1,2}, А. С. Суханов^{1,2}, S.-A. Siegrid³, В. А. Дядькин^{1,4},
Е. В. Москвин^{1,2}, А. Heinemann³, D. Menzel⁵, Ch. Dewhurst⁶, А.В. Цвященко⁷,
С. В. Григорьев^{1,2}*

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

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

⁵ Technische Universität Braunschweig, Braunschweig, Germany

⁶ Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

⁷ Институт физики высоких давлений, Троицк, Москва, Россия

Магнитная подсистема соединений $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с $x < 0,4$ с кубической структурой типа B20 упорядочиваются в геликоидальную спиновую структуру с волновым вектором $k \approx 2 \text{ нм}^{-1}$ при низких температурах [1, 2]. Температурную эволюцию магнитной структуры образцов $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с $x = 0,0; 0,2; 0,25; 0,3$ и $0,4$ исследовали методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Обнаружено, что магнитный фазовый переход во всех исследуемых соединениях происходит по тому же сценарию, что и в случае чистого соединения MnGe [2]. В результате анализа профиля брэгговского пика от магнитной спирали была определена критическая температура T_N , которая уменьшается с ростом концентрации примесного металла и обращается в ноль при $x \approx 0,4$. Кроме того, с ростом концентрации растет интенсивность рассеяния на геликоидальных флуктуациях при низких температурах. Этот факт прямо указывает на то, что допирование атомами Fe приводит к дестабилизации магнитной спиновой структуры MnGe.

Анализ зависимости ширины брэгговского рефлекса от температуры для соединений с различной концентрацией Fe показал, что для соединений $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ с $x < 0,25$ определение корреляционной длины ξ устойчивой геликоидальной структуры ограничено разрешением установки ($\xi \gg 20 \text{ нм}$). В случае $x > 0,25$ геликоидальная структура флуктуирует. Корреляционная длина ξ флуктуации геликоида равна 10 нм, и она не зависит от температуры вплоть до $T \approx 80 \text{ К}$, а затем ξ заметно уменьшается с ростом температуры. Этот факт указывает на квантовую природу геликоидальных флуктуаций в соединениях с $x > 0,25$ при $T < 80 \text{ К}$ и переход в режим тепловых флуктуаций при $T > 80 \text{ К}$.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-22-01073-офи_м.

1. S.V. Grigoriev et al. Phys. Rev. Lett. **110**, 207201 (2013).
2. E.V. Altynbaev et al. Phys. Rev. B **90**, 174420 (2014).

Исследование кристаллической и магнитной структуры лантан-стронциевых манганитов при высоком давлении в широком диапазоне температур

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

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

² *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

³ *Институт физики, Прага, Чехия*

Сильная корреляция между различными физическими свойствами, проявляющимися в манганитах $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$, приводит к высокой чувствительности таких соединений к изменению внешних условий: температуры, магнитных и электрических полей, давления. Воздействие высокого давления, по сравнению с другими экспериментальными методами, является прямым методом контролируемого изменения магнитных взаимодействий за счет вариации межатомных расстояний и углов. Проведение исследований при высоких давлениях дают уникальную возможность изучения взаимосвязи изменений структурных параметров кристалла с изменениями магнитной структуры, что необходимо для понимания природы и механизмов явлений, наблюдаемых в манганитах.

Исследование кристаллической и магнитной структуры манганитов было проведено методом нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна) с использованием камеры высокого давления с сапфировыми наковальнями в диапазоне давлений до 5,7 ГПа. Обработка и анализ экспериментальных данных проводились методом Ритвельда с помощью программы FullProf.

Как результат, в соединениях $\text{La}_{0,63}\text{Sr}_{0,37}\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{0,72}\text{Sr}_{0,28}\text{MnO}_3$ был обнаружен переход из ферромагнитного (ФМ) в антиферромагнитное (АФМ) состояние при высоком давлении. Наблюдаемые магнитные фазовые переходы сопровождаются структурными переходами из первоначального состояния с пр. гр. $R\bar{3}c$ в состояние с пр. гр. $Pnma$. Также в манганитах $\text{La}_{0,63}\text{Sr}_{0,37}\text{MnO}_3$ при нормальном давлении и температуре 4 К наблюдалось наличие АФМ фазы. Получены барические зависимости параметров элементарной ячейки и объема, магнитного момента ФМ и АФМ-фазы.

Работа поддержана грантом РФФИ № 15-32-20358-мол_a_вед.

Нейтроннографические исследования фазовых превращений в аморфном фуллерите и металл-матричном композите аморфный фуллерит-железо-никелевый сплав

*П. А. Борисова¹, М. С. Блантер², В. П. Глазков¹, В. В. Бражкин³,
В. П. Филоненко³, В. А. Соменков¹*

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

² *Московский государственный университет приборостроения и информатики,
Москва, Россия*

³ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

В настоящей работе исследованы превращения аморфного фуллерита C_{60} (aC_{60}) при высоких давлениях и высоких температурах и его взаимодействие с аустенитным железо-никелевым сплавом. Аморфный фуллерит C_{60} был получен механическим размолотом в планетарной шаровой мельнице типа Fritsch и спечен в интервале давлений 2–8 ГПа и температур 250–1450 °С. Структура исследована методами дифракции нейтронов, рентгеновских лучей и синхротронного излучения. Ниже 500 °С до 8 ГПа сохраняется структура aC_{60} , а при более высоких температурах, как и в случае кристаллического фуллерита, происходит переход сначала в аморфный, а потом в кристаллический графит. На основании этих исследований и данных из работы [1] была впервые построена диаграмма превращений aC_{60} .

Композит железо-никелевый сплав (33 ат. % Ni) с 25 ат. % aC_{60} был спечен в интервале температур 500–1100 °С и давлений 2–8 ГПа из смеси порошков кристаллического сплава Fe-Ni и aC_{60} . Методом нейтронной дифракции установлено, что при всех режимах спекания металлическая составляющая сохраняет исходную ГЦК кристаллическую структуру. Наблюдается корреляция между увеличением периода решетки (количеством растворенного углерода), относительной высотой дифракционного максимума (020) цементита (количеством цементита) и микротвердостью металлической составляющей. Обнаружен также барический эффект: с увеличением давления от 2 до 8 ГПа при спекании уменьшается количество растворенного в железо-никелевом аустените углерода и количества цементита, и, соответственно, снижается микротвердость металлической составляющей. Этот эффект объясняется тем, что при растворении углерода в аустените (по типу внедрения) объем возрастает.

Работа поддержана грантом РФФИ № 13-02-00208а.

1. П. А. Борисова, С. С. Агафонов, М. С. Блантер, В. П. Глазков, В. А. Соменков. Известия РАН. Серия физическая 77 (2013) 1634.

Квазидвумерный характер магнитного перехода «порядок – беспорядок» в системе YMn_6Sn_6

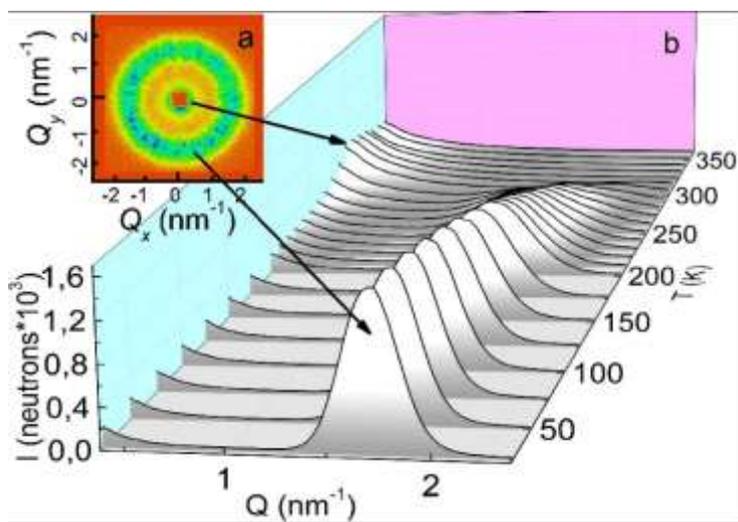
А. А. Быков^{1,2}, Ю. О. Четвериков², А. Н. Пирогов³, С. В. Григорьев^{1,2}

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

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

³ Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Методом малоуглового рассеивания нейтронов (МУРН) исследована магнитная структура гелимагнетика YMn_6Sn_6 в температурном диапазоне от 25 до 360 К (рис.). На зависимостях интенсивности от переданного импульса наблюдаются два пика: с центрами в $1,7 \text{ nm}^{-1}$ и в 0 nm^{-1} . При увеличении температуры по мере уменьшения интенсивности пика с центром в $1,7 \text{ nm}^{-1}$ происходит увеличение интенсивности пика с центром в 0 nm^{-1} . Вместе с тем происходит изменение формы профиля пика с центром в $1,7 \text{ nm}^{-1}$ из гауссовской на лоренцевскую. Это можно объяснить тем, что в температурном диапазоне 250–360 К в YMn_6Sn_6 происходит магнитный переход «порядок – беспорядок» гелимагнетика в состояние с ферромагнитными флуктуациями. Для пика с центром в $1,7 \text{ nm}^{-1}$ наблюдается анизотропия формы вдоль переданного импульса, которая изменяется согласованно с шириной на полувысоте этого пика, что говорит о квазидвумерности упорядочения ферромагнитных флуктуаций.



Типичная карта МУРН при температуре 260 К (a) и зависимость интенсивности рассеяния нейтронов от переданного импульса Q при различных значениях температуры (b)

1. *F. Canepa, R. Duraj, C. Lefèvre, B. Malaman, A. Mar, T. Mazet, M. Napolitano, A. Szytula, J. Tobola, G. Venturini, and A. Vernière.* J. Alloys Compd. 383, 10 (2004).
2. *G. Venturini, D. Fruchart, and B. Malaman.* J. Alloys Compd. 236, 102 (1996).
3. *N.K. Zajkov, N.V. Mushnikov, E.G. Gerasimov, V.S. Gaviko, M.I. Bartashevich, T. Goto, and V.I. Khrabrov.* J. Alloys Compd. 363, 40 (2004).

Эволюция диффузного рассеяния в монокристаллах $\text{Sr}_{60}\text{Ba}_{40}\text{Nb}_2\text{O}_6$

П. Ю. Ванина¹, А. А. Набережнов², С. А. Борисов², А. Vosak³

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

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

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

В работе приведены результаты исследования температурной эволюции критического рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в монокристалле одноосного сегнетоэлектрика релаксора $\text{Sr}_{60}\text{Ba}_{40}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN60). Определены значения критических индексов, корреляционные длины, температура перехода в релаксорное состояние. Рассмотрено влияние внешнего поля на диффузное рассеяние. В работе получены следующие результаты.

- Показано, что диффузное рассеяние состоит из двух компонент: рассеяние на сегнетофлуктуациях, описываемое лоренцианом, и рассеяние на конфигурационных флуктуациях, описываемое квадрированным лоренцианом.
- В нулевом приложенном поле:
 - значения критических индексов составляют: $\nu = 0,67(2)$, $\gamma = 1,33(17)$. Для них выполняется скейлинговое соотношение $\gamma = (2 - \eta) \cdot \nu$ с параметром Фишера $\eta = 0$, что свидетельствует о справедливости в данном случае модели полярных нанокластеров в неполярной матрице;
 - ниже температуры перехода ($T_C = 340,5(12)$ К) происходит «замерзание» корреляционной длины на значении $\xi_{crit} = 1/\kappa$ ($= 27(3)$ нм), и кристалл в упорядоченное состояние не переходит;
 - анализ критического рассеяния синхротронного излучения при комнатной температуре (кристалл в релаксорном состоянии) показал, что существуют две компоненты диффузного рассеяния, каждой из которых соответствуют различные корреляционные длины в направлении $a^* + b^*$ и оси c^* : для первой компоненты $\xi_{ab} \sim 10$ нм и $\xi_c \sim 15$ нм, для второй компоненты $\xi_{ab} \sim 3$ нм и $\xi_c \sim 25$ нм, что согласуется со значением корреляционной длины, полученной по результатам нейтронных исследований ($\xi_c = \xi_{crit} = 27(3)$).
- Приложение внешнего электрического поля подавляет конфигурационную компоненту диффузного рассеяния нейтронов вблизи узла обратной решетки (002) в монокристалле SBN60.

Влияние структурных параметров наночастиц на адсорбционные свойства магнитных жидкостей на границе раздела с твердым телом

И. В. Гапон^{1,2}, В. И. Петренко^{1,2}, Л. А. Булавин², М. В. Авдеев¹

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

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

Магнитные жидкости (МЖ) – коллоидные системы магнитных наночастиц в растворителях различной полярности. Для стабилизации данных систем часто используют слои поверхностно-активных веществ (ПАВ). Большой интерес к данным системам связан с возможностью их использования для управляемой доставки лекарств, диагностики и лечения онкологических заболеваний. Поэтому исследования биосовместимых МЖ являются очень актуальными. В то же время из-за специфических адсорбционных свойств поведение магнитных наночастиц в объеме и на границах раздела может сильно отличаться, что следует учитывать в различных прикладных целях. Также остается открытым вопрос относительно возможных различий в стабильности магнитных жидкостей в объеме и на границах раздела.

Целью данной работы было исследование адсорбционных свойств водных МЖ на границе раздела с твердым телом (кремний), а также изучение влияния структуры магнитных жидкостей в объеме на сорбционные свойства магнитных наночастиц. С помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов получена информация о структуре МЖ в объеме. Так, показано, что в начальной МЖ присутствуют плотные агрегаты магнитных наночастиц, а при добавлении полиэтиленгликоля в данную систему наблюдается структурная реорганизация и появление разветвленных фрактальных агрегатов. Метод нейтронной рефлектометрии позволил получить информацию о структуре и составе адсорбционных слоев на границе раздела МЖ/кремний и получить параметры МЖ в приграничной с кремнием области. Было показано, что из водной МЖ на поверхность кремния преимущественно адсорбируются отдельные полидисперсные магнитные наночастицы, покрытые оболочкой молекул ПАВ. Данный факт коррелирует с полученными ранее результатами для неполярной МЖ. При добавлении полиэтиленгликоля в водную магнитную систему адсорбционный слой не детектируется, что, скорее всего, связано с уменьшением доли мономеров в системе, и подтверждает предположение о преимущественной адсорбции отдельных наночастиц на поверхность кремния.

Структурные изменения в TlGaSe_2 при высоком давлении

С. Г. Джабаров^{1, 2}, Т. Г. Мамедов², А. И. Мамедов²,
С. Е. Кичанов³, В. Б. Алиева², Е. В. Лукин³

¹ *Bayerisches Geoinstitute, University Bayreuth, Bayreuth, Germany*

² *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

³ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Соединение TlGaSe_2 является представителем класса тройных халькогенидных полупроводников с общей формулой $\text{A}_3\text{B}_3\text{C}_6$ (А – Tl; В – Ga, In, Fe; С – S, Se). Согласно литературным данным TlGaSe_2 кристаллизуется в слоистой структуре и имеет при комнатной температуре и атмосферном давлении моноклинную решетку (пространственная группа симметрии C_2/c) с параметрами $a = 10,772 \text{ \AA}$, $b = 10,771 \text{ \AA}$, $c = 15,636 \text{ \AA}$, $\beta = 100,06^\circ$. Слои формируются тетраэдрами $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$, соединенными друг с другом атомами селена и состоящими в свою очередь из четырех тетраэдров GaSe_4 . Ионы одновалентного таллия располагаются в тригональных пустотах между комплексами $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$.

Эксперименты по нейтронной дифракции проводились на спектрометре ДН-6 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна) с использованием камер высокого давления с сапфировыми наковальнями в диапазоне внешних высоких давлений до 4,6 ГПа. Дифракционные спектры измерялись при угле рассеяния $2\theta = 90^\circ$. Характерное время измерения одного спектра – 2 ч. Давление в камере измерялось по сдвигу линии люминесценции рубина с точностью 0,05 ГПа. В качестве величины давления на образце использовалось значение, усредненное по величинам, определенным на нескольких кристаллах рубина небольшого размера (50–100 мкм), размещенных в различных точках поверхности образца.

Экспериментальные результаты показывают, что при нормальных условиях кристаллическая структура TlGaSe_2 описывается моноклинной симметрией с пространственной группой C_2/c . В интервале давлений $0,2 \text{ ГПа} < P < 0,9 \text{ ГПа}$ TlGaSe_2 претерпевает структурное фазовое превращение в моноклинную фазу без изменения пространственной группы симметрии. Дифракционный спектр в фазе высокого давления также соответствует моноклинной структуре с пространственной группой C_2/c . Получены барические зависимости параметров и объема элементарной ячейки для обеих фаз TlGaSe_2 .

Исследование кристаллической и магнитной структуры бариевых ферритов $\text{BaFe}_{11,9}\text{D}_{0,1}\text{O}_{19}$ ($\text{D} = \text{Al}$ и In) методом нейтронной дифракции высокого разрешения

А. С. Дорошкевич^{1, 2}, В. А. Турченко^{1, 2}, А. В. Труханов³,
И. А. Бобриков¹, С. В. Труханов³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

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

³ ГНПО «Научно-практический центр НАНБ по материаловедению», Минск, Беларусь

Интерес к исследованию бариевых ферритов с гексагональной структурой ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) и твердых растворов на их основе, допированных различными концентрациями ионов (Co , Sc , Ti , Nb и др.) [1], обусловлен их высокими функциональными свойствами: превосходная химическая стабильность и коррозионная стойкость [2] делают их экологически безопасными и годными к применению практически без ограничений во времени; сочетание высокой коэрцитивной силы ($H_c \sim 160\text{--}55$ кА/м) [3, 4] с достаточно высокой остаточной индукцией позволяет получать магниты с удовлетворительной удельной магнитной энергией; их низкая электропроводность ($\rho \sim 108$ Ом · см), позволяет применять ферритовые магниты при наличии высокочастотных магнитных полей. В настоящей работе изучено влияние диамагнитных ионов Al и In на особенности кристаллической и магнитной структуры бариевых ферритов $\text{BaFe}_{11,9}\text{D}_{0,1}\text{O}_{19}$ ($\text{D} = \text{Al}$ и In) в широком диапазоне температур методом нейтронной дифракции высокого разрешения.

Поликристаллические образцы $\text{BaFe}_{11,9}\text{Al}_{0,1}\text{O}_{19}$ и $\text{BaFe}_{11,9}\text{In}_{0,1}\text{O}_{19}$ были получены обычным керамическим методом, спекание проводили на воздухе при температуре 1300 °С (6 ч). Образец, допированный In , обладает большим объемом элементарной ячейки и коэффициентом термического расширения в сравнении с образцом допируемого ионами Al . По уширению дифракционных пиков были установлены зависимости микродеформаций от температуры исследуемых образцов. В области температур ниже комнатной в обоих образцах наблюдается «инварный эффект», т. е. коэффициент термического расширения практически равен нулю.

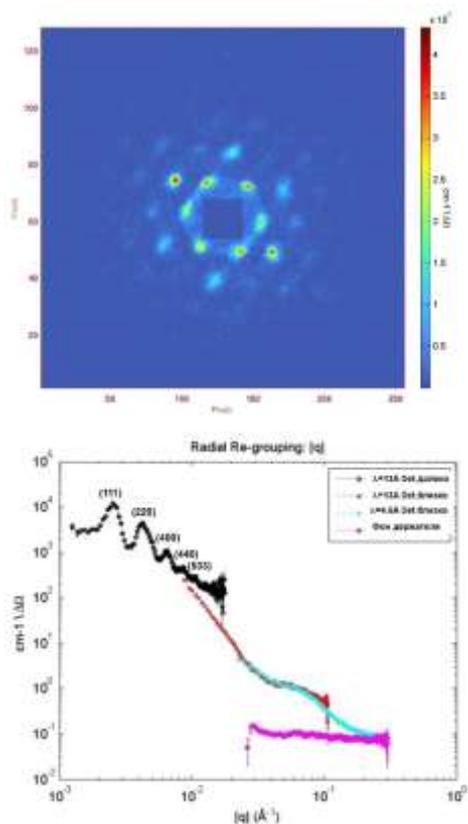
1. Pullar R.C. / Hexagonal Ferrites: A Review of the Synthesis, Properties and Applications of Hexaferrite Ceramics // Progress in Materials Science 57 (2012) 1191–1334.
2. Liu X., Wang J., Gan L.M., Ng S.C. and Ding J. / An Ultrafine Barium Ferrite Powder of High Coercivity from Water-in-Oil Microemulsion. Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 184 (1998) 344–354.
3. Castro S., Gayoso M., Rivas J., Greneche J.M., Mira J., Rodriguez C. / Structural and Magnetic Properties of Barium Hexaferrite Nanostructured Particles Prepared by the Combustion Method // Journal of Magnetism and Magnetic Materials 152 (1996) 61–69.
4. Makled M.H., Matsui T., Tsuda H., Mabuchi H., El-Mansy M.K., Morii K. / Magnetic and Dynamic Mechanical Properties of Barium Ferrite-Natural Rubber Composites // Journal of Materials Processing Technology 160 (2005) 229–233.

Малоугловое рассеяние нейтронов на 3D-упорядоченных нанокompозитах на основе опаловых матриц и $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ со структурой пирохлора

С. Н. Ивичева, Ю. Ф. Каргин

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

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (SANS) исследована структура 3D-упорядоченного нанокompозита на основе опаловой матрицы (ОМ) и титаната висмута со структурой пирохлора. Измерения методом SANS



ДК от ГЦК структуры 3D-нанокompозита ОМ/ $\text{Bi}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ и Q -зависимость SANS в двойном логарифмическом масштабе

были проведены на установке D33 (реактор ILL, Гренобль), работающей в геометрии, близкой к точечной, с коллимацией диаметром 2 и 10 мм в режиме монохроматической моды, на двух линиях волн нейтронов $\lambda = 4,6$ и 13 \AA , $\Delta\lambda/\lambda=10\%$. Использование двух дистанций «детектор – образец» (близко и далеко) позволило измерять интенсивности нейтронов в диапазоне переданных импульсов $1,5 \cdot 10^{-3} < Q < 3 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$. На рис. приведены дифракционная картина (ДК) малоуглового рассеяния нейтронов на образце композита размером $\sim 3 \times 5 \text{ мм}$ толщиной $\sim 1 \text{ мм}$ случайной ориентации и Q -зависимость SANS в двойном логарифмическом масштабе того же образца. Из анализа данных SANS установлено, что нанокompозит на основе ОМ и титаната висмута со структурой пирохлора имеет упорядоченную ГЦК структуру, ДК которого соответствует монокристалльной дифракции.

Индексирование в рамках ГЦК структуры позволило определить параметры ячейки нанокompозита, $a = 440 \pm 5 \text{ нм}$, что

соответствует размеру монодисперсных сферических частиц $\sim 310 \text{ нм}$. Широкий максимум интенсивности рассеяния $0,04 < Q < 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ возможно связан с внутренней структурой глобул ОМ или наночастицами титаната висмута размером $\sim 20 \text{ нм}$, расположенными (по данным электронной микроскопии) на поверхности глобул ОМ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 13-02-00662-а. Авторы выражают особую признательность А. С. Иванову (ILL, Гренобль).

Нейтроннографический текстурный анализ мантийных перидотитов массива Бальмуччия (Италия)

Т. И. Иванкина¹, В. В. Кононихина², Т. Локаичек³

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

² *Институт геофизики Уро РАН, Екатеринбург, Россия*

³ *Институт геологии АН Чешской Республики, Прага, Чехия*

Исследование посвящено анализу влияния кристаллографической текстуры оливина на упругую анизотропию мантийных перидотитов массива Бальмуччия в Италии. Информация о преимущественной ориентировке зерен получена методом нейтронной дифракции, выполненной на времяпролетном дифрактометре СКАТ (ОИЯИ, Дубна). В докладе представлены результаты исследования образцов перидотитов сферической формы диаметром 5 см, состоящих из оливина, энстатита и диопсида. Параметром, характеризующим преимущественную ориентировку зерен, является функция распределения зерен по ориентациям (ФРО). Ее восстановление для всех образующих горную породу минералов было проведено на основе времяпролетных дифракционных спектров. Были построены полюсные фигуры главных кристаллографических осей (100), (010), (001) различных минеральных фаз и сделан вывод о наибольшей степени преимущественной ориентировки зерен оливина. Путем привлечения более ранних исследований механизмов формирования преимущественных ориентировок в оливиновых образцах был проведен анализ условий образования мантийных перидотитов, показавший формирование кристаллографической текстуры оливина в результате пластической деформации посредством внутрикристаллического скольжения при температурах от 1 000 до 1 600 °С, что соответствует глубинам от 60 до 150 км. Также были сделаны предположения о направлении действия тектонических сил, являющихся причиной выхода мантийного вещества на поверхность Земли. На основании данных о ФРО всех породообразующих минералов, с учетом упругих модулей монокристаллов, были рассчитаны трехмерные распределения скоростей продольных упругих волн в образцах. Результаты расчета сравнивались с экспериментально измеренными при различных давлениях скоростями упругих волн, в результате чего был сделан вывод о наибольшем влиянии преимущественной ориентировки зерен оливина на анизотропию скоростей упругих волн, что в дальнейшем может использоваться при интерпретации сейсмических данных.

Неравновесная заселенность доменов с разной киральностью в $TbMn_2O_5$: исследование методом SNP

М. Д. Кучугура^{1,2}, И. А. Зобкало^{1,2}

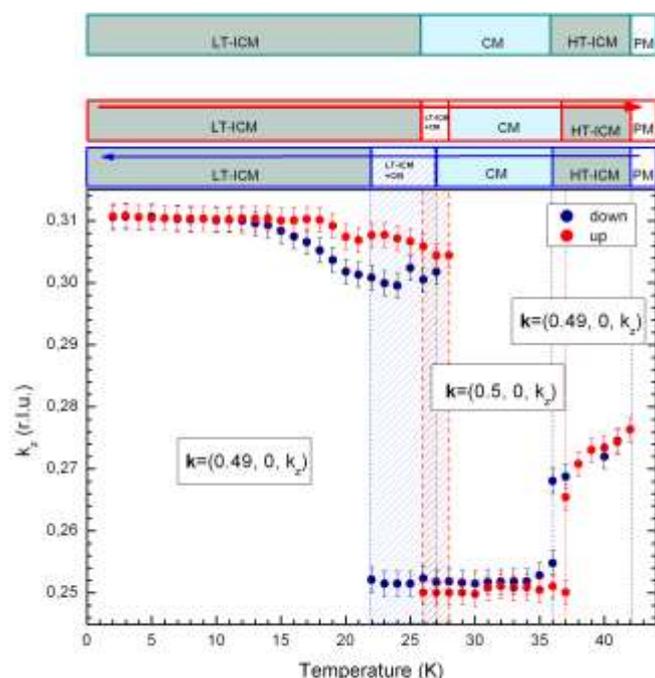
¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

Семейство редкоземельных манганатов $R Mn_2 O_5$ привлекает особое внимание, т. к. эти соединения демонстрируют сильную связь между магнитными и электрическими свойствами. Экспериментальные доказательства взаимосвязи между магнитными и электрическими свойствами в этих соединениях позволяют надеяться на их потенциальное применение для функциональных устройств.

Для объяснения взаимосвязи магнитного и сегнетоэлектрического порядков в $R Mn_2 O_5$ был предложен ряд теоретических моделей. Однако ни одна из них не дает полного соответствия с наблюдаемыми экспериментальными фактами.



Магнитная фазовая диаграмма $TbMn_2O_5$

$TbMn_2O_5$ от электрического поля. Обнаружена разность заселенностей доменов с «правой» и «левой» киральностью, не зависящая от величины электрического поля. Структура поляризационной матрицы показывает, что магнитная структура близка к спиральной с плоскостью вращения магнитных моментов, составляющей небольшой угол с плоскостью ab .

Соединение $TbMn_2O_5$ имеет сложную магнитную фазовую диаграмму вследствие обменного вырождения, реализующегося в исследуемых системах (рис.). Из-за конкуренции близких по величине обменных взаимодействий не только ближайших, но и следующих за ближайшими соседей в системе происходит каскад магнитных фазовых переходов с появлением / исчезновением независимо как по оси a , так и по оси c несоразмерной магнитной структуры.

Методом сферической нейтронной поляриметрии выполнены исследования зависимости магнитных свойств монокристаллического

Соперничество и сотрудничество «правила льда» и магнитного поля в инвертированных опалах

*А. А. Мистонов^{1,2}, И. С. Шишкин^{1,2}, И. С. Дубицкий^{1,2},
Н. А. Григорьева¹, А. Хайнеман³, С. В. Григорьев^{1,2}*

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

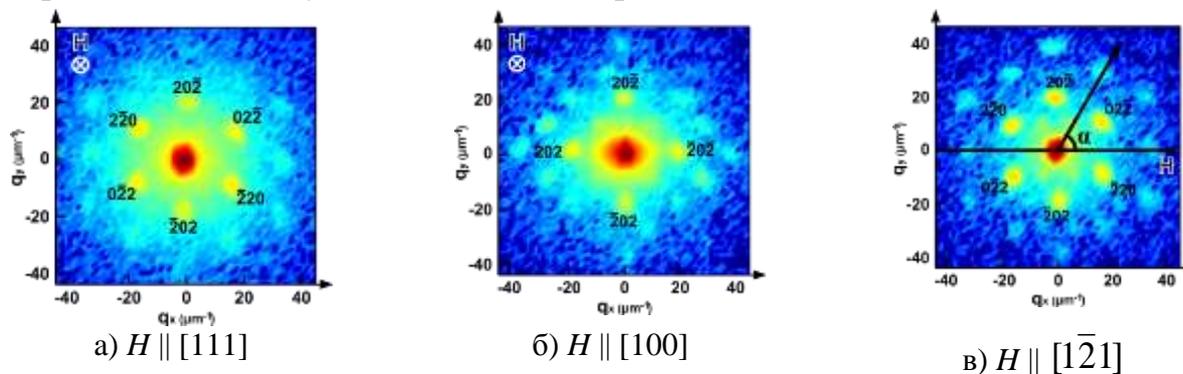
² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Helmholtz Zentrum Geesthaht, Geesthacht, Germany

Магнитные инвертированные опалоподобные структуры (ИОПС) создаются путем электрохимического осаждения ферромагнитного материала в пустоты искусственного опала, с последующим вытравливанием исходной опаловой матрицы. Таким образом, ИОПС представляют собой трехмерную сеть наноузлов тетраэдрической и кубической формы, соединенных перемычками. При этом инвертированные опалы обладают симметрией гранецентрированной кубической решетки с постоянной 720 ± 20 нм, и все вышеупомянутые перемычки направлены вдоль осей типа $\langle 111 \rangle$.

Ранее была предложена модель описания магнитного поведения ИОПС, основанная на аналоге «правила льда», сформулированного для трехмерных кристаллов с магнитной геометрической фрустрацией – спиновых льдов. Согласно этой модели для каждого кубического или тетраэдрического узла ИОПС количество входящих векторов локальной намагниченности должно быть равно количеству выходящих векторов.



Картинки дифракции на Со ИОПС при $H = 400$ мТл при различных направлениях магнитного поля

В данной работе методом малоугловой дифракции нейтронов было проведено исследование магнитного поведения кобальтовых ИОПС при трех различных направлениях магнитного поля: вдоль осей $[111]$, $[100]$ и $[\bar{1}2\bar{1}]$ (рис.), что соответствует трем различным видам парного поведения «правила льда» и магнитного поля в процессе намагничивания ИОПС – соперничество, сотрудничество и независимое действие. В первом случае ($H \parallel [111]$) противоборство приводит к нарушению «правила льда». Поле, направленное вдоль $[100]$ способствует выполнению «правила льда», что приводит к быстрому намагничиванию. При $H \parallel [\bar{1}2\bar{1}]$ «правило льда» накладывает ограничения на конфигурации векторов локальной намагниченности, выстраивающихся так, чтобы иметь положительные проекции на направление поля.

Структура водных феррожидкостей, полученных разными методами синтеза, по данным МУРН

*А. В. Нагорный^{1,2}, В. И. Петренко^{1,2}, О. И. Иванов^{1,2}, М. В. Авдеев¹,
Л. А. Булавин², А. Г. Белоус³, С. А. Солопан³, А. Еленич³*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

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

³ Институт общей и неорганической химии им. В. И. Вернадского НАНУ, Киев, Украина

Отдельный класс коллоидных систем представляют магнитные жидкости (МЖ), или феррожидкости. Устойчивость к образованию агрегатов в них обеспечивается, как правило, наличием стабилизационной оболочки. МЖ проявляют хорошую стабильность, что делает возможным их практическое применение в разных технических и биомедицинских целях [1, 2]. Одним из основных направлений исследований, связанных с изучением феррожидкостей, является разработка новых и оптимизация существующих методов синтеза магнитных частиц [3].

В работе представлены результаты исследований методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) структуры водных феррожидкостей, приготовленных различными химическими методами с добавлением полисахарида – агарозы. Приводятся оценки размеров частиц магнетита в системе, а также анализируется степень агрегации в рассмотренных МЖ.

1. *Belous A., Solopan S., Yelenich O., Osinsky S., Bubnovskaya L., Bovkun L.* Synthesis and Properties of Ferromagnetic Nanoparticles for Potential Biomedical Application // IEEE ELNANO 2014. Kyiv, 2014, P. 245–249. DOI: 10.1109/ELNANO.2014.6873922.
2. *Kopcansky P., Timko M., Kovac J., Vaclavikova M., Odenbach S.* // *Jornal of Physics: Condensed Matter.* 20(20), 200301 (2008).
3. *Solopan S., Yelenich O., Kolodiazhnyi T., Greneche J., Belous A.* Influence of Synthesis Conditions on the Properties of Nanoparticles and Core/Shell Structures Based on Fe₃O₄ // Intern. Conf. on Oxide Materials for Electronic Engineering – Fabrication, Properties and Applications (OMEE-2014). Ukraine, Lviv, May 26–30, 2014. P. 83–84. DOI: 10.1109/OMEE.2014.6912350.

Переход волны зарядовой плотности при магнитном упорядочении антиферромагнитного гелимагнетика TbGe_{2,85}

*Д. А. Саламатин^{1,2}, С. Е. Кичанов³, В. А. Сидоров², М. Будзинский⁴,
А. И. Величков³, А. В. Саламатин³, А. Е. Петрова², Л. Н. Фомичева²,
А. В. Николаев^{1,5}, Г. К. Рясный⁵, Д. П. Козленко³, А. В. Цвященко^{2,5}*

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия

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

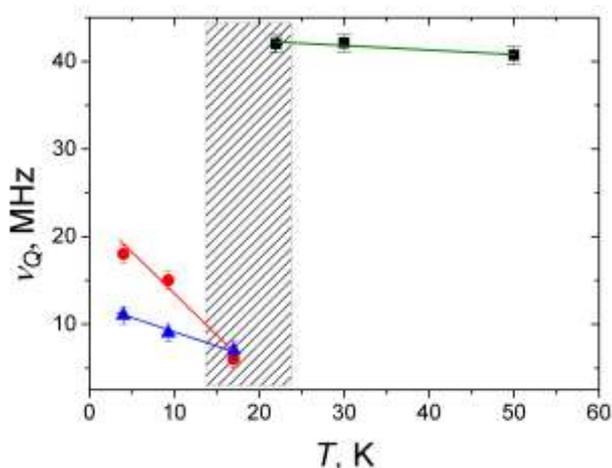
³ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

⁴ Institute of Physics, University Maria Curie-Skłodowska, Lublin, Poland

⁵ Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына МГУ, Москва, Россия

Четырехдетекторный спектрометр [1], предназначенный для измерения спектров возмущенных угловых гамма-гамма корреляции (ВУК), оснащенный оптическим четырехконным криостатом фирмы JANIS был использован для измерения спектров угловой корреляции на ядрах ¹¹¹Cd в TbGe_{2,85}.

Антиферромагнетик TbGe_{2,85} упорядочивается при температуре 19 К в несоизмеримую спиральную структуру с волновым вектором $k = 2\pi/a$ (0,5; 0; 0,1616) с магнитным моментом Tb $\mu = 7,8 \mu_B$. Из измерения температурных зависимостей электрического сопротивления и теплоемкости было обнаружено возникновение волны зарядовой плотности (ВЗП) ниже 145 К. Спектры угловой анизотропии, измеренные в диапазоне температур 4–300 К показали, что при магнитном переходе квадрупольная частота скачком уменьшается с 40 до 7 МГц. При дальнейшем понижении наблюдается расщепление квадрупольной частоты на две, величины которых растут с разной скоростью. Такое температурное поведение квадрупольной частоты указывает на то, что ниже 145 К в соединении возникает несоизмеримая ВЗП, а при температуре ниже 19 К ВЗП становится соизмеримой (рис.).



Работа была поддержана грантом Полномочного представителя правительства Республики Польша и РФФИ, грант № 14-02-0001.

1. V.B. Brudanin et al. PAC Spectrometer for Condensed Matter Investigation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, v. 547, p. 389–399 (2000).

Влияние ионов Sr на кристаллическую и магнитную структуры твердых растворов $Ba_{2-x}Sr_xFeMoO_6$ ($x = 0-1,6$)

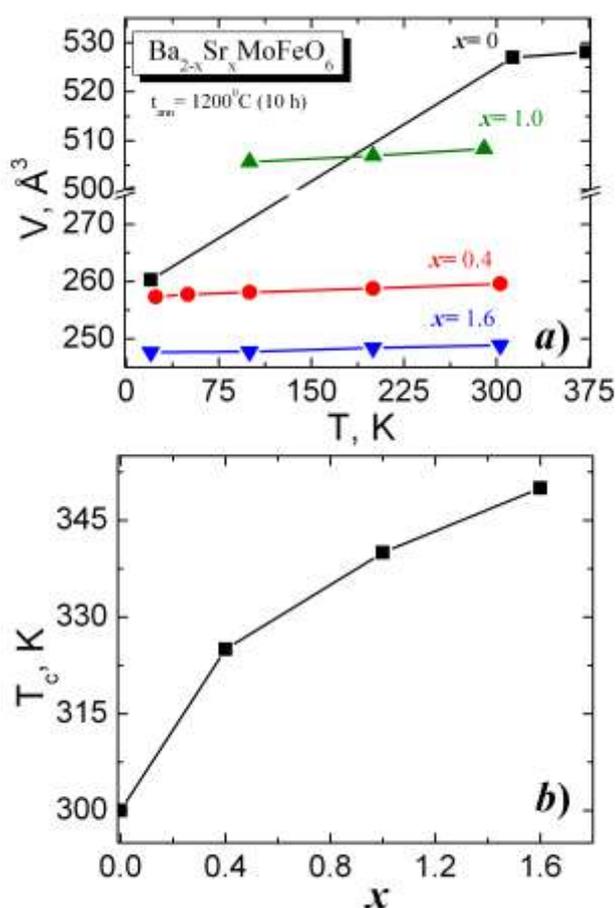
В. А. Турченко^{1,2}, Н. А. Каланда³, Л. В. Ковалев³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

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

³ Научно-практический центр НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь

Двойные перовскиты с общей формулой $A_2B'V''O_6$ (где $A = La, Pr, Sr, Ba$ и т. д., а B' и $B'' = W, Co, Mn, Fe, Mo$ и т. д.) [1, 2] обладают широким спектром полезных физических свойств: высокой степенью спиновой поляризации



электронов проводимости, значительным туннельным магниторезистивным эффектом в слабых магнитных полях и высокими значениями температуры Кюри [3, 4], что делает их перспективными в практическом применении в устройствах спиновой электроники (спинтроники) для создания спиновых клапанов и сенсоров магнитного поля.

Величина влияния спинового эффекта таких материалов сильно зависит от степени поляризации и плотности состояний на уровне Ферми, на которую, в свою очередь, критическое влияние оказывают как валентное состояние, так и средний размер катионов B' и B'' . Цель данной работы – установить влияние замещения ионов Ba ионами Sr на кристаллическую и магнитную

структуру двойных перовскитов $Ba_{2-x}Sr_xFeMoO_6$ ($x = 0-1,6$) в широком диапазоне температур (рис.). Образцы были получены методом твердофазного синтеза при температуре 1200°C в непрерывном потоке H_2/Ar в течение 10 ч. Исследования кристаллической и магнитной структуры были проведены методом нейтронной дифракции на фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) [5] на импульсном реакторе ИБР-2 в Дубне. Все исследованные образцы однофазные. Замещение ионов Ba ионами Sr ведет к изменению типа кристаллической решетки: кубический ($Fm\bar{3}m$) \rightarrow тетрагональный ($I4/m$) \rightarrow ромбический

(Fmmm) → тетрагональный ($I4 / m$). При этом объем элементарной ячейки (V) уменьшается, а значение температуры Кюри (T_c) – увеличивается.

1. *A. H. Habib, A. Saleem, C. V. Tomy, and D. Bahadur*, J. Appl. Phys. V. 97, 10A906 (2005).
2. *Fiona C. Coomer and Edmund J. Cussen*, Inorg. Chem. V.53, P. 746 (2014).
3. *K.-I. Kobayashi, T. Kimura, H. Sawada, K. Terakura, Y. Tokura*, Nature (London) 395 (1998) 677.
4. *A. W. Sleight, J. F. Weiher*, J. Phys. Chem. Solid 33 (1972) 679.
5. *A. M. Balagurov*, Neutron News 2005. V. 16. № 3. P. 8.

Fluctuation-Induced First-Order Phase Transition in Helimagnet MnGe

*M. Deutsch*¹, *P. Bonville*², *A. V. Tsvyashchenko*^{3,4}, *L. N. Fomicheva*³, *F. Porcher*¹,
*F. Damay*¹, *S. Petit*¹ and *I. Mirebeau*¹

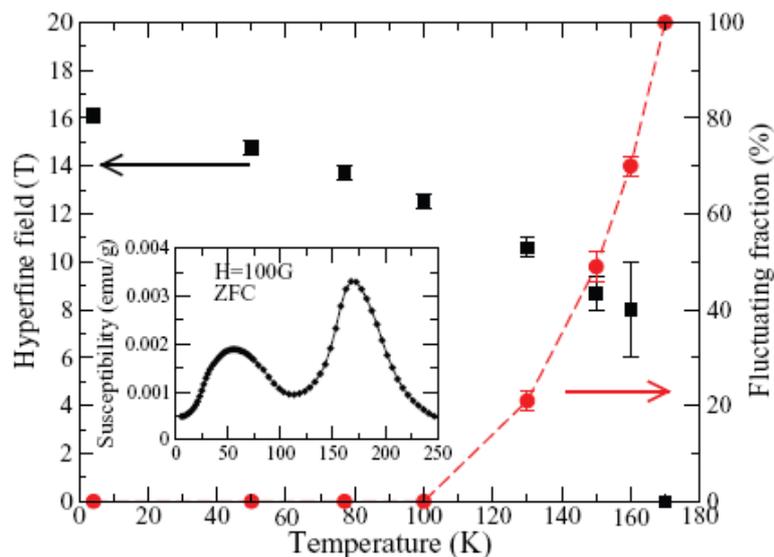
¹ CEA, Centre de Saclay, DSM/IRAMIS/Laboratoire Leon Brillouin, Gif-sur-Yvette, France

² CEA, Centre de Saclay, DSM/IRAMIS/SPEC, Gif-sur-Yvette, France

³ Vereshchagin Institute for High Pressure Physics Russian Academy of Sciences, Troitsk, Moscow, Russia

⁴ Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics MSU, Moscow, Russia

The MnGe chiral magnet below $T_N = 170$ K was investigated by Mossbauer spectroscopy, and by neutron diffraction at ambient pressure. At ambient pressure, it was observed the coexistence of two magnetic phases belonging to the same crystal phase in a large temperature range (down to 100 K) below T_N : ferromagnetically correlated rapidly fluctuating spins coexist with frozen spins involved in the helical order. In figure are represented the thermal variations of the hyperfine field (left scale) and of the fluctuating fraction (right scale). The presence of the narrow single line alone at 170 K means that, at this temperature, the whole sample is paramagnetic and that the electric field gradient (EFG) is actually zero in the paramagnetic phase. As to the thermal variation of the hyperfine field, which abruptly drops from 8 T at 160 K to zero at 170 K, it strongly suggests that the transition has a pronounced first order character. The coexistence of ordered and fluctuating/paramagnetic states is also a typical feature of a fluctuation-induced first order transition.



Thermal variations of the hyperfine field (black solid squares) and of the fluctuating fraction (red solid circles) deduced from the Mossbauer spectra in Fe-doped MnGe. The red dashed line is a guide for the eye. The inset shows the susceptibility vs temperature in Fe-doped MnGe

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 14-02-00001) and by special programs of the Department of Physical Science, Russian Academy of Sciences.

Исследование неупругого рассеяния нейтронов в сегнетоэлектрике цирконате-титанате свинца с концентрацией титана 20 %

Д. А. Андроникова^{1,2}, С. Б. Вахрушев^{1,2}, Р. М. Gehring³,
J. A. Rodriguez-Rivera³, И. В. Чакичева¹

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

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

³ NIST Center for Neutron Research, National Institute of Standards and Technology,
Gaithersburg, USA

Цирконат-титанат свинца (ЦТС) – классический сегнетоэлектрик, который благодаря своим уникальным пьезоэлектрическим свойствам занимает лидирующие положения на рынке пьезоэлектрических материалов. В зависимости от концентрации титана ЦТС может проявлять различные свойства. ЦТС в области концентраций титана от 7 до 35 % испытывает два фазовых перехода: переход из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую высокотемпературную и переход из сегнетоэлектрической высокотемпературной фазы в сегнетоэлектрическую низкотемпературную. В параэлектрической фазе ЦТС имеет симметрию кубического перовскита. Симметрия сегнетоэлектрических фаз была определена как ромбоэдрическая [1]. Согласно [2] сегнетоэлектрическая высокотемпературная фаза отличается от низкотемпературной изменением характера вращения кислородных октаэдров.

Данная работа посвящена исследованию монокристалла ЦТС $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ с концентрацией титана $x = 0,2$ методом неупругого рассеяния нейтронов. Эксперимент проводился на спектрометре холодных нейтронов MACS, расположенном на нейтронном источнике Национального института стандартов и технологий (NIST). Измерения были проведены в широком диапазоне температур, что позволило проследить изменения динамики кристаллической решетки при фазовых переходах. Подробное обсуждение полученных результатов будет проведено в постерном докладе.

1. Glazer M. Acta Cryst. V. B34. P. 1060–1065 (1978).

2. Viehland D. Ferroelectrics. V. 183. P. 311–319 (1996).

Многослойная магнитная наноструктура Fe/Co и новый вариант нейтронного поляризационного анализа

В. Г. Сыромятников^{1, 2}, Чжоу Зо Лин²

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

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

В работе представлены результаты экспериментального исследования магнитной многослойной наноструктуры Fe/Co методом нейтронной рефлектометрии. Так же в работе на примере нейтронной рефлектометрии по времени пролета рассмотрен новый вариант полного нейтронного поляризационного анализа с использованием магнитного многослойного мультимонохроматора – биполяризатора на основе пары Fe/Co. Приведено сравнение с традиционными способами нейтронного поляризационного анализа.

Определению киральности в поликристаллических соединениях $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$

*Н. М. Чубова¹, В. А. Дядькин^{1,2}, Е. В. Москвин^{1,3}, Ch. Dewhurst⁴,
С. В. Григорьев^{1,3}*

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

² *Swiss-Norwegian Beam Lines at European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

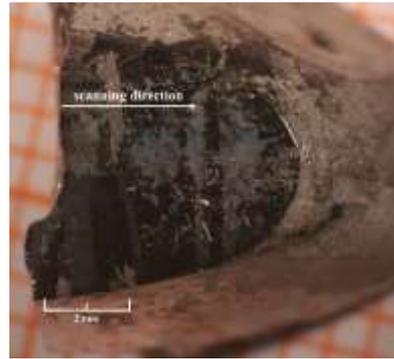
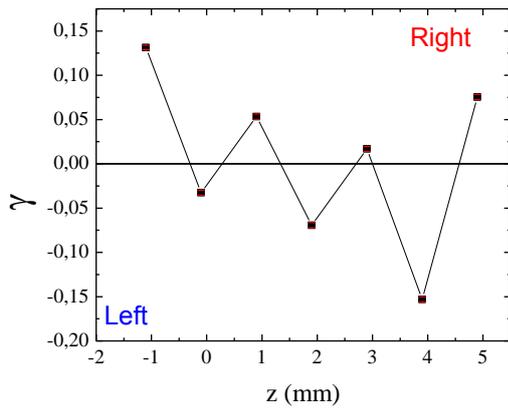
³ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Institut Laue-Langevin, Grenoble, France*

Исследованы две группы крупных поликристаллических образцов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ (12) с $x = 0,1; 0,15; 0,20; 0,25; 0,30$ и $0,50$. Известно [1], что магнитная киральность γ_m моносилицидов переходных металлов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, непосредственно связана с киральностью Γ_C кристалла, как $\gamma_m = -\Gamma_C$. Главная цель эксперимента состоит в определении среднего показателя структурной киральности Γ_C посредством измерения магнитной киральности γ_m с помощью метода малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

Для исследования были взяты поликристаллы, оставшиеся в тигеле по завершении процесса выращивания методом Чохральского. После тщательной полировки образцов можно наблюдать кристаллиты, которые обладают иглоподобной формой, а их средний объем составляет порядка 2 мкм^3 . Образец измеряли в магнитном поле так, чтобы волновой вектор магнитных спиралей различных кристаллитов был сориентирован вдоль магнитного поля. При этом на картине рассеяния формируется брэгговский пик, интенсивность которого измеряли при двух ориентациях поляризации падающего пучка нейтронов.

Магнитную киральность поликристалла измеряли при скане образца с линейными размерами 10 мм щелью порядка 1 мм с шагом в 1 мм . Установлено, что магнитная киральность γ_m сильно колеблется от $-0,6$ до $+0,6$ на масштабе в $1-2 \text{ мм}$. При этом точность определения киральности зависит от статистики измерения интегральной интенсивности нейтронов в пике. Средняя магнитная киральность поликристаллов не зависит от концентрации, но флуктуирует вблизи нуля на величину $0,1-0,2$, что указывает на невысокую статистику усреднения по числу кристаллитов в образце (рис.).



Спиновая киральность γ вдоль длины образца z для $\text{Fe}_{90}\text{Co}_{10}\text{Si}$ (слева);
фотография поверхности поликристалла $\text{Fe}_{90}\text{Co}_{10}\text{Si}$ (справа)

1. *C. B. Григорьев, D. Chernyshov, B. A. Дядькин, В. Дмитриев, С. В. Малеев, Е. В. Москвин, D. Menzel, J. Schoenes, and H. Eckerlebe. Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 037204.*

Исследование мезоструктуры легированных висмутом силикатных и алюмосиликатных стекол методом МУРР

*А. В. Чумакова¹, Г. П. Копица¹, А. П. Чумаков¹, Р. Ермаков²,
Л. Д. Исхакова², В. Angelov³*

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

² *Научный центр волоконной оптики РАН, Москва, Россия*

³ *Institute of Macromolecular Chemistry, Prague, Czech Republic*

Активированные висмутом стекла исследуются в последние 10 лет как перспективные материалы для волоконной оптики, у которых диапазон люминесценции в ближней ИК-области (1 100–1 700 мкм) совпадает с телекоммуникационным окном прозрачности силикатных световодов [1]. Активированные висмутом волоконные световоды могут быть использованы для создания лазеров, усилителей и суперфлуоресцентных источников. Волоконные лазеры с висмутом были впервые реализованы в Научном центре волоконной оптики (НЦВО РАН) [2], волоконный усилитель создан на инновационном предприятии «НЦВО – Фотоника».

Несмотря на успехи в создании устройств на основе волоконных световодов с висмутом в качестве активатора, природа висмутовых активных центров (ВАЦ) до сих пор не установлена. Ряд гипотез [3, 4] предполагает наличие в стекле и волоконных световодах кластеров наноразмеров, что нуждается в экспериментальном подтверждении.

В настоящей работе методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей была исследована мезоструктура легированных висмутом силикатных ($\text{SiO}_2\text{-Bi}$) и магний-алюмосиликатных стекол ($\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$), которые широко применяются для создания оптоволокон. Измерения МУРР были проведены в диапазоне переданных импульсов $5 \cdot 10^{-3} < q < 4 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$.

Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы рассеивающих неоднородностей, а также прослежена их зависимость как от концентрации легирующих добавок, так и от условий синтеза.

1. *E.M. Dianov // J. Lightwave Technology. 2013. V. 31. Iss. 4. P. 681–688.*
2. *I.A. Bufetov, E.M. Dianov // Laser Phys. Letters. 2009. V. 6. Iss. 7. P. 487–504.*
3. *B. Xu, Sh. Zhou, D. Tan, Zh. Hong, J. Hao, J. Giu // J. Appl. Phys. 2011. V. 113. 083503.*
4. *M. Peng, G. Dong, L. Wondracek et al. // J. Non-Cryst. Solids. 2011. V. 357. P. 2241–2245.*

**Неупругое рассеяние синхротронного излучения на монокристалле
цирконата-титаната свинца с концентрацией титана 0,7 %**

*Д. А. Андроникова^{1, 2}, А. А. Босак³, Ю. А. Бронвальд^{1, 2},
Р. Г. Бурковский^{2, 3}, С. Б. Вахрушев^{1, 2}, Н. Г. Леонтьев⁴,
И. Н. Леонтьев⁵, А. В. Филимонов², Д. Ю. Чернышов³*

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

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

³ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

⁴ *Азово-Черноморский инженерный институт, Зерноград, Россия*

⁵ *Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

Как известно, чистый цирконат свинца при комнатной температуре является антисегнетоэлектриком, симметрия антисегнетоэлектрической фазы – орторомбическая. Между антисегнетоэлектрической и высокотемпературной параэлектрической фазами в узком температурном диапазоне наблюдается промежуточная фаза, симметрия которой была определена как ромбоэдрическая. При допировании цирконата свинца титаном область температур, в которых существует данная промежуточная фаза, значительно расширяется. Как было показано с помощью дифракции электронов, в промежуточной фазе цирконата-титаната свинца (ЦТС) наблюдается модуляция структуры, приводящая к возникновению дополнительных сателлитов в окрестности М-точки [1, 2]. При низких температурах ЦТС является антисегнетоэлектриком вплоть до 6 % титана [3].

Таким образом, в ЦТС с малыми концентрациями титана наблюдается последовательность фазовых переходов параэлектрик – сегнетоэлектрик – антисегнетоэлектрик. В связи со сложностью наблюдаемой картины фазовых переходов, а также в связи с отсутствием кристаллов хорошего качества микроскопические причины процессов, сопровождающих фазовые переходы, остаются не до конца выяснены.

С целью исследования динамики кристаллической решетки в ЦТС нами был проведен эксперимент по неупругому рассеянию синхротронного излучения на монокристалле $\text{PbTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ с концентрацией титана $x = 0,07$ %. Эксперимент проводился на спектрометре неупругого рассеяния, установленного на линии ID28 синхротронного источника ESRF. Особое внимание было уделено исследованию динамики поперечных фононов, распространяющихся в направлениях. Было прослежено изменение энергии этих фононов при приближении к переходу в промежуточную фазу, а также исследовано температурное поведение центрального пика.

1. *D. Viehland, Phys. Rev. B 52, 778 (1995).*

2. *S. Watanabe, Phys. Rev. B, 63, 134103 (2001).*

3. *R W Whatmore, J. Phys. C: Solid State Phys. Vol. 11, (1978).*

Исследование структурно-функциональных комплексов хроматина

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

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

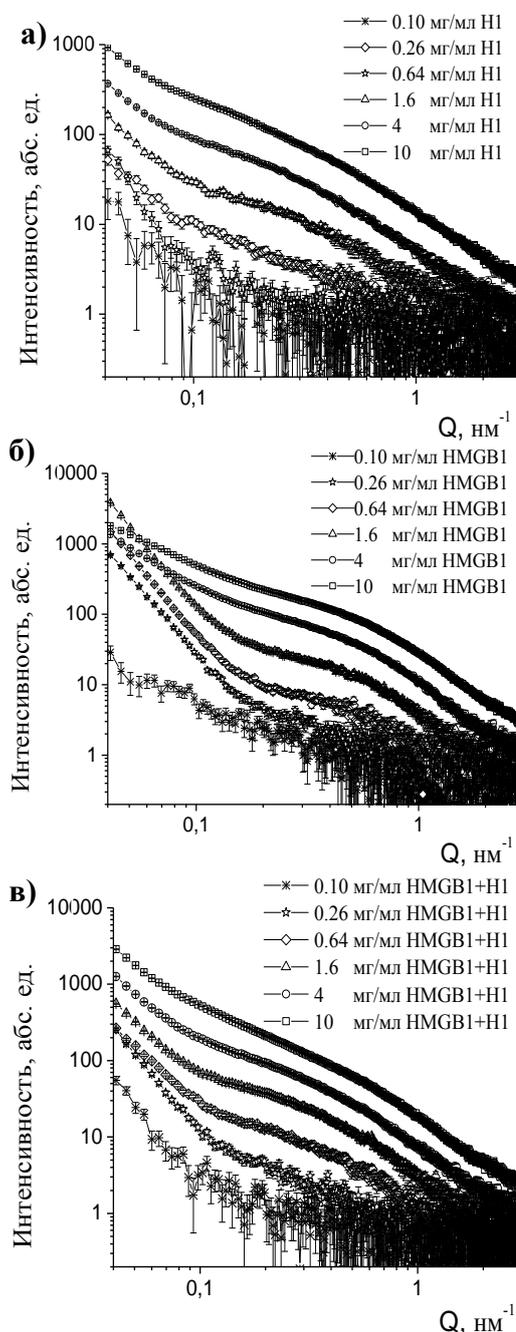
² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ European Molecular Biology Laboratory, EMBL Grenoble Outstation

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

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

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



Зависимость интенсивности синхротронного рассеяния от величины переданного импульса для растворов: а – линкерного гистона H1; б – белка HMGB1; в – смеси HMGB1 и H1 в соотношении 1:1 различной концентрации

Особенности фазовой диаграммы цирконата-титаната свинца в области малых концентраций титана

Ю. А. Бронвальд^{1, 2}, Д. А. Андроникова^{1, 2}, Р. Г. Бурковский^{1, 3}, С. Б. Вахрушев^{1, 2},
Н. Г. Леонтьев⁴, И. Н. Леонтьев^{5, 6}, А. П. Леонтьев¹, Д. Ю. Чернышов⁷

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет, Санкт-Петербург

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

³ European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

⁴ Азово-Черноморская государственная агроинженерная академия, Россия

⁵ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

⁶ Conditions Extrêmes et Matériaux: Haute Température et Irradiation – CNRS, France

⁷ European Synchrotron Radiation Facility, SNBL, Grenoble, France

Нами проведено исследование структуры цирконата-титаната свинца (ЦТС) с шестипроцентной концентрацией титана свинца методом монокристаллической дифракции синхротронного излучения. Установлено существование ранее не зарегистрированной фазы, характеризующейся присутствием несоразмерной сверхструктуры и находящейся в температурном интервале между низкотемпературной антисегнетоэлектрической и высокотемпературной ромбоэдрической фазами. Показано, что низкотемпературная антисегнетоэлектрическая фаза имеет симметрию ниже ромбоэдрической.

При высокотемпературном фазовом переходе наблюдается гистерезис, выраженный в переохладении сегнетоэлектрической фазы. Перестройка из кубической симметрии в ромбоэдрическую сопровождается возникновением сверхструктурных рефлексов М-типа с координатами зоны Бриллюэна (0,5 0,5 0). Ввиду отсутствия погасаний рефлексов М-типа при $h = k$ можно сделать вывод, что наличие данной сверхструктуры не связано с поворотом кислородных октаэдров и, таким образом, должно быть вызвано смещениями ионов свинца. В узком температурном диапазоне наблюдается несоразмерная модуляция сверхструктуры М-типа в виде ее расщепления. Как показано в работе [1], выполненной для близких составов ЦТС, это может быть связано с наличием антифазных границ в сетке антипараллельных смещений ионов свинца.

Наличие новой, неизвестной ранее фазы в ЦТС исследуемого состава говорит о том, что используемая в настоящий момент фазовая диаграмма ЦТС (полученная методом порошковой рентгеновской дифракции) нуждается в серьезном уточнении в области составов с малой концентрацией титаната свинца.

1. Dwight Viehland et al. Structural and Property Studies of High Zr-Content Lead Zirconate Titanate. J. Ph.vs. Chem Solids Vol. 57, No. 10, pp. 1545–1554.

EXAFS-исследования наноструктур полупроводников, осажденных в матрицы пористого оксида алюминия

Р. Г. Валеев^{1,2}, В. В. Кривенцов³

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

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

³ *Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия*

В настоящее время наука о материалах активно развивает направление, связанное с получением и исследованием новых наноматериалов для различных областей технологии и инженерии. В связи с этим разрабатываются и исследуются полупроводниковые наноструктуры в оксидных матрицах. Такие структуры позволяют не только избежать переноса заряда между отдельными частицами, но и защитить их от внешних воздействий [1–3].

Целью настоящей работы является проведение исследований локальной атомной структуры наночастиц Ge, GaAs и ZnSe, осажденных в матрицы пористого Al₂O₃ методом термического напыления. Для сравнения использовались пленки материалов, синтезированные вместе с наноструктурами. Показано, что локальная атомная структура наночастиц бинарных полупроводников в матрицах отличается по сравнению с пленками. Это связано с лучшей стехиометрией состава, которая объясняется иным механизмом конденсации материала в пористой матрице по сравнению с гладкой поверхностью подложки.

Работа выполнялась в рамках проекта Президиума УрО РАН № 15-9-2-28.

1. Lu T., Dun S., Hu Q. *et al.* NIM B, 2006, 250, 183–187.

2. Hutagalung S.D., Choon L.S. African Physical Review, 2008, 2, 159–160.

3. Cho S., Lim H., Lee S. Journal of the Korean Physical Society, 2007, 51, 1758–1763.

In-situ монокристалльная дифракция высокого разрешения во внешнем электрическом поле

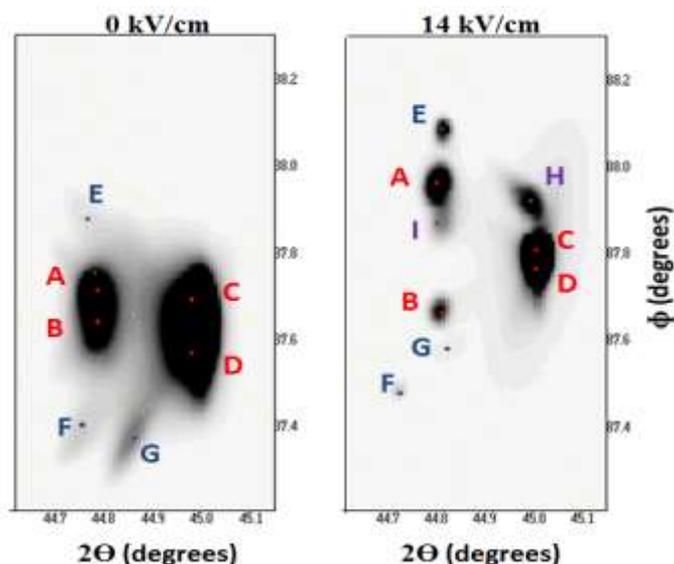
Т. Ю. Вергентьев

Санкт-Петербургский политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия

Сегнетоэлектрики с составами, близкими к морфотропной фазовой границе, имеют уникальные физические свойства, представляющие значительный интерес для практических применений. Одним из часто используемых в промышленности сегнетоэлектриков является твердый раствор $0.67\text{Pb}(\text{Mg}_{1/2}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.33\text{PbTiO}_3$ (PMN-0.33PT), обладающий аномально высокими электромеханическим коэффициентом связи и диэлектрической проницаемостью. При температуре выше 420 К соединение имеет кубическую структуру, в диапазоне от 380–420 К – тетрагональную, а ниже 380 К вплоть до комнатной температуры и ниже наблюдались домены моноклинной и тетрагональной фаз; предполагается, что такая сложная и не полностью изученная доменная и многофазная структура является причиной необычных диэлектрических свойств. Управление доменной структурой позволит управлять свойствами, такой подход получил название “domain-engineering”. К настоящему времени эволюция доменной структуры под действием поля изучена мало, одной из причин тому служат экспериментальные трудности монокристалльных дифракционных экспериментов в поле.

Нами была разработана электрическая ячейка, позволяющая проводить *in-situ* монокристалльные эксперименты в геометрии на прохождение. Тестовые эксперименты были проведены на линии VM01A лаборатории «Швейцарско-Новежские Линии Европейского источника синхротронного излучения ESRF». Применение ячейки позволило изучить воздействие электрического поля на доменную структуру PMN-0.33PT в высоком разрешении в большом объеме обратного пространства. Полученные данные указывают на значительно более сложную картину доменного и фазового распределения и позволяют выявить электрический отклик каждой фазы в отдельности.

На рисунке представлено распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве вблизи псевдокубического узла $(0\bar{3}\bar{1})$. Наблюдается 9 компонент, что не соответствует представлению о сосуществовании только моноклинной и тетрагональной фазы в веществе.



Исследование полиморфных фазовых переходов в сложном молекулярном кристалле флуконазола при высоком давлении

Е. А. Горковенко

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Кристаллическая структура сложного молекулярного кристалла флуконазола $C_{13}H_{12}F_2N_6O$ исследована методом энергодисперсионной рентгеновской дифракции при высоких давлениях до 2,5 ГПа, а также с помощью метода комбинационного рассеяния света в диапазоне давлений до 4,4 ГПа. При нормальном давлении флуконазол находится в полиморфной форме I, кристаллическая структура которой имеет триклинную симметрию с пространственной группой $P-1$. При давлении $P \sim 1,6$ ГПа наблюдается полиморфный фазовый переход в новую форму II, структура которой также описывается триклинной симметрией, но со значительными отличиями в параметрах элементарной ячейки по сравнению с исходной формой I. В ходе работы предложена структурная модель для описания формы – II, рассчитаны барические коэффициенты параметров и объема элементарной ячейки для полиморфных форм I и II флуконазола.

Упорядочение магнитных наночастиц на поверхности воды

А. А. Воробьев¹, М. Г. Дудник², В. А. Уклеев^{2, 3}

¹ *Uppsala University, Упсала, Швеция*

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

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

Проведены эксперименты по малоугловому рассеянию в скользящей геометрии и рефлектометрии синхротронного излучения (станция ID10, ESRF, Гренобль), в которых изучалась самоорганизация сферических наночастиц магнетита (Fe_3O_4), стабилизированных слоем олеиновой кислоты (ПАВ), на поверхности дисциплированной воды (субфазы). В качестве дополнительных методов использовались брюстеровская микроскопия и сканирующая электронная микроскопия.

Из полученных результатов видно, что в зависимости от диаметра наночастиц d осуществляется различное упорядочение. Так, при $d = 10$ нм четко проявляется гексагональная двумерная структура, в которой частицы уложены в один слой. При поверхностном давлении от 10 мН/м и выше слой является практически однородным на площадях порядка десятков см^2 . При этом расстояние между поверхностями частиц много меньше толщины слоя ПАВ.

При небольшом увеличении диаметра ($d = 15$ нм) в двумерной структуре появляются дефекты, и распределение частиц по вертикали становится неоднородным: по-прежнему в основном образуются монослои, но появляются двух- и трехслойные фракции. При дальнейшем увеличении диаметра ($d = 20$ нм) частицы агрегируют в сложно устроенные трехмерные агломераты, хаотически распределенные по поверхности субфазы.

Основными силами, управляющими процессом упорядочения, являются: магнитное диполь-дипольное взаимодействие (притягивает частицы), кулоновское отталкивание, возникающее из-за заряда на конце ПАВ, и поверхностное натяжение (в нашем случае притягивающее частицы).

Данная работа посвящена началу теоретического анализа данной системы. Целью которой является расчет основного состояния магнитной структуры плотноупакованного монослоя наночастиц методом градиентного спуска через минимизацию энергии магнитного диполь-дипольного взаимодействия. Результат будет сравнен с имеющимися экспериментальными данными по рефлектометрии поляризованных нейтронов [1]. Также будет осуществлен численный расчет основных сил, ответственных за упорядочение частиц.

1. *D. Mishra et al. Self-Assembled Iron Oxide Nanoparticle Multilayer: X-Ray and Polarized Neutron Reflectivity. Nanotechnology 23 (2012) 055707 (11pp).*

Изучение рентгеновского кругового дихроизма в метаборате меди CuB_2O_4

*К. А. Козловская*¹, *А. Рогалев*², *Ф. Вилхельм*², *Е. Н. Овчинникова*¹,
*А. П. Орешко*¹, *В. Е. Дмитриенко*³

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

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

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

Метаборат меди CuB_2O_4 имеет тетрагональную структуру без центра инверсии и привлекает внимание исследователей тем, что при температуре ниже температуры Нееля 20 К проявляет интересные физические свойства, например сильный оптический магнитоэлектрический эффект [1]. Остаются нерешенными вопросы о магнитном упорядочении в разных подрешетках меди (Cu(A) и Cu(B)) и роли взаимодействия Дзялошинского – Мория в формировании структуры магнитных фаз [2].

На станции ID12 синхротрона ESRF (Гренобль, Франция) при комнатной температуре были измерены спектры кругового рентгеновского дихроизма XNCD и XMCD в метаборате меди CuB_2O_4 при энергии падающего излучения вблизи К-края меди (~ 8 979 эВ). Измерялись коэффициенты поглощения право- и левополяризованного рентгеновского излучения с волновым вектором, направленным вдоль оси *a* кристалла в магнитном поле 17 Тл с двумя противоположными ориентациями. Спектр XNCD был получен как усредненная по ориентации магнитного поля **H** разность коэффициентов поглощения, измеренных для двух разных круговых поляризаций; спектр XMCD получен как разность сигналов кругового дихроизма для противоположных ориентаций **H**. Существование сигнала XMCD подтверждает парамагнитные свойства метабората меди при комнатной температуре, а его локализация в предкраевой области говорит о квадрупольном характере резонансного перехода. Сигнал XNCD наблюдался и в предкраевой области, и выше края поглощения, что говорит о наличии гибридных *3d-4p* электронных состояний [3]. Математическая обработка спектра XNCD позволила определить плотность смешанных электронных состояний и разделить вклады в сигнал XNCD от двух неэквивалентных позиций меди.

Расчеты выполнены с использованием суперкомпьютерного комплекса СКИФ МГУ. Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-00760.

1. *M. Saito, K. Taniguchi, T. Arima.* Jour. of the Phys. Society of Japan. 77 (2008) 013705.

2. *B. Roessli et al.* Phys. Rev. Letters. 86 (2001) 1885.

3. *J. Goulon et al.* J. of Exp. and Theor. Phys. 97 (2003) 402.

Особенности структуры сложного оксида $\text{Eu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ по данным аномальной дифракции

Н. А. Кольшикин^{1,2}, А. А. Велигжанин², Э. С. Кулик², Я. В. Зубавичус²

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

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

В зависимости от условий синтеза $\text{Eu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ сложные оксиды могут иметь структуру флюоритного типа или находиться в сверхструктурном упорядоченном пироклорном состоянии в результате упорядочения кислородных вакансий и позиций катионов. Возможность фазового перехода флюорит – пироклор определяет множество физических свойств данного материала. Однако наблюдение этого фазового перехода в классической дифракции затруднено из-за относительной близости атомных факторов рассеяния редкоземельных катионов (европия) и гафния ($Z_{\text{Eu}} = 63$, $Z_{\text{Hf}} = 72$). Увеличить контраст катионов можно за счет аномальных эффектов вблизи краев поглощения атомов. При этом интенсивность рефлексов зависит от энергии нетривиальным образом.

Выделено несколько параметров структуры, влияющих на энергетическую зависимость рефлексов и позволяющих непрерывно описать переход от флюорита к пироклору. Упорядочение катионных позиций и заселение кислородных вакансий в структуре сложного оксида может происходить параллельно, при этом анализ показывает, что их влияние на интенсивность дифракционных пиков сопоставимо. Также на интенсивности рефлексов влияет положение кислорода в позиции $48f$. Проведены расчеты спектров интенсивности $I_{\text{calc}}(E)$ с вариацией вышеперечисленных параметров. Полученные расчеты сравнивались с экспериментально измеренными $I_{\text{exp}}(E)$ по критерию Пирсона и по критерию Хи-квадрат. Оцененные при этом параметры структуры указывают на то, что в исследуемом веществе наблюдается смешение флюоритной и пироклорной фаз.

В работе использовалось оборудование уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения», частично финансируемой Российским министерством образования и науки в рамках соглашения 14.619.21.0002. Работа выполнена с финансовой поддержкой Российского научного фонда (грант №14-22-00098).

Измерение параметров атомной и блочной структуры вещества на основе поляризационного тормозного излучения релятивистских электронов

*В. И. Алексеев^{1,2}, А. Н. Елисеев^{1,2}, Э. Ф. Иррибарра¹, И. А. Кищин¹,
А. С. Кубанкин^{1,2}, Р. М. Нажмудинов^{1,2}, В. И. Сергиенко^{1,2}*

¹ *Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

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

Представлены результаты экспериментальных исследований поляризационного тормозного излучения (ПТИ) релятивистских электронов, возникающего вследствие когерентного рассеяния кулоновского поля релятивистских электронов на атомах среды, в которой движутся электроны.

В работе рассматриваются особенности ПТИ, образующегося при взаимодействии электронов с энергией 7 МэВ с различными поликристаллическими фольгами. Показана возможность измерения параметров атомной и блочной структуры поликристаллов, в том числе нанодисперсных, на основе измерения спектра ПТИ в рентгеновской области. Исследованы особенности механизма генерации ПТИ в поликристаллах с различной степенью упорядоченности блоков.

Рассмотрены преимущества и недостатки механизма ПТИ для определения параметров структуры вещества в сравнении со стандартными методами рентгеноструктурного анализа и электронной микроскопии.

Изучение рентгеновского естественного кругового дихроизма в лангасите

*Е. Н. Овчинникова¹, А. Рогалев², Ф. Вилхельм²,
А. П. Орешко¹, В. Е. Дмитриенко³, Б. В. Милль¹*

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

² *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

³ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, Москва, Россия*

Кристаллы семейства лангаситов, прототипом которого является $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (LGS), находят широкое применение благодаря своим пьезоэлектрическим свойствам. При замещении катионов магнитными ионами эти кристаллы проявляют нетривиальные магнитные, электрические и оптические свойства [1].

Пространственная группа лангасита $R\bar{3}_21$ допускает существование рентгеновского естественного кругового дихроизма (XNCD), обусловленного существованием интерференционного диполь-квадрупольного $E1E2$ вклада в сечение поглощения. XNCD является наиболее подходящим методом для изучения гибридизации электронных состояний разной четности, которые ответственны за оптическую активность. На станции ID12 синхротрона ESRF были измерены спектры XNCD в лангасите $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ при энергиях падающего излучения вблизи К-края Ga и $L_{2,3}$ -краях La. XNCD спектры были получены как разность коэффициентов поглощения для правой и левой круговых поляризаций падающего излучения. Степень круговой поляризации превышала 90 %. Были измерены спектры XNCD для направлений волнового вектора параллельного и перпендикулярного оси третьего порядка. Для всех краев поглощения соотношения сигналов вдоль и перпендикулярно оси c отвечало угловой зависимости для одноосного кристалла $\sim (3\cos^2\varphi - 1)$.

Наибольший интерес представляло разделение вкладов в сигнал XNCD от атомов галлия, занимающих три кристаллографически неэквивалентных положения. Проведенные с помощью программы FDMNES расчеты позволили установить, что наибольший вклад в сигнал XNCD в расчете на один атом дают атомы галлия в позиции $1(a)$, обладающей наиболее высокой симметрией, т. е. для этой позиции $p-d$ гибридизация является наиболее сильной. Дается объяснение полученных результатов на основе теории многократного рассеяния.

Расчеты выполнены с использованием суперкомпьютерного комплекса СКИФ МГУ. Работа поддержана грантом РФФИ 13-02-00760.

1. A. Zorko *et al.* Phys. Rev. Lett. **2011**, 107 257203 (1–5).

2. J. Goulon *et al.* J. Exp. Theor. Phys., **2003**, 97, 402–431.

Кристаллографические аспекты упорядочения структуры пористых пленок анодного оксида алюминия

*И. В. Росляков¹, Д. С. Кошковаев², А. А. Елисеев¹,
А. В. Петухов³, К. С. Напольский¹*

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

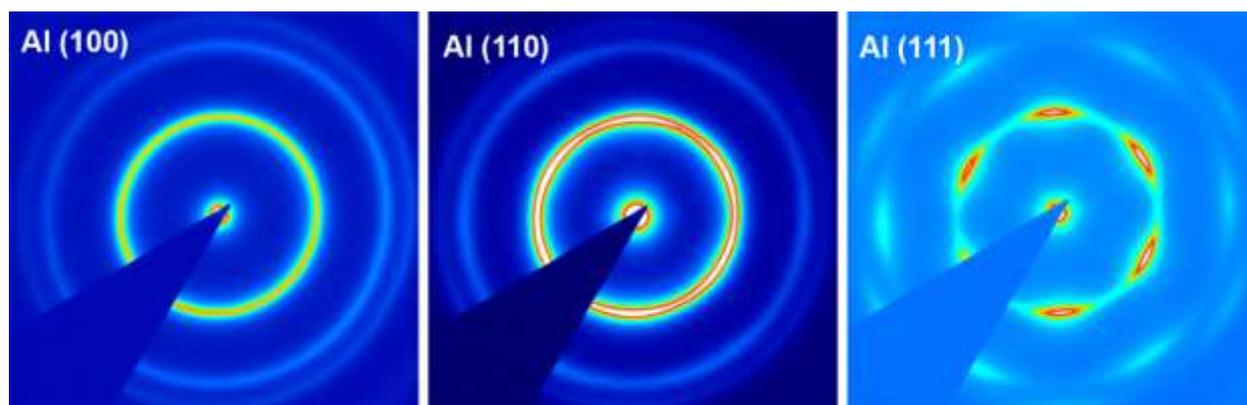
² *Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Зеленоград, Россия*

³ *Utrecht University, Utrecht, The Netherlands*

Пленки анодного оксида алюминия (АОА), получаемые электрохимическим окислением металла в разбавленных растворах кислот, являются ярким примером самоорганизующихся структур. Идеальную структуру данного материала можно представить как набор цилиндрических каналов, расположенных перпендикулярно подложке и образующих гексагональную сетку в плоскости пленки. Степень упорядоченности структуры зависит от множества факторов, в частности от кристаллографической ориентации используемой алюминиевой подложки [1, 2]. Однако имеющиеся экспериментальные данные во многом противоречивы.

Целью работы является исследование степени порядка в структуре пленок АОА, полученных анодированием монокристаллов Al, с использованием малоугловой дифракции синхротронного излучения.

Установлено, что минимальная мозаичность пористой структуры наблюдается для пленок АОА, выращенных на подложках Al (111), при этом ряды пор в плоскости пленки ориентируются вдоль направлений семейства {110}. При использовании подложек Al (110) мозаичность увеличивается, а в случае Al (100) выделенное направление ориентации рядов пор отсутствует.



Для выяснения влияния кристаллографической ориентации подложки на направление роста пор были исследованы пленки АОА на монокристаллах со скошенными на малые углы от плоскости (100) гранями. Показано, что направление роста каналов определяется двумя конкурирующими факторами: электромиграцией заряженных частиц в процессе анодирования перпендикулярно поверхности подложки и наличием в структуре устойчивых к окислению кристаллографических плоскостей и, пересечение которых

энергетически не выгодно. Это приводит к наличию двух направлений роста пор в структуре пленок АОА, разориентированных друг относительно друга на угол $\sim 0,3^\circ$.

Таким образом, различие скоростей окисления металла в разных кристаллографических направлениях является ключевым фактором, влияющим на структуру пористых оксидных пленок.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 15-08-09012).

1. *Napolskii K.S. et al.* Origin of Long-Range Orientational Pore Ordering in Anodic Films on Aluminium // *Journal of Materials Chemistry*, 2012, vol. 22, pp. 11922–11926.
2. *Ng C.K.Y. and A.H.W. Ngan.* Precise Control of Nanohoneycomb Ordering over Anodic Aluminum Oxide of Square Centimeter Areas // *Chemistry of Materials*, 2011, vol. 23, pp. 5264–5268.

Термическая стабильность, структура и фазовый состав тонких пленок Ni-NbO

К. И. Семенов, О. В. Стогней, М. А. Каширин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

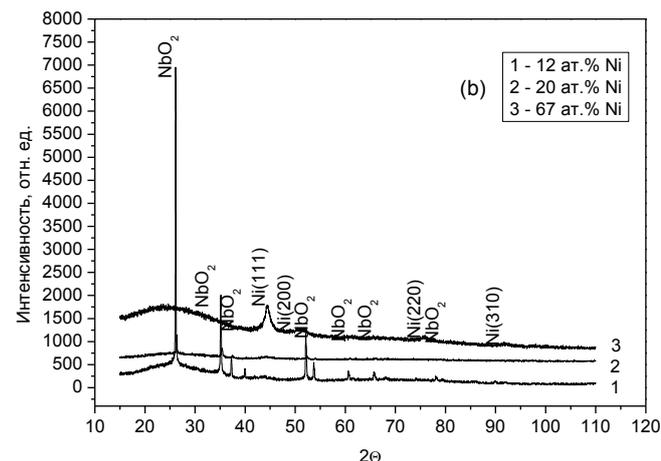
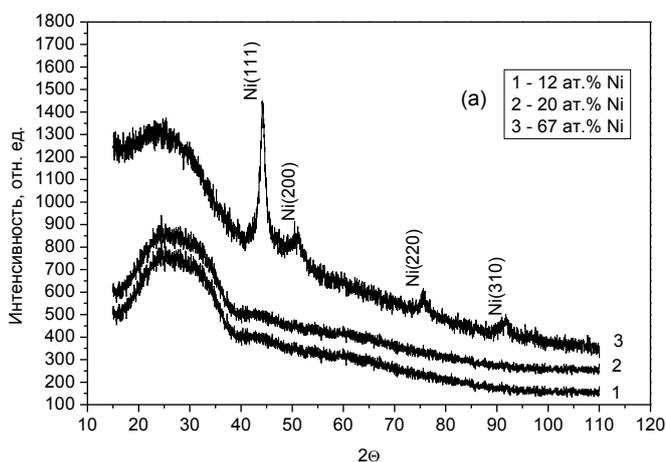
Исследована структура тонких пленок Ni-Nb₂O₅ в широком интервале составов, полученных методом ионно-лучевого распыления составной мишени в среде инертного газа Ar.

Установлено, что в исходном состоянии (рис. а) композиты характеризуются наличием аморфной фазы, на что указывает наличие широкого максимума в интервале углов 2θ от 20 до 40°. Ранее [1, 2] было показано, что при напылении чистого оксида ниобия происходило образование аморфной структуры. Также на дифрактограммах присутствуют пики при углах

2θ 45, 52, 76, 92°, принадлежащие фазе кубического никеля с ГЦК-решеткой ($a = 3,524 \text{ \AA}$).

С увеличением концентрации никеля Ni наблюдается рост интенсивности пиков от никеля. Таким образом, на основании представленных и полученных ранее результатов [1, 2] можно сделать вывод, что в исходном состоянии композит включает в себя фазу чистого никеля, имеющего кристаллическую структуру и распределенного в матрице из аморфного оксида ниобия.

Следующим шагом в определении структуры композита Ni-Nb₂O₅ являлось исследование отожженных при 550 °С пленок. На представленных дифрактограммах (рис. б) видно, что воздействие отжига привело к появлению новых пиков на дифрактограммах от отожженных пленок, с содержанием



Дифрактограммы, полученные от пленок Ni_x(Nb₂O₅)_{100-x}: а – напыленные, б – отожженные при 550 °С

Ni никеля 12 и 20 ат. %. При подборе структуры было выявлено, что новые пики хорошо согласуются с фазой NbO₂, характеризующейся тетрагональной кристаллической решеткой ($a = b = 4,8 \text{ \AA}$, $c = 2,9 \text{ \AA}$). На дифрактограммах присутствует закономерное снижение интенсивности пиков от закристаллизованного оксида ниобия с увеличением концентрации никеля. Также в композите по-прежнему присутствует фаза чистого никеля, о чем свидетельствует наличие пиков на дифрактограммах при углах 2Θ 45, 52, 76, 92°, которые соответствуют пикам на дифрактограммах от напыленных пленок. Для пленок проведен расчет размера зерен никеля по формуле Шеррера с учетом аппаратного уширения пика:

$$L = \frac{\lambda \cdot k}{\cos \Theta \cdot \beta},$$

где λ – длина волны; k – коэффициент, зависящий от формы пика; β – ширина пика на полувысоте.

1. Семененко К.И. Структура и порог перколяции тонких пленок Ni-Nb₂O₅ / К.И. Семененко, М.А. Каширин, О.В. Стогней // «Физика твердого тела»: Тез. докл. 54-й Отчетной научно-технической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников, аспирантов и студентов. Воронеж, 2014, с. 18.
2. Семененко К.И. Технология тонких пленок Nb₂O₅ / К.И. Семененко, М.А. Каширин, О.В. Стогней // «Физика твердого тела»: Тез. докл. 53-й Отчетной научно-технической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников, аспирантов и студентов. Воронеж, 2013, с. 28.

Изучение с использованием синхротронного излучения особенностей структурно-фазовых превращений в сплаве никелида титана в ходе деформации кручением под высоким давлением

*Р. В. Сундеев^{1, 2}, А. В. Шалимова¹, А. А. Велигжанин³,
Я. В. Зубавичус³, А. М. Глезер^{1, 2, 4}, А.А. Чернышов³*

¹ *Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И. П. Бардина, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет приборостроения и информатики, Москва, Россия*

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

⁴ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

Предметом настоящей работы является подробное изучение структурного состояния фаз, возникающих в ходе мегапластической деформации в камере Бриджмена аморфного сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$, с использованием комплекса эффективных методов исследования атомной структуры: просвечивающая электронная микроскопия, классический рентгеноструктурный анализ, рентгеновская дифракция в синхротронном излучении с высоким пространственным разрешением. Это позволило выявить зависимости

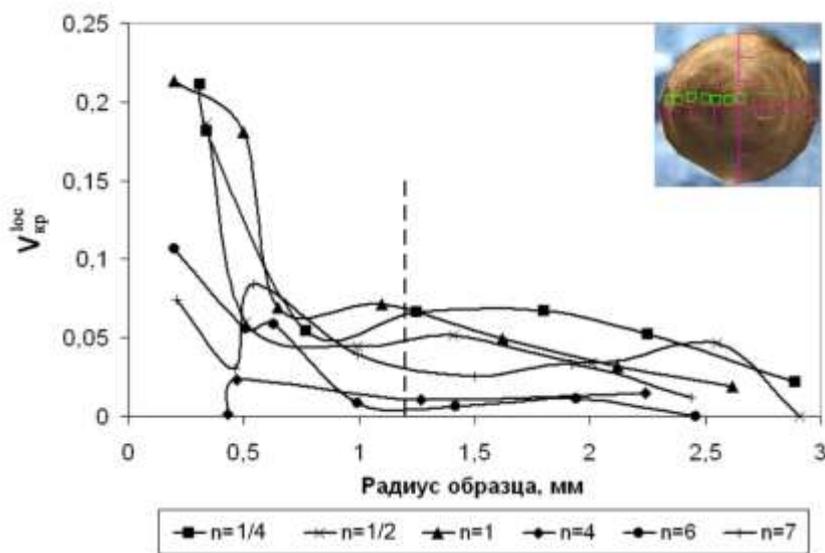


Рис. 1 – Изменение V_{locr} после $n = 1/4 - 7$; для исходного состояния $V_{locr}=0$; пунктиром обозначена граница областей структурных изменений; начало отсчета по оси абсцисс соответствует центру образца; на врезке – изображение образца с указанием точек съемки дифрактограмм с пространственным разрешением; площадь области съемки в каждой точке – $350 \times 350 \text{ мкм}^2$.

изменения средней доли кристаллической фазы, а также локальной доли кристаллической фазы (V_{locr}) вдоль радиуса образца с шагом 500 мкм при различных величинах деформации (рис.).

Из рис. видно, что различные изменения V_{locr} для всех кривых фиксируются приблизительно до середины радиуса образца. По-видимому, можно выделить две

области структурных изменений вдоль радиуса образца при всех исследованных величинах деформации: 1 – от центра образца примерно до середины радиуса (1,2 мм); 2 – от середины радиуса до края образца.

В первой области можно отметить заметные различия V_{locr} вблизи центра для различно деформированных образцов: наибольшая V_{locr} наблюдается для образцов при $n = 1/4$ и 1. Во второй области – от середины радиуса до края образца V_{locr} плавно уменьшается к краю, причем

структурные изменения подобны для всех рассмотренных величин деформации. Из полученных локальных дифрактограмм, снятых в каждой точке вдоль радиуса образца, извлекались функции радиального распределения. Затем для каждой точки вдоль радиуса образца рассчитывались значения межатомных расстояний и координационных чисел. Анализ полученных результатов позволяет предполагать, что аморфное состояние сплава $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$, полученное при воздействии на кристаллическую фазу больших деформаций в камере Бриджмена при комнатной температуре, идентично аморфному состоянию, полученному в том же сплаве при закалке из расплава.

Авторы выражают благодарность РФФИ за финансовую поддержку (гранты 12-02-00860а и 14-02-00271а).

**Определение структуры локального окружения атомов
в нанокристаллических покрытиях на основе нитрида титана
с примесями методами XAFS-спектроскопии
с синхротронным излучением**

*Н. А. Тимченко¹, М. С. Сыртанов¹, О. В. Крысина²,
Я. В. Зубавичус³, Е. В. Храмов³*

¹ *Томский национальный исследовательский политехнический университет, Томск, Россия*

² *Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия*

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

Одним из приоритетных направлений современной науки о наноматериалах является разработка технологий создания на поверхности многофазных нанокристаллических и аморфных слоев и покрытий с характерным размером зерна менее 100 нм, придающих материалам новые свойства и функциональные возможности.

При разработке технологий и оборудования, основывающихся на указанных методах, необходимо знание механизмов и характеристик физических и химических процессов, установление особенностей элементного состава и структурных фаз, характеризующих состояние поверхностных нанокристаллических и аморфных слоев и покрытий в процессе их формирования. Для решения таких задач применение обычных рентгенографических методов проблематично из-за специфики рассеяния лучей на наноразмерных объектах. Локальная кристаллическая структура наноматериалов может отличаться от усредненной. Хотя именно она во многих случаях определяет такие их важные физико-химические свойства, как прочность, твердость, термостабильность и др. Поэтому в исследованиях структуры таких объектов наряду с применением высокоразрешающих дифракционных методов необходимо привлечение методов, основанных на исследовании XAFS-спектроскопии и методов малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS).

В докладе представлены результаты по измерениям XANES- и EXAFS-спектров в области K -края поглощения титана в образцах нанокристаллических покрытий из нитрида титана с примесями меди и кремния на станции структурного материаловедения КИСИ. Образцы покрытий были получены в ИСЭ СО РАН испарением композиционных катодов вакуумно-дуговым методом с плазменным ассистированием. Из данных измерений вычислены параметры структуры локального окружения атомов титана для исследованных образцов. По кристаллографическим данным расстояние Ti-N в объемной фазе

нитрида титана равно 2,12 Å, а Ti-Ti – 3,0 Å. Параметры, полученные для исследованных образцов, близки к этим значениям. Наличие в покрытии в качестве примеси меди в количестве не более 12 % приводит к незначительному увеличению расстояния Ti-N по сравнению с полученными данными для нитрида титана, а допирование кремнием – наоборот, к уменьшению длины связи.

Yu.F. Ivanov, N.N. Koval, O.V. Krysina, T. Baumbach, S. Doyle, T. Slobodsky, N.A. Timchenko, R.M. Galimov, A.N. Shmakov. Superhard Nanocrystalline Ti-Cu-N Coatings Deposited by Vacuum Arc Evaporation of a Sintered Cathode // Surface and Coatings Technology. V. 207. 25 August 2012. P. 430-434.

Особенности микроструктуры и диэлектрических свойств керамики (Ba_{0,5}Sr_{0,5})Nb₂O₆

*А. Г. Абубакаров¹, А. В. Павленко^{1, 2}, Л. А. Резниченко¹, И. М. Алиев¹,
Л. А. Шилкина¹, А. В. Назаренко², И. А. Вербенко¹, Г. М. Константинов¹*

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

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

Твердые растворы ниобатов бария – стронция Ba_{1-x}Sr_xNb₂O₆ являются представителями класса кислородно-октаэдрических сегнетоэлектриков со структурой тетрагональной вольфрамовой бронзы. Обладая уникальными электрооптическими, пиро- и диэлектрическими характеристиками, они (преимущественно в виде монокристаллов и низкоразмерных структур) рассматриваются в качестве функциональных сред оптоэлектронных устройств (модуляторы лазерного излучения), микроэлектроники, голографии и пр.

В настоящей работе изучены зеренное строение и диэлектрические характеристики керамики твердого раствора (Ba_{0,50}Sr_{0,50})Nb₂O₆. Установлено, что ей свойственна однородная, плотная, практически беспористая микроструктура из кристаллитов размером 5–10 мкм. Показано, что при комнатной температуре в (Ba_{0,50}Sr_{0,50})Nb₂O₆ петли диэлектрического гистерезиса имеют вытянутую форму, при $E \sim 3,2 \cdot 10^6$ В/м $P_R \sim 0,024$ Q/м² и $E_C \sim 7,2 \cdot 10^5$ В/м. При нагревании образца петли становятся уже, меньше по амплитуде и исчезают при $T_d \sim 390$ К. В области $T = 340–385$ К при охлаждении происходит размытый фазовый переход из параэлектрического состояния в состояние релаксорного сегнетоэлектрика. Продемонстрировано, что масштабирование практически не приводит к изменению керамических характеристик материала.

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке новых функциональных материалов. Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая и проектная части гос. задания темы № 213.01-11/2014-21, 213.01-2014/012-ВГ, и 3.1246.2014/К) и ФЦП (ГК № 14.575.21.0007).

ЯМР релаксация воды в образцах бетона

В. Я. Адельсон, Ю. С. Чернышев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Территория России охватывает 4 климатических пояса, включающих в себя арктическую климатическую область, где температура воздуха может опускаться до -60°C . Циклические изменения температуры могут оказывать существенное влияние на состояние сооружений из бетона. С физической точки зрения бетон – пористая структура, содержащая в порах некоторое количество воды. При периодическом замораживании и размораживании влаги структура порового пространства может изменяться, что отражается на прочностных характеристиках бетона и в конечном итоге может определить «время жизни» строения. Хорошо известно, что метод импульсного ЯМР на основе релаксационных и диффузионных характеристик позволяет исследовать не только состояние влаги в пористой среде, но и такие важные для практики свойства, как пористость, проницаемость, распределение пор по размерам [1, 2]. Также огромным преимуществом метода является принципиальная возможность получения изображений среды, т. е. ее ЯМР-томограммы.

Для проведения исследований в нашем распоряжении была установка импульсного ЯМР с постоянным магнитом на основе сплава неодим – железо – бор (NdFeB). Данный вид магнита (разработка СПб) имеет достаточно хорошую однородность поля при большом размере зазора (15 см), что позволяет не только измерять времена релаксации, но и получать томограммы в относительно больших объектах (до 10 см). На первом этапе было исследовано распределение поля в зазоре магнита с помощью точечного датчика поля установки

ЯМР ИМИ-1.

Далее было измерено время спин-решеточной релаксации в 4 образцах бетона, насыщенных дистиллированной водой с помощью импульсной последовательности $90 - \tau - 90$. В качестве управляющей системы использовались оборудование и программы NMR Analyzer “Spin Track”, разработанные ООО «Резонансные Системы», Йошкар-Ола, Россия.

На основании экспериментально полученных данных были вычислены времена релаксации и соответствующие относительные доли компонент, характеризующие структуру порового пространства. В дальнейшем предполагается исследовать зависимость этих параметров от многократного циклирования по температуре, имитирующего многолетнюю смену времен года.

1. В. В. Манк, Н. И. Лебовка. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса воды в гетерогенных системах. АН УССР, Киев: Наук. Думка, 1988.
2. P.T. Callaghan. Translation Dynamics and Magnetic Resonance. Oxford, 2011.

Получение монокристаллов низкотемпературной модификации AgCuSe , $\text{Ag}_{1,5}\text{Cu}_{0,5}\text{Se}$ и $\text{AgCuSe}_{0,5}(\text{S}, \text{Te})_{0,5}$ методом полиморфного превращения

Ю. И. Алыев, Ю. Г. Асадов, К. М. Джафаров^{1, 2}

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

² *Бакинский институт повышения квалификации и переподготовки педагогических кадров, Баку, Азербайджан*

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

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

AgCuSe при комнатной температуре кристаллизуется в орторомбической структуре и при 504 К превращается в ГЦК-модификацию с параметром решетки $a = 6,069 \text{ \AA}$, $Z = 4$, пр. гр. $Fm\bar{3}m$, $\rho_x = 7,44 \text{ г/см}^3$. Превращение обратимое и происходит по типу «монокристалл – монокристалл». $\text{Ag}_{1,5}\text{Cu}_{0,5}\text{Se}$ при комнатной температуре двухфазный. Одна из фаз принимает орторомбическую структуру Ag_2Se с параметрами решетки $a = 4,333 \text{ \AA}$, $b = 7,06 \text{ \AA}$, $c = 7,764 \text{ \AA}$, $\rho_x = 8,24 \text{ г/см}^3$, а вторая фаза кристаллизуется в орторомбической структуре AgCuS . При температуре 488 К обе фазы одновременно превращаются в ГЦК модификацию с параметром решетки $a = 6,107 \text{ \AA}$, $Z = 4$, пр. гр. $Fm\bar{3}m$, $\rho_x = 7,250 \text{ г/см}^3$. Превращение обратимое и происходит по типу «монокристалл – монокристалл».

$\text{AgCuSe}_{0,5}\text{Te}_{0,5}$ при комнатной температуре состоит из трех фаз: I фаза по размерам решетки идентична низкотемпературному орторомбическому Cu_2Te , II фаза кристаллизуется в орторомбической структуре AgCuSe , III фаза – кубическая, с алмазаподобной структурой.

1. Асадов Ю.Г., Джабраилова Г.А., Насиров В.И. Неорганические материалы, 1972, т. 8, № 6, с. 1144.
2. Асадов Ю.Г., Джафаров К.М., Асадов С.Ю. Неорганические материалы, 2000, т. 36, № 5, с. 542.
3. Чеботин В.Н., Конев В.Н., Березин В.М. Неорганические материалы, 1984, т. 20, № 9, с. 1462.

Влияние редкоземельной добавки Nd на микроструктуру, тепловые свойства и магнитоемкость мультиферроика BiFeO_3

*А. А. Амиров¹, И. А. Вербенко², И. К. Камилов¹, Л. А. Резниченко²,
В. А. Алешин², С. П. Кубрин², Д. А. Сарычев²*

¹ *Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия*

² *Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия*

Интерес к соединениям на основе мультиферроика феррита висмута в последнее время не уменьшается и достаточно активно исследуется благодаря не только ясной практической перспективе [1], но и обнаружению в них ряда интересных явлений, связанных с магнитоэлектрическим взаимодействием в области фазовых переходов [2, 3].

В нашей работе феррит висмута получен методом твердофазных реакций из окислов Bi_2O_3 , Fe_2O_3 обжигом в две стадии с промежуточным помолом при температурах $T_1 = (740\div 760)^\circ\text{C}$ и $T_2 = (780\div 800)^\circ\text{C}$ и времени $t_1 = t_2 = 10$ ч. Твердые растворы $\text{Bi}_{1-x}\text{Re}_x\text{FeO}_3$ ($\text{Re} = \text{La}, \text{Nd}$ с $x = 0,05\text{--}0,2$) также получены твердофазным методом при температурах обжига и выдержек $T_1 = 800^\circ\text{C}$, 10 ч, и $T_2 = (800\div 850)^\circ\text{C}$, 5 ч. С повышением содержания редкоземельного элемента температура второго обжига повышается на 10° на каждые 5 мол. % добавки.

Структурные исследования показали, что BiFeO_3 характеризуется многокомпонентной микроструктурой типа «поры – основная связная матрица – неосновные фазы» с большим влиянием примесной несегнетоэлектрической фазы, которая резко уменьшается с увеличением доли содержания добавки Nd. В области $0,1 \leq x \leq 0,2$ система однородна, примесная фаза практически отсутствует. Магнитодиэлектрические измерения обнаружили усиление взаимодействия магнитной и дипольной подсистем с ростом содержания редкоземельной добавки в BiFeO_3 , что может быть следствием роста обменного взаимодействия магнитных диполей атомов Fe. В области $0,05 \leq x \leq 0,1$ наблюдается более замедленный рост магнитоемкости, что может быть связано со сменой преобладающего механизма в образовании ТР, а в интервале $0,1 \leq x \leq 0,2$ – с возникновением инварного эффекта за счет появления новой моноклинной фазы. Температурные зависимости теплоемкости серии образцов показали влияние доли содержания добавки на температуру антиферромагнитного перехода в области 650°K . При концентрации $x = 0,15$ наблюдается наибольшее значение максимума теплоемкости, что может быть связано с наличием морфотропной фазовой границы в области $0,15 \leq x \leq 0,2$.

1. *А.П. Пятаков, А.К. Звездин. УФН* **182**, 593 (2012).
2. *А.А. Амиров, А.Б. Батдалов, С.Н. Каллаев и др. ФТТ* **51**, 1123 (2009).
3. *И.А. Вербенко, Ю.М. Гуфан, С.П. Кубрин, А.А. Амиров и др. Известия РАН. Серия физическая* **74**, 1192 (2010).

Воздействие коронного разряда на нанесенную на поверхность текстолита пленку термостойкого кремнийорганического лака с добавкой порошка Al_2O_3

В. В. Андреев

Чувашский государственный университет им. И. Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

В работе воздействию коронного разряда в ячейке диэлектрического барьерного разряда подвергалась пластина из текстолита размерами 10×15 см и толщиной 0,5 мм. На поверхность этой пластины была нанесена пленка из термостойкого лака КО-85 с добавкой порошка Al_2O_3 . Объемная доля порошка Al_2O_3 при этом составляла 50 %. По составу лак КО-85 представляет собой смесь раствора модифицированных кремнийорганических смол и глифталевого лака в ароматических и алифатических растворителях. На плоские металлические электроды разрядной ячейки подавалось напряжение с действующим значением 7 кВ и с частотой 50 Гц. Воздействие коронного разряда продолжалось до тех пор, пока не происходил пробой текстолита с нанесенной на его поверхность пленкой.

В работе исследована микроструктура и морфология нанесенной на поверхность текстолита пленки в области электрического пробоя. Микроструктура образцов была исследована методом сканирующей электронной микроскопии с полевой эмиссией (FE-SEM) на электронном микроскопе Hitachi SU8000. Съемку изображений вели в режиме регистрации вторичных электронов при ускоряющем напряжении 30 кВ и рабочем расстоянии 8–15 мм. Оптимизация аналитических измерений проведена в рамках описанного ранее подхода [1]. Перед съемкой образцы помещали на поверхность алюминиевого столика диаметром 25 мм, фиксировали при помощи проводящего клея и напыляли на них проводящий слой углерода толщиной 13 нм при помощи метода магнетронного распыления, описанного ранее [2]. Морфология образцов исследовалась с учетом поправки на поверхностные эффекты напыления проводящего слоя [2].

Было осуществлено EDX-SEM исследование образцов и их картографирование с помощью энергодисперсионного спектрометра Oxford Instruments X-max. Перед измерением образцы были покрыты тонкой пленкой углерода (13 нм) с помощью углеродного напылителя Cressington 208.

Автор благодарит отдел структурных исследований ИОХ РАН за исследование образцов методом электронной микроскопии.

1. В.В. Качала, Л.Л. Хемчян, А.С. Кашин и др. Успехи химии. 82, 648–685 (2013).
2. А.С. Кашин, В.П. Анаников. Изв. АН. Сер. хим. № 12, 2551–2556 (2011).

Исследования изменения морфологии поверхности TlFeS_2 до и после облучения ионами Xe^{+26}

*Э. Б. Аскеров^{1,2}, А. И. Мададзада^{1,2}, М. Kulik^{1,5}, А. Сафарзаде⁶,
Р. Н. Мехдиева⁴, Д. И. Исмаилов³, А. И. Бескровный¹, Э. М. Керимова³,
А. Olejniczak^{1,7}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Национальный центр ядерных исследований Азербайджана, Баку, Азербайджан

³ Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

⁴ Институт радиационных проблем НАНА, Баку, Азербайджан

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

⁶ Национальная академия авиации, Баку, Азербайджан

⁷ University M. Kopernika, Torun, Poland

Представленная работа посвящена исследованию радиационного дефектообразования и изменениям структурных характеристик исходного материала и приборных структур на его основе. Характерной особенностью облучения полупроводников ионами является неоднородное распределение радиационных дефектов по длине пробега частиц. С целью исследования процесса дефектообразования и структурных изменений в соединении TlFeS_2 данный образец был облучен ионами Xe^{+26} энергией 167 МэВ при флюэнсах $0,5 \cdot 10^{13}$; $1,0 \cdot 10^{13}$; $2,0 \cdot 10^{13}$ ион/см⁻² при комнатной температуре под высоким вакуумом ($< 7 \cdot 10^{-6}$ Торр). Образцы были облучены на циклотроне IC-100 (ЛЯР ОИЯИ, Дубна). Во избежание нагрева на образцах ток в пучке был на низком (~ 15 нА) уровне.

Исследования изменения морфологии поверхности до и после облучения производились на атомно-силовом микроскопе ACM SOLVER NEXT. Нами исследовались 4 типа кристаллов TlFeS_2 : необлученная поверхность и после облучения дозами $0,5 \cdot 10^{13}$; $1 \cdot 10^{13}$ и $2 \cdot 10^{13}$ см⁻². До установления образцов на сканируемый столик АСМ производился скол для получения межслоевой атомарно-чистой поверхности. Показаны результаты сканирования поверхностей, подвергнутых различным уровням облучения, и наблюдается упорядоченность сколотой поверхности, изменяющаяся в зависимости от силы облучения. Получены гистограммы количественных зависимостей высотных характеристик поверхности. Полученные гистограммы указывают на то, что с увеличением дозы облучения происходит уменьшение разности в максимумах высот нанообразований с последующим объединением их в единый максимум с кластерами размером около 55 нм.

Построена зависимости числа кластеров 55 нм и обратная экспоненциальная зависимость периодичности числа максимумов от дозы облучения. Установлено, что зависимость периодичности числа максимумов на одной и той же длине отрезка от дозы облучения подчиняется экспоненциальной закономерности и описывается функцией $f(x) = f_0 + a_0 e^{r_0 x}$.

Рассчитаны значения коэффициентов интерполяционной кривой и относительные отклонения.

При облучении структур ионами Хе с энергией 167 МэВ распределение первичных радиационных дефектов неоднородно по толщине образцов. Профили ионизационных потерь $(dE/dx)_{ion}$ и числа первичных радиационных дефектов в единицах dpa (displacement per atom) вдоль пробега ионов Хе получены с помощью программы SRIM-2008. Согласно расчетам пробег ионов Хе с энергией 167 МэВ составляет 14,69 мкм.

**Апробация метода охрупчивания сплавов Al-Cu
в галлийсодержащем водном растворе
для изучения химического состава границ зерен**

А. А. Блатов

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

Целью данной работы являлось экспериментальное обнаружение зернограницных сегрегаций в системах Al-Cu. Для исследования границ зерен Al применялось жидкометаллическое охрупчивание сплавов, а также методы сканирующей электронной микроскопии [1, 2]. На примере сплавов системы Al-Cu показано, что при малых концентрациях меди удается получить хрупкий излом с помощью галлийсодержащих водных растворов, а при больших концентрациях – нет. Также выявлено наличие рельефа на поверхности излома после ионного травления.

1. *Квасов Ф.И., Фридляндер И.Н.* Промышленные алюминиевые сплавы. – М.: Металлургия, 1984.
2. *Белов Н.А.* Фазовый состав алюминиевых сплавов. М: Изд-во МИСиС, 2009.

Влияние состава реакционной среды на формирование наночастиц диоксида марганца в условиях микроволнового воздействия

О. В. Бойцова^{1, 2}, А. Е. Баранчиков¹

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет, Москва, Россия*

Диоксид марганца – один из наиболее интересных с практической точки зрения неорганических материалов, который благодаря наличию у него многочисленных полиморфных модификаций и еще более разнообразных морфологических форм может быть успешно использован в составе катализаторов, биосенсоров, адсорбентов и особенно в источниках тока. Наименьшее содержание примесей в MnO_2 характерно для пиролюзита ($\beta\text{-MnO}_2$) и рамсделита ($\gamma\text{-MnO}_2$). Для других модификаций MnO_2 (α , ϵ и δ) крайне характерно присутствие в каналах их кристаллической структуры ионов Na^+ и K^+ . Именно наличие каналов делает MnO_2 интересным с точки зрения создания катодных материалов.

На сегодняшний день известно большое количество методов и синтетических подходов к получению материалов на основе MnO_2 , но до сих пор не разработан простой одностадийный способ получения MnO_2 , не требующий существенных время- и энергозатрат. Кроме того, отсутствуют воспроизводимые методики получения различных кристаллических модификаций MnO_2 , а также микро- и наночастиц с различным габитусом, в частности методики получения наностержней MnO_2 , представляющих большой практический интерес. В настоящей работе для получения нанокристаллического диоксида марганца предложен эффективный способ, основанный на гидротермально-микроволновой (ГТМВ) обработке раствора перманганата калия и нитрита натрия в присутствии серной кислоты. В гидротермальных условиях при участии микроволнового излучения получены наночастицы MnO_2 в виде бирнессита и пиролюзита. Проанализировано влияние условий синтеза на фазовый состав и микроморфологию продуктов синтеза. Показано, что изменение pH реакционной смеси приводит к изменению фазового состава и морфологии наночастиц продукта. Основное внимание в работе уделено анализу влияния состава реакционной среды на фазовый состав получаемых твердофазных продуктов, определяющий их электрокаталитическую активность.

Проект выполнен при поддержке РФФИ № 14-29-04100.

Диэлектрические и электрофизические характеристики керамики $\text{PbFe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_{3+x}\text{MnO}_2$

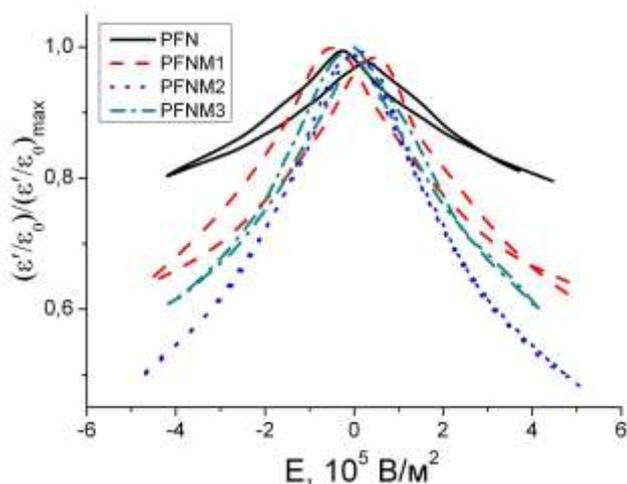
Н. А. Болдырев¹, А. В. Павленко²

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

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

Критическая зависимость фазового состава и электрофизических характеристик мультиферроика $\text{PbFe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_3$ (PFN) от технологических регламентов изготовления затрудняет его использование в качестве компонента новых функциональных материалов. Наши предварительные исследования [1] показали, что стабилизировать диэлектрические и пьезоэлектрические характеристики керамики PFN возможно путем сверхстехиометрического введения на стадии синтеза материала модификаторов, в том числе оксида марганца. Целью настоящей работы явилось установление закономерностей влияния указанного модификатора на процессы формирования диэлектрических и электрофизических характеристик керамики PFN в широком диапазоне концентраций (0–3 масс. %) вводимого модификатора.

Анализ зависимостей $\epsilon'/\epsilon_0(T, f)$ и $\epsilon''/\epsilon_0(T, f)$ ($T = 300\text{--}600$ К и $f = 10\text{--}105$ Гц), $\epsilon'/\epsilon_0(E)$ и $\epsilon''/\epsilon_0(E)$ ($T = 300$ К, $f = 103$ Гц) исследуемых объектов показал, что модифицирование во всех случаях привело к снижению температуры и усилению размытия сегнето-параэлектрического фазового перехода, при этом в керамиках, содержащих (2÷3) масс. % MnO_2 наблюдалось формирование



частотно-зависимых максимумов $\epsilon'/\epsilon_0(T)$, сдвигающихся в область высоких температур и уменьшающихся по величине при увеличении f . В керамиках с $x < 2$ масс. % MnO_2 зависимости $\epsilon'/\epsilon_0(E)$ и $\epsilon''/\epsilon_0(E)$ ($T = 300$ К, $f = 103$ Гц) имели форму «бабочки», а при $x \geq 2$ масс. % MnO_2 — «куполообразную» и практически безгистерезисную форму (рис.). Это говорит о том, что введение MnO_2 приводит не только к улучшению

технологичности керамики PFN (снижению электропроводности, увеличению плотности и др.), но и к проявлению свойств сегнетоэлектриков-релаксоров. Последнее обусловлено, скорее всего, частичным встраиванием катионов Mn в B-позиции структуры перовскита и, как следствие, усилением флуктуаций состава.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая и проектная части государственного задания, проект №1927, тема № 213.01-2014/012-ВГ и 3.1246.2014/К) и ФЦП (соглашение № 14.575.21.0007).

1. Павленко А.В., Болдырев Н.А., Резниченко Л.А., Вербенко И.А., Константинов Г.М., Шилкина Л.А. Микроструктура, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства керамики $PbFe_{0,5}Nb_{0,5}O_3$, модифицированной Li_2CO_3 и MnO_2 / Неорганические материалы. 2014. Т. 50. № 7. С. 806.

Влияние размола на структуру шунгита

К. И. Боржова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Целью данной работы было провести рентгенографический анализ образцов шунгита до и после размола, а также установить фазовый состав. Размол исходного образца проходил в планетарной мельнице Fritsch PULVERISETTE 7 premium line (материал ступки и шаров – малахит, диаметр шаров – 10 мм) в воздушной среде.

Рентгенографирование образцов проводилось на дифрактометре ДРОН-6 в $Mo-K_{\alpha}$ -излучении. Были получены кривые распределения интенсивности для исходного и помолотого образцов.

Было установлено, что образец содержит углеродную составляющую и SiO_2 , а также ряд других примесей.

Размол приводит к появлению диффузного максимума в области углов рассеяния $2\theta_{Mo}$ 5–10°. Максимум в данной области углов наблюдался на рентгенограмме нанопористого углерода, полученного из карбида титана [1], и в образце, предположительно содержащем графен [2].

1. Алешина Л.А., Фофанов А.Д., Кютт Р.Н. Рентгенографические исследования нанопористого углерода, синтезированного из карбидов кремния и титана. Тезисы докладов (РСНЭ 2007). Москва, 12–17 ноября 2007. М.: ИК РАН, 2007. С. 231.
2. Логинов Д.В., Алешина Л.А., Фофанов А.Д. Рентгенографические исследования углеродного порошка с содержанием графена. XLVI Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния, 12–17 марта 2012. СПб. С. 73.

Теплофизические свойства аморфизирующихся сплавов Cu-Zr

В. А. Быков, Т. В. Куликова, С. Х. Эстемирова, К. Ю. Шуняев

Институт металлургии УрО РАН, Россия, Екатеринбург

Получены температурные зависимости температуропроводности α и теплопроводности исходных сплавов Cu-Zr (Cu = 40, 46, 50, 56 ат. %) в интервале температур $T = 300\text{--}1\ 100$ К. Отметим, что значения температуропроводности и теплопроводности данных систем при высоких температурах измерены впервые. Кривые $\alpha(T)$ существенно нелинейны: с ростом температуры в интервалах 530–570 К, 755–820 К и 1 000–1 010 К происходит резкое изменение температуропроводности. Скачок при 1 000 К хорошо согласуется со всеми представленными в литературе фазовыми диаграммами и обусловлен эвтектоидной реакцией $\text{CuZr} \leftrightarrow \text{Cu}_{10}\text{Zr}_7 + \text{CuZr}_2$. В области температур, где происходят первые два эффекта, на диаграммах состояния отсутствуют какие-либо превращения. Превращения, соответствующие температурным интервалам 530–570 К и 755–820 К, имеют место только при быстром охлаждении, что характерно для мартенситного превращения, ранее уже наблюдаемого для данного состава. Рентгенофазовый анализ показал, что структура быстрозакаленного сплава $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ соответствует смеси двух моноклинных фаз, обладающих симметрией P_{21}/m и Cm . Таким образом, достаточно надежно установлено, что переход, обнаруженный при 420–430 К (охлаждение) или при 530–570 К (нагрев) соответствует образованию (распаду) мартенситных фаз. Переход при 755–820 К может быть обусловлен эвтектоидным распадом соединения CuZr, распад которого при быстром охлаждении был подавлен мартенситным переходом.

Обнаружено, что значения температуропроводности для сплавов Cu-Zr (Cu = 46, 50, 56 ат. %) в несколько раз меньше, чем для чистого циркония, и демонстрируют рост с уменьшением содержания меди в составе сплава. Для сплава $\text{Cu}_{40}\text{Zr}_{60}$ кривая температуропроводности характеризуется уже отрицательным коэффициентом и в несколько раз большими значениями в сравнении с полученными при 300 К для образцов Cu-Zr (Cu = 46, 50, 56 ат. %).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-13-00676).

Светоизлучающие нанокompозиты на основе ZnS:Cu, осажденного в матрицы пористого анодного Al₂O₃

Р. Г. Валеев^{1,2}, А. Н. Бельтюков¹, А. И. Чукавин¹, А. А. Елисеев³

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

² *Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

³ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

Одними из первых и самых эффективных материалов для электролюминесцентных источников света является сульфид цинка, легированный медью. Свечение в данном материале обусловлено созданием в результате химического взаимодействия гетеропереходов типа $n(\text{ZnS:Cu})-p(\text{Cu}_2\text{SZn})-n(\text{ZnS:Cu})$, обладающих эффективной эмиссией люминесценции. Порошки и пленки на основе ZnS:Cu широко используются для создания на их базе люминесцентных панелей, устройств символьного отображения информации и других приложений, однако их генерационные характеристики (яркость и длина волны излучения), а также время непрерывной эффективной работы заметно проигрывают по сравнению с аналогичными параметрами светодиодов.

В данной работе предлагается новый материал, который может быть использован в качестве люминофора в электролюминесцентных источниках света: легированный медью сульфид цинка, осажденный методом вакуумно-термического осаждения в матрицы анодного оксида алюминия. Предполагается, что когерентное сложение излучения большого массива наночастиц, каждая из которых будет представлять индивидуальный источник излучения, значительно повысит яркость излучения с одновременным уменьшением энергопотребления.

Полученные нанокompозиты были исследованы методами рентгено-фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской дифракции, а локальное атомное окружение вокруг атомов Zn и Cu – методами EXAFS- и XANES-спектроскопии. Люминесценция исследована методом УФ-люминесцентной спектроскопии.

Работа выполнялась в рамках проекта Президиума УрО РАН № 15-9-2-28.

Тепловые и магнитные аномалии $Mn_{1-x}Co_xGe$

Г. А. Вальковский¹, Е. В. Алтынбаев^{1, 2}, М. Д. Кучугура¹, Е. Г. Яшина¹,
А. В. Цвященко³, С. В. Григорьев^{1, 2}

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

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

³ Институт физики высоких давлений, Троицк, Москва, Россия

Соединения с геликоидальной магнитной структурой представляют огромный интерес вследствие богатства наблюдаемых физических явлений и перспективности применения в спинтронике. Помимо хорошо изученного MnSi к ним относится и MnGe, обладающий рядом преимуществ, таких как высокая температура магнитного фазового перехода (≈ 29 К для MnSi и ≈ 130 К для MnGe) и большая величина магнитного момента атома Mn ($\approx 0,4 \mu_B$ для MnSi и $\approx 1,9 \mu_B$ для MnGe в упорядоченном состоянии).

Как показали недавние исследования, особенностью MnGe является наличие аномально широкого диапазона температур, соответствующего магнитному фазовому переходу («кроссоверу») из упорядоченной геликоидальной структуры в неупорядоченную парамагнитную [1, 2]. В работе [2] также обнаружено существование выше температуры упорядочения магнитных спиралей промежуточной фазы – парамагнитной с ферромагнитными «каплями» размером ~ 1 нм. Однако на сегодняшний день наблюдаемые аномалии недостаточно хорошо изучены как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Несомненный интерес представляет поведение указанных особенностей в твердых растворах $Mn_{1-x}Co_xGe$ при различных x – в переходных соединениях от геликомагнитного MnGe к диамагнитному CoGe.

Образцы $Mn_{1-x}Co_xGe$ исследовались методами порошковой рентгеновской дифракции и СКВИД-магнитометрии. Тепловое расширение получали из анализа зависимости параметра решётки от температуры в диапазоне 80–500 К. Показано, что отклонение от модели Дебая увеличивается по мере уменьшения x в соединении $Mn_{1-x}Co_xGe$ и максимально для MnGe в области магнитного «кроссовера». В частности, в области температур ~ 175 – 275 К для MnGe наблюдается отрицательная «добавка» в коэффициент теплового расширения. Указанная аномалия, вероятно, связана с магнитным вкладом в тепловое расширение. Необычно также, что для образцов с малым x магнитная восприимчивость экспоненциально спадает с температурой в области магнитного «кроссовера». Возможные причины таких аномалий обсуждаются.

1. M. Deutsch, P. Bonville et al. Phys. Rev. B. 144401, 90 (2014).

2. E. Altybaev, S.-A. Siegfried et al. Phys. Rev. B. 174420, 90 (2014).

Исследование физических свойств и структуры анодных пленок WO_3

Л. А. Алешина, А. И. Васильев, В. П. Малиненко

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Объектом исследования был выбран оксид вольфрама (VI), так как он обладает электро- и фотохромными эффектами, при которых протекает фазовый переход металл – диэлектрик, что обеспечивает реализацию эффекта переключения в таких пленках. Данные характеристики пленок напрямую зависят от условий и способа получения. Оксид вольфрама может использоваться для хранения и записи информации как элемент памяти или как переключающий элемент. В настоящее время получают и интенсивно изучают структуры фотонных кристаллов на основе оксида вольфрама.

Цель работы – определение электрофизических характеристик анодного оксида вольфрама, обладающего электрохромными свойствами, и исследование структуры оксида методом рентгенографии.

Окисление металла проводилось в растворе слабой серной кислоты 0,01N H_2SO_4 при плотности тока $j = 1 \text{ mA/cm}^2$ в гальваностатическом и смешанном режимах.

Исследования диэлектрических свойств на переменном сигнале показали, что время релаксации поляризации составляет $\tau = 5,3 \cdot 10^{-7} \text{ с}$. Механизм релаксации дебаевский с параметром отклонения 0,27. Диэлектрическая проницаемость на бесконечно высоких частотах $\epsilon_\infty = 5,2$, коэффициент преломления $n = 2,28$. Величина статической диэлектрической проницаемости составляет $\epsilon_{ст.} = 145$. Ее значение свидетельствует о том, что исследованная анодная аморфная пленка проявляет сегнетоэлектрические свойства.

Из рентгенографического эксперимента было установлено, что пленки аморфны. Обработка результатов эксперимента проводилась методом Финбака – Уоррена. Рассчитывались значения радиусов и размытий координационных сфер и координационные числа. Результаты вычислений сравнивались с соответствующими данными, рассчитанными для кристаллических модификаций оксидов и гидроксидов вольфрама. Было установлено, что координационные числа N_{ij} близки по значениям к данным для порошкового анодного аморфного оксида, ближний порядок в котором ранее был идентифицирован с расположением атомов в фазе $WO_3 \cdot 1/3 H_2O$.

Исследование оптических и электрических свойств серебряных наноструктур на пороге перколяции

И. А. Гладских

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

Металлические структуры на пороге перколяции представляют огромный интерес благодаря уникальным электрическим свойствам – изменению проводимости под действием приложенного напряжения [1, 2]. Однако получение таких структур при осаждении металла на поверхность подложек является трудновыполнимой задачей, т. к. формы металлических наночастиц зачастую являются неравновесными и изменяются со временем даже при комнатной температуре благодаря диффузии атомов по их поверхности (самодиффузии). В данной работе представлен простой способ получения серебряных наноструктур на пороге перколяции, основанный на обособлении наночастиц при термическом отжиге пленки, которая имеет металлическую проводимость, т. е. между электродами имеется непрерывный металлический путь.

Металлические пленки создавались методом осаждения из газовой фазы термически испаренного серебра (99,99 %) на поверхность сапфировых в высоком вакууме $\sim 10^{-7}$ Торр (PVD 75 Kurt J. Lesker). Образец закреплялся на манипуляторе со встроенной печкой, с возможностью изменения температуры подложки от комнатной температуры до 300 °С. Количество напыленного материала контролировалось с помощью кварцевых микровесов как эквивалентная толщина сплошной пленки. Скорость напыления выбиралась от 0,1 Å/с до 1 Å/с. Конструкция установки и ее оснащение спектрофотометром РМА-12 (Hamamatsu) и пикоамперметром Keithley 6487 позволили получать спектры экстинкции и измерять сопротивление, как в процессе напыления, так и в процессе прогрева пленки.

Температура подложки при напылении в большей степени влияет на структуру пленки, чем скорость напыления. Так, при напылении на подложку при 200 °С образуются отдельные частицы правильной формы, близкой к сплюснутому сфероиду. В спектрах экстинкции таких пленок наблюдается узкий плазмонный пик. Сопротивление данных пленок очень велико ($> 10^{14}$ Ом) и не могло быть измерено доступными нам средствами.

При напылении на подложку при комнатной температуре образуются сложные лабиринтные структуры, при этом плазмонная полоса поглощения значительно уширяется и сдвигается в длинноволновую область спектра по мере роста пленки. Сопротивление пленок экспоненциально уменьшается с увеличением количества осажденного материала, а показатель экспоненты сильно зависит от скорости напыления. После напыления спектры экстинкции и сопротивление пленок продолжают изменяться. Характер изменений оптических свойств был одинаковым вне зависимости от скорости напыления:

плазмонный пик немного сдвигается в коротковолновую область, что говорит о небольших изменениях формы частиц в пленке. Сопротивление пленок, осажденных с разной скоростью напыления, изменялось по-разному. У пленок, напылявшихся медленно ($0,1 \text{ \AA}/\text{с}$), сопротивление увеличивалось, а у напылявшихся быстро ($0,5 \text{ \AA}/\text{с}$ и более) – уменьшалось. Спустя сутки первые становились высокоомными ($\sim 10^{12} \text{ Ом}$), а вторые – проводящими ($\sim 10^3 \text{ Ом}$).

Термический отжиг значительно изменял морфологию пленок, напыленных на холодную подложку. При глубоком отжиге образуются частицы правильной формы, а оптические и электрические свойства пленок становятся подобными свойствам пленок, осажденных на горячую подложку.

При отжиге проводящих пленок наблюдается резкое увеличение сопротивления на $5\div 8$ порядков, что свидетельствует о разрыве непрерывных металлических путей, соединяющих электроды. Если остановить прогрев пленки сразу после этого скачка сопротивления, то расстояние между частицами будет очень мало. При этом морфология пленок и их оптические свойства практически не изменяются. Вольт-амперные характеристики имеют нелинейный характер, проявляющийся в виде резких изменений сопротивления ($5\div 8$ порядков) при подаче порогового напряжения. Величина порогового напряжения может варьироваться в зависимости от времени отжига от нескольких вольт до нескольких сотен вольт. Причем для пленок толщиной менее 10 нм наблюдались обратимые переключения сопротивления (переход в высокоомное состояние осуществлялся при напряжениях меньше порогового), а для пленок толщиной более 10 нм – необратимые переключения сопротивления.

Таким образом, данные изменения проводимости пленок на пороге перколяции можно связать с небольшими структурными изменениями пленки под действием электрического поля. Необратимые изменения проводимости свидетельствуют именно о структурных изменениях пленки, а отсутствие изменений оптических свойств говорит о малости данных изменений.

Работа частично выполнена в рамках НИР № 2350 по государственному заданию № 2014/190.

1. *Вартамян Г.А., Гладских И.А., Леонов Н.Б., Пржибельский С.Г.* Тонкие структуры и переключение электропроводности в лабиринтных плёнках серебра на сапфире // *Физика твердого тела*. 2014. 56 (4), P. 783–789.
2. *Kiesow A., Morris J.E., Radehaus C., Heilmann A.* Switching Behavior of Plasma Polymer Films Containing Silver Nanoparticles // *Journal of Applied Physics*. 2003. V. 94 (10). P. 6988–6990.

Электрохимическое формирование одномерных наноструктур висмута

А. С. Гончарова, К. С. Напольский, А. А. Елисеев, Ю. А. Касумов, Г. А. Цирлина

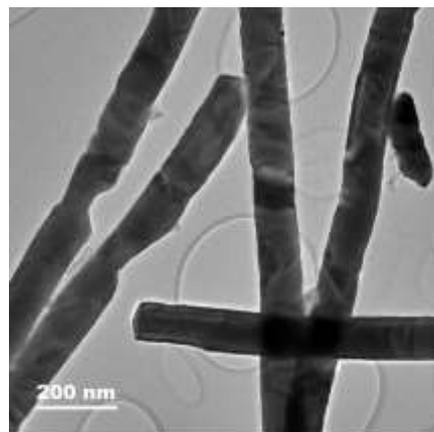
Московский государственный университет, Москва, Россия

Висмут представляет большой интерес для исследователей благодаря необычным электронным свойствам: большой длине свободного пробега электронов и длине волны Ферми. Целью данной работы является получение нитевидных наноструктур висмута с контролируемыми размерами и кристаллографической ориентацией и изучение их резистивных характеристик.

Нанонити висмута получали методом темплатного электроосаждения. В качестве пористых матриц выступали пленки анодного оксида алюминия, сформированные в 0,3 М растворе $(\text{COOH})_2$ при напряжениях 40 и 120 В (АОА 40 В и АОА 120 В соответственно). По данным растровой электронной микроскопии диаметр пор для АОА 40 В составлял 50 ± 3 нм, а для АОА 120 В – 125 ± 20 нм. Электрохимическое осаждение Bi проводили из электролитов, содержащих 0,1–0,4 моль/л $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$ в смеси этиленгликоля с водой (7 : 3 по объему), при потенциале $-0,2$ В относительно висмутового электрода сравнения в том же растворе. Перед осаждением электролит деаэрировали аргоном в течение 30 мин.

По данным РФА для нанокмозитов АОА/ Bi рефлекс 110 обладает максимальной интенсивностью. Таким образом, при электрокристаллизации висмута в каналах пористой матрицы нанонити преимущественно растут вдоль кристаллографического направления (110) ромбоэдрической структуры Bi . Такая тенденция наблюдается для всех использованных концентраций $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$ в электролите.

Согласно данным ПЭМ полученные нанонити состоят из монокристаллических сегментов длиной порядка 1 мкм, разделенных малоугловыми границами. Часто в области границ наблюдаются перешейки, что приводит к разрушению нанонитей на единичные сегменты в процессе извлечения из матрицы. Увеличение концентрации $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$ до 0,4 моль/л способствует увеличению средней длины монокристаллических сегментов и уменьшению числа перешейков. В результате формируются более прочные наноструктуры, не разрушающиеся при ультразвуковом диспергировании после удаления матрицы.



Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 13-02-91058, 13-03-01089 и 14-02-31798).

Эффективные способы в решении экологических вопросов электроэнергетики на основе электрофизических процессов

Г. Дж. Гусейнов

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

В настоящей работе приведены результаты исследования процессов очистки природного газа и жидкостей углеводородной природы, используемых в качестве горючего материала в производстве электроэнергии. В этой связи рассмотрены следующие вопросы: активация и модифицирование поверхности адсорбентов различными воздействиями, в частности с помощью электрического разряда; управление сорбционными процессами; интенсификация процессов очистки газов и жидкостей; активация реагентов; изучение адсорбционных и десорбционных процессов, происходящих в условиях воздействия электрических разрядов.

В работе экспериментально установлено, что при электроразрядной обработке адсорбентов происходит процесс внедрения электрических зарядов на поверхность и в объем адсорбентов. Высокотемпературные пики, проявляющиеся в кривых термостимулированных токов, свидетельствуют о глубоких уровнях внедрения заряда. Накопившиеся в адсорбенте электрические заряды, по-видимому, образуют дополнительные центры адсорбции и тем самым повышают эффективность сорбционных процессов.

Изучены физико-химические механизмы, происходящие в адсорбционных процессах, а также исследованы быстро протекающие газовые реакции в условиях воздействия электрических разрядов. Результаты этих исследований позволили управлять адсорбционно-десорбционными процессами.

На основе полученных результатов в работе предложены новые, достаточно эффективные технологические процессы по очистке природного газа от примесей CO, CO₂, NO_x, H₂S, влаги, а также процессы очистки мазута от сернистых соединений и очистки сбросовых вод промышленных предприятий, в частности тепловых электростанций.

В работе экспериментально определены факторы, влияющие на озонный слой атмосферы, связанные с эксплуатацией тепловых электростанций.

Установлено, что с использованием воздействий электрических полей и разрядов на процесс горения топлива в горелочных устройствах представляется возможность повышения эффективности горения топлива и тем самым уменьшения вредных веществ в составе уходящего в атмосферу газа.

При воздействии газового разряда на топливо перед его сгоранием и электрического поля на пламя происходит полное сгорание топлива, что связано с образованием дополнительных центров горения вследствие диссоциации водяных паров. Диссоциация паров воды происходит за счет теплового и электрического воздействий.

Образование в объеме активных центров горения в виде атомов Н и О, а также молекулы ОН в дальнейшем обеспечивает объем и способствует

осуществлению цепочечной реакции процесса горения. Одновременно с вышесказанным уменьшение в дымовых газах количества NO способствует образованию в атмосфере дополнительных молекул O₃.

Вследствие воздействия газовых разрядов на процесс горения в составе дымовых газов образуются радикалы молекул OH и HO₂, что способствует окислению сульфидов, и тем самым происходит процесс очистки газов от сульфидных соединений.

В работе на основе существующих экспериментальных данных и теоретических представлений проанализированы и выявлены наиболее вероятные физико-химические механизмы исследуемых процессов.

Особенности рамановского рассеяния света в кристаллах $\text{BaFe}_{12-x}\text{Al}_x\text{O}_{19}$

*Р. Э. Гусейнов¹, А. И. Мамедов¹, Р. З. Мехдиева¹, А. В. Труханов²,
С. Г. Джабаров^{1,3}, Н. Т. Данг⁴*

¹ *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

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

³ *Bayerisches Geoinstitute, University Bayreuth, Bayreuth, Germany*

⁴ *Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, Vietnam*

Феррит бария ($\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) является одним из самых интересных и изучаемых мультиферроиков. Кристаллическая структура $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ гексагональная с пространственной группой симметрии $P6_3/mmc$. При комнатной температуре параметры решетки $a = 5,886(2)$ Å, $c = 23,143(7)$. Элементарная ячейка, которая включает в себя две формульные единицы ($Z = 2$), содержит 38 ионов кислорода, 24 иона трехвалентного железа и 2 иона бария.

Гексаферриты хорошо известны как ферромагнитные материалы с сильной одноосной анизотропией, и это поле анизотропии можно регулировать путем замены ионов Fe^{3+} . Эти замены направлены на разработку материалов с улучшенными характеристиками, которые делают гексаферриты подходящими для технологических применений. Литературных данных об Al^{3+} -замещениях в феррите бария немного. Структурные и магнитные свойства этих материалов, похоже, изменяются в зависимости от способа получения и концентрации Al^{3+} . Кроме того, как сообщается, затронуты свойства СВЧ-поглощения при замещении ионов Fe^{3+} на Al^{3+} .

В данной работе представлены спектры рамановского рассеяния света $\text{BaFe}_{12-x}\text{Al}_x\text{O}_{19}$, измеренные на спектрометре LabRam (NeHe лазер с длиной волны 632 нм, конфокальная щель 110 мкм и $\times 50$ объектив) при комнатной температуре для различных значений x .

В диапазоне $200\text{--}800$ cm^{-1} в $\text{BaFe}_{11,9}\text{Al}_{0,1}\text{O}_{19}$ присутствуют 8 пиков, расположенных при значениях $\nu \sim 286, 330, 441, 463, 518, 610, 678$ и 707 cm^{-1} . Как видно из спектров, с увеличением количества Al происходит смещение мод вдоль оси x . В $\text{BaFe}_{11,4}\text{Al}_{0,6}\text{O}_{19}$ и $\text{BaFe}_{11,1}\text{Al}_{0,9}\text{O}_{19}$ также можно наблюдать эти моды. Отсюда делается вывод, что в интервале значений $x = 0,1\text{--}0,9$ кристаллическая структура не изменяется.

Монокристаллы в солевой системе $K_3H(SO_4)_2-(NH_4)_3H(SO_4)_2-H_2O$

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

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

На основе исследования суперпротонных кристаллов $(K_x(NH_4)_{1-x})_m H_n(SO_4)_{(m+n)/2} \cdot yH_2O$ системы $K_3H(SO_4)_2-(NH_4)_3H(SO_4)_2-H_2O$, впервые полученных в ИК РАН, установлено, что выращенные монокристаллические образцы твердых растворов отличаются по габитусу и симметрии в зависимости от состава исходного раствора. По этому критерию они были разделены на три группы. Кристаллы первой группы из растворов с соотношением $K : NH_4$ от 9 : 1 до 7 : 3 представляют собой октаэдры, второй группы с соотношением 6 : 4–4 : 6 – иголки, третьей группы 3 : 7–1 : 9 – тонкие пластинки [1].

Исследования показали, что использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением 9 : 1 приводит к росту кристаллов с таким же структурным типом, что и у $K_3H(SO_4)_2$ [2]. На основании РСА установлено, что в состав образцов $(K_x(NH_4)_{1-x})_3H(SO_4)_2$ вошло не менее 3 % аммония, что приводит к изменениям в системе водородных связей и в результате к существенному изменению кинетики структурного ФП.

Использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением 6 : 4 приводит к росту кристаллов со структурным типом, отличающимся от исходных соединений: кристаллы имеют химическую формулу $(K_x(NH_4)_{1-x})_9H_7(SO_4)_8 \cdot H_2O$ [1, 3]. На основании полученных структурных данных были сделаны выводы, что в состав образцов вошло не менее 4 % аммония. В результате при замещении атомов калия аммонием и, как следствие, появлении дополнительных водородных связей, блокирующих каналы проводимости, в этих кристаллах проводимость уменьшается на 4 порядка.

Результаты исследования монокристаллов третьей группы показали, что использование растворов $K_3H(SO_4)_2$ и $(NH_4)_3H(SO_4)_2$ с соотношением 3 : 7 приводит к росту кристаллов с пр. гр. $R\bar{3}$ и в состав образцов вошло порядка 57 % аммония [4]. При этом величина проводимости исследуемого монокристалла уже при комнатной температуре демонстрирует значения, соответствующие проводимости исходных соединений при повышенных температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Отделения физических наук РАН П.5.

1. *Е.В. Дмитричева и др.* // Кристаллография (2014), 59(3), с. 387–395.
2. *Е.В. Дмитричева и др.* // Кристаллография (2014), 59(6), с. 966–972.
3. *E.V. Dmitricheva et al.* // Solid State Ionics (2014), v. 268, p. 68–75.
4. *Е.В. Дмитричева и др.* // Кристаллография (2015), в печати.

Коллоидные растворы на основе магнитотвердых наночастиц и их применение

А. А. Елисеев, А. В. Васильев, Л. А. Трусов

Московский государственный университет, Москва, Россия

Анизотропные покрытия из магнитотвердых наночастиц перспективны для изготовления магнитных носителей информации высокой плотности. В настоящее время для этого промышленно используются тонкие нанокристаллические пленки различных ферромагнитных материалов. Данная область применения накладывает определенные ограничения на различные параметры материала, в частности на коэрцитивную силу и размер кристаллита. Одним из способов повысить плотность перпендикулярной записи является переход к упорядоченным массивам наночастиц с высокой магнитокристаллической анизотропией. Создание таких массивов возможно путем осаждения ферромагнитных коллоидных частиц (например, гексаферрита стронция) на подложки. Другое применимое свойство ферромагнитных коллоидов – способность менять прозрачность при приложении магнитного поля – может быть использовано для визуализации магнитных полей. Однако получение стабильных коллоидных растворов с магнитотвердыми частицами сильно осложняется их тенденцией к агрегации за счет магнитных взаимодействий.

Целью настоящей работы является установление зависимости между стабилизирующими факторами, структурой дисперсной фазы раствора и его магнитооптическими свойствами. Отдельной частью работы является разработка методики получения ориентированных покрытий.

Получение коллоидного раствора осуществлялось по разработанной ранее методике растворения боратной стеклокерамики. Преимуществом данного метода является изначальное разделение частиц в структуре стеклокерамики, что позволяет формировать коллоидные растворы без использования ПАВ. Однако такие дисперсные системы могут быть легко дестабилизированы. Были установлены максимальные пределы изменения рН и концентрации электролита для коллоидов без модификаторов и для растворов после использования различных методик стабилизации, а также изучено влияние последних на магнитооптические свойства. При помощи данных растворов получены анизотропные покрытия наночастиц гексаферрита и исследованы их магнитные свойства.

Изучение строения халькогенидных стекол и особенностей внедрения легирующей примеси – висмута – с помощью дифракционных методов

*В. В. Воронов¹, М. В. Суханов², В. Г. Плотниченко³, Р. П. Ермаков³,
Л. Д. Исхакова³, Д. В. Филипповский³*

¹ *Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

² *Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девярых РАН,
Нижний Новгород, Россия*

³ *Научный центр волоконной оптики РАН, Москва, Россия*

Халькогенидные стекла широко применяются в качестве преобразователей ИК-излучения, полупроводниковых оптических переключателей и материалов для ИК-оптики. Стекла на основе Ge–S сочетают широкую полосу прозрачности с возможностью легкого легирования редкоземельными ионами и имеют хорошие перспективы применения в волоконной оптике [1] в качестве передатчиков/усилителей ИК-излучения. Однако неустойчивость таких стекол к кристаллообразованию затрудняет вытяжку световодов на их основе.

Целью работы было изучение строения халькогенидных стекол систем: Ge–S: Bi, Ge–Ga–S: Bi, Ge–As–S: Bi и ее корреляция с макроскопическими свойствами и склонностью к кристаллообразованию.

Сочетанием методов сканирующей электронной микроскопии и порошковой рентгеновской дифракции определены границы составов стекол системы Ge – S, наиболее устойчивых к кристаллизации. Применением высокотемпературной рентгенографии изучены кинетики фазообразования с кристаллизацией GeS, α -GeS₂, β -GeS₂ и Bi и особенности межфазного распределения иона-активатора Bi. Обнаружена цикличность в кристаллизации и растворении металлического висмута с охлаждением и нагревом стекол системы Ge – S:Bi. Показано, что добавление Ga в рассматриваемую систему сужает область стеклообразующих составов и приводит к кристаллизации сульфидов галлия и германия. Добавление мышьяка в систему Ge – S, напротив, позволяет получить устойчивую к кристаллизации форму стекол с гомогенным распределением висмута как активатора и однородной микроструктурой. Методом интегрального анализа кривых интенсивности [2] получены функции радиального распределения для стекол рассматриваемых систем. На основе полученных данных высказаны предположения относительно строения сетки и особенностей первой координационной сферы.

Полученные экспериментальные данные относительно фазообразования в изученных системах и строения стекол, активированных висмутом, обсуждаются с учетом имеющихся в литературе данных [3] о строении сульфидных стекол.

1. *V.G. Plotnichenko, D.V. Philipovskiy, V.O. Sokolov, M.V. Sukhanov, A.P. Velmuzhov, M.F. Churbanov, E.M. Dianov. Infrared Luminescence in Bi-Doped Ge–S and As–Ge–S Chalcogenide Glasses and Fibers // Optical Materials Express, 4 366 (2014).*
2. *А.Ф. Скрышевский. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел / Москва, Высшая школа, 1980.*
3. *A. Bychkov, G.J. Cuello, S. Kohara, C.J. Benmore, D.L. Price and E. Bychkov. Unraveling the Atomic Structure of Ge-Rich Sulfide Glasses // Phys. Chem. Chem. Phys., 2013, 15, 8487–8494.*

Исследование фотокаталитических свойств наноструктурированного диоксида титана

А. О. Ермолович

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Целью научной работы являлось исследование электронных и фотокаталитических процессов на поверхности наноструктурированного оксида титана. Актуальность поставленной задачи определяется наличием большого количества теоретических и практических работ в области нанофотоники [1, 2].

Объектом исследования являлась структура на основе наноструктурированного оксида титана. В настоящее время существует несколько категорий наноструктур на основе оксида титана, широко используемых в микроэлектронной промышленности: наноструктурированный титан, осажденные на поверхность титана наночастицы благородных металлов, а также композитные наноструктуры, включающие сам оксид титана и благородные металлы, либо полупроводники. В ряде прикладных работ приведены данные электронных и оптических характеристик и фотокаталитических свойств указанного материала. Однако до сих пор нет единой модели, позволяющей описать и в дальнейшем предсказать процессы, протекающие на поверхности наноразмерных структур. Создание такой модели позволит в дальнейшем проектировать наноэлектронные приборы с требуемыми оптическими и электронными параметрами.

1. I. D. Mayergoyz, Z. Zhang and G. Miano. Analysis Of dynamics Of excitation and Dephasing Of plasmon Resonance Modes in Nanoparticles. Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 147401.
2. S. Mohapatra, Y. K. Mishra, D. K. Avasthi, D. Kabiraji, J. Ghatak and S. Varma. Synthesis of Gold-Silicon Core-Shell Nanoparticles with Tunable Localized Surface Plasmon Resonance. Appl. Phys. Lett. 92 (2008) 103105.

Электрические свойства широкозонных полупроводников и многослойных структур

О. В. Жилова, И. В. Бабкина, В. А. Макагонов, А. В. Ситников

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Образцы были получены ионно-лучевым методом напыления с использованием мишеней из полупроводников С, In_2O_3 и ZnO . Причем мишени использовались как отдельно, так и совместно друг с другом. За один оборот подложкодержателя формировался один слой полупроводника. В результате были получены структуры [C]71, $[\text{In}_2\text{O}_3]$ 71, $[\text{ZnO}]$ 69, $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}]$ 83, $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{C}]$ 74, $[\text{ZnO}/\text{C}]$ 81, где числами показано количество оборотов подложкодержателя.

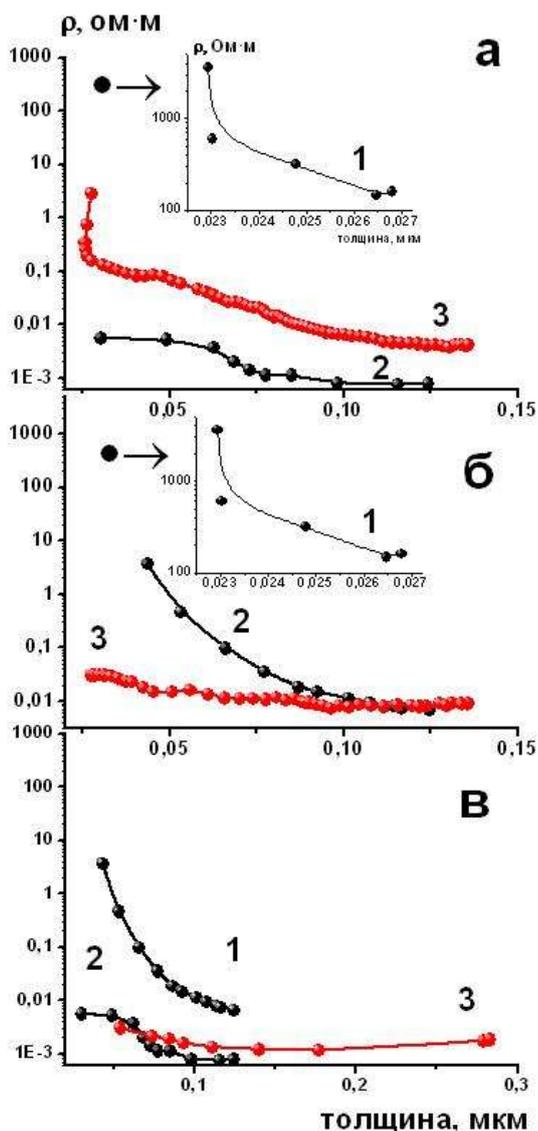
Проведенные исследования электрических свойств полупроводников [C]71, $[\text{In}_2\text{O}_3]$ 71, $[\text{ZnO}]$ 69, $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}]$ 83, $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{C}]$ 74, $[\text{ZnO}/\text{C}]$ 81 показали, что в однофазных структурах происходит уменьшение удельного сопротивления (ρ) с увеличением толщины пленки, что обусловлено рассеиванием носителей заряда на поверхности.

Удельное сопротивление в двухфазной структуре $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{C}]$ 74 можно интерпретировать исходя из теории эффективных сред, тогда ρ многослойной структуры соответствует среднему значению между $\rho[\text{In}_2\text{O}_3]$ 71 и $\rho[\text{C}]$ 71. Однако в двухфазных структурах $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}]$ 83 и $[\text{ZnO}/\text{C}]$ 81 при малых толщинах пленки удельное сопротивление ниже рассчитанного в рамках данной теории (рис.).

Таким образом, можно предположить, что в структурах $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}]$ 83 и $[\text{ZnO}/\text{C}]$ 81 значительный вклад в изменение удельного сопротивления вносят межфазные границы.

Исследование дифракции рентгеновских лучей в области малых брэгговских углов показало, что в пленках $[\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}]$ 83 присутствуют пики, положение которых, исходя из условия дифракции Вульфа – Брэгга, соответствует толщине полупроводниковых слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-02-97512-р_центр_a).



Зависимость формы двухкристалльных дифракционных пиков от внутренней дислокационной структуры

Д. А. Иванов¹, Р. Н. Кютт^{1,2}

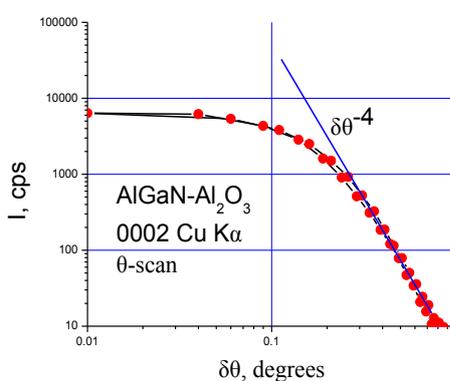
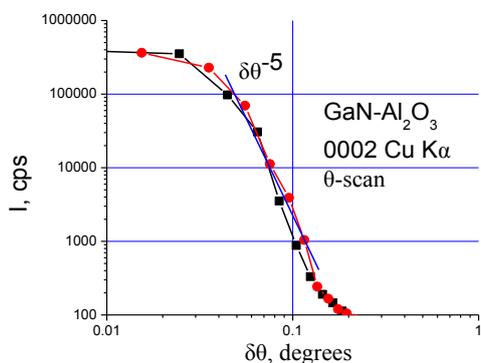
¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

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

В последние годы наблюдается интерес к изучению дефектной структуры эпитаксиальных слоев с помощью анализа формы пиков рентгеновской дифракции [1–3]. Профили дифракционных пиков чувствительны к смещающим полям дислокаций и содержат информацию о плотности дислокаций и их позициях. Хотя теоретические рассуждения в [1, 2] базируются на одинаковых принципах, они дают разные результаты. Таким образом требуются дальнейшие исследования в этой области.

В данной работе экспериментально исследовались профили дифракционных пиков эпитаксиальных слоев на сапфировой подложке. Исследовались слои AlN, GaN и твердых растворов AlGaN различной толщины, степени кристаллического совершенства и типов дефектов. Измерения проводились на рентгеновском дифрактометре в двухкристалльном режиме на Cu-K α -излучении.

В работе анализировалось угловое распределение интенсивности в центральной части дифракционных пиков и ее поведение на хвостах (рис.). Пики аппроксимировались функцией Войта. При этом в центральной части отражений профили не имеют чисто гауссовской формы, но во многих случаях содержат лоренцовскую составляющую. Для большинства структур падение интенсивности на хвостах кривых отклоняется от пиковой функции (оно более быстрое) и может быть аппроксимировано степенной функцией. Для структур с большой плотностью дислокаций наблюдается возрастание влияния компоненты лоренцева распределения на форму пика в центральной части, а степенное спадание на хвостах варьируется от $\Delta\theta^{-3}$ до $\Delta\theta^{-5}$. В данной работе исследовалась зависимость степени спадания интенсивности на хвостах от типа дефектов.



Распределение интенсивности при θ -сканировании пиков (в двойном логарифмическом масштабе) для двух слоев GaN и AlGaIn сапфировой подложке с различными типами дислокаций

1. Barchuk M. et al. J. Appl. Phys. 2010, **108**, 043521.
2. Kaganer V. M. et al. Phys. Rev. B. 2005, **72**, 045448.
3. Kyutt R. N., Dyshekov A. A. Tech. Phys. Lett. 2011, **37**, 306.

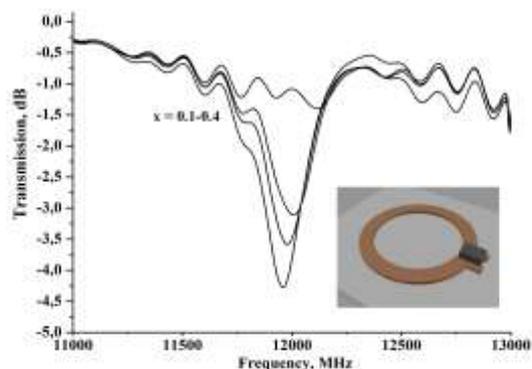
Магнитоэлектрические материалы на основе керамики $\text{Pb}(\text{Fe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5})\text{O}_3$

Д. А. Калганов, А. А. Федий, И. В. Бычков, И. А. Глушко

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Материалы, обладающие одновременно магнитным и электрическим упорядочением, – мультиферроики, являются перспективными для применения в современной микро- и СВЧ-электронике. Особое внимание уделяется средам, магнитоэлектрические (МЭ) свойства которых проявляются при комнатных температурах. В большинстве однофазных мультиферроидных материалов МЭ-эффекты малы по величине и наблюдаются при низких температурах или в больших магнитных полях, что ограничивает их применение. Гораздо больший по величине МЭ-эффект обнаружен в искусственно созданных композитных структурах [1].

В работе на основе керамики феррониобата свинца $\text{Pb}(\text{Fe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5})\text{O}_3$ (PFN) и феррита $\text{Cu}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (CMF) был получен композитный магнитоэлектрический материал состава $(1-x)\text{PFN} + x\text{CMF}$. В диапазоне частот 20 Гц–1 МГц были получены температурная зависимость диэлектрической проницаемости, а также значения магнитодиэлектрического эффекта для различных частот. Установлено, что на указанных частотах в этих материалах наблюдаются широкие максимумы диэлектрической проницаемости при температуре $T = 520\text{--}560$ К. В диапазоне СВЧ (8–13 ГГц) для измерения диэлектрической проницаемости применялся плоский кольцевой резонатор с сосредоточенными параметрами (рис.), который образован одним витком проводника прямоугольного сечения (индуктивность) с разрезом (емкость). Резонансная частота пустого резонатора определялась его параметрами и была равна 11 ГГц. При внесении в разрез резонатора исследуемого материала происходил сдвиг резонансной частоты и изменение добротности. Значения диэлектрической проницаемости, измеренные таким образом на частоте ~ 12 ГГц, максимальны при $x = 0,1$ ($\epsilon = 9,1$). Показана возможность применения такого типа резонатора как для измерения диэлектрической проницаемости и магнитодиэлектрического эффекта, так и в роли микрополоскового СВЧ-устройства, управляемого внешним магнитным полем.



Работа поддержана грантом РФФИ № 15-07-08111.

1. Бичурин М.И., Петров В.М., Филиппов Д.А., Сринивасан Г. Магнитоэлектрические материалы. М.: Академия естествознания, 2006. 296 с.

Электрические и гальваномагнитные свойства Si/SiO₂(Ni) наноструктур

Е. Ю. Канюков

Научно-практический центр НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь

Посредством ионно-трековой технологии, заключающейся в облучении быстрыми тяжелыми ионами, селективном травлении и электрохимическом осаждении никеля в поры, сформированы наноструктуры Si/SiO₂(Ni). С использованием СЭМ, ПЭМ, АСМ и дифракционных методов анализа проведено последовательное изучение структурных параметров на всех этапах создания. Рассчитаны усредненные величины потенциальных барьеров для контактов Si/Ni наноструктур Si/SiO₂(Ni) при комнатной температуре, и показана динамика их изменения с понижением температуры. Установлены механизмы электропереноса в температурных интервалах ~ 300–200 К, ~ 200–100 К и ~ 100–20 К. Обнаружен положительный магниторезистивный эффект в наноструктурах Si/SiO₂(Ni), достигающий 1 000 % в магнитном поле 12 Тл при температуре 20 К, уменьшающийся с ростом температуры и исчезающий при ~ 100 К. Впервые обнаружена инверсная по знаку зависимость ЭДС Холла от температуры в наноструктурах Si/SiO₂(Ni), обусловленная доминированием электронного (~ 300–100 К) или дырочного типа проводимости (~ 100–20 К), с отклонением температурной зависимости от экспоненциального закона при температурах ниже ~ 100 К. Предложена концепция создания на базе полученных наноструктур низкотемпературного сенсора магнитного поля для космического применения и/или использования в условиях жидководородного охлаждения.

Зависимость растворимости водорода в клатрате кремния от давления

Д. И. Капустин, И. А. Шолин

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

Клатрат кремния $\text{Na}_x\text{Si}_{136}$ с $x \leq 24$ представляет собой сложную кубическую структуру из атомов кремния, в полостях которой располагаются атомы натрия. Содержание натрия в клатрате может быть снижено до $x < 10$ путем высоковакуумного отжига, и освободившиеся полости могут быть, в принципе, заполнены другими атомами или молекулами. В настоящей работе мы синтезировали клатрат кремния с $x = 7$, построили барическую зависимость растворимости водорода в этом клатрате при давлениях до 100 атм и изучили влияние растворенного водорода на термическую устойчивость клатратной фазы при отжиге в вакууме.

Гидрирование образцов проводилось в установке типа аппарата Сиверса в процессе ступенчатого подъема давления с шагом 10 атм и выдержкой в каждой точке в течение 24 ч. Показано, что поглощение водорода начинается при давлении 60 атм, и при 100 атм его концентрация в образце достигает 0,75 вес. %.

Для определения термической устойчивости клатратной фазы кремния мы отжигали в вакууме образцы исходного клатрата и клатрата, содержащего 0,5 вес. % водорода, а затем методом рентгеновской дифракции оценивали степень их превращения в кремний с алмазной структурой. Температура отжигов повышалась от 450 до 650 °С с шагом 50 °С, длительность отжига при каждой температуре составляла 10 мин. Установлено, что превращение обоих образцов в кремний с алмазной структурой происходит при температурах между 500 и 600 °С, однако при 550 °С степень превращения образца с водородом примерно в 1,5 раза больше.

Интересно отметить, что изучавшиеся ранее образцы клатрата кремния распадались при значительно более низкой температуре 450 °С [1].

1. *C. Cros, M. Pouchard. Sur une Nouvelle Famille de Clathrates Minéraux Isotypes des Hydrates de Gaz et de Liquides. Interprétation des Résultats Obtenus. J. Solid State Chem. 2, 570–581 (1970).*

Декагональные монокристаллы системы Al-Co-Cu: синтез, структура, резистивные особенности

М. В. Ключева, Д. А. Шулятев, Н. А. Козловская, А. А. Шакин

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

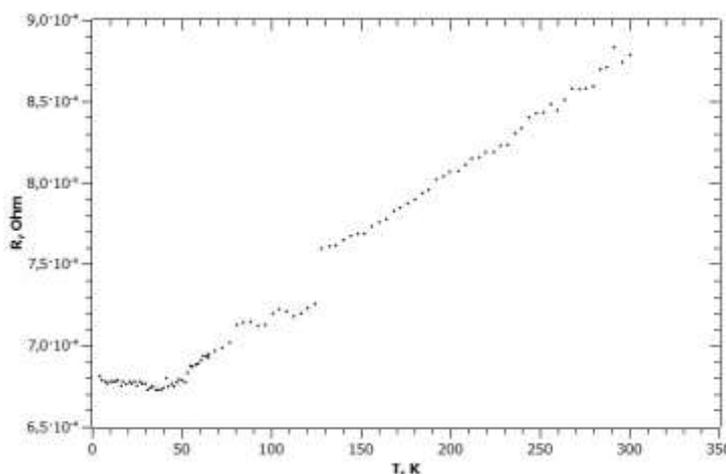
Наличие «запрещенной» симметрии в квазикристаллах влечет за собой интересные физические и механические свойства. Ввиду сочетания высокой износостойкости и коррозионной стойкости с низкой теплопроводностью, практическую перспективу имеет использование квазикристаллических фаз в виде покрытий, а также в качестве наполнителей в композитных материалах [1].

Декагональные квазикристаллы являются интересными объектами для изучения транспортных свойств, так как сочетают в себе периодическое расположение атомов с аperiodическим [2].

В данной работе были синтезированы образцы с исходными стехиометрическими составами $Al_{65}Co_{16}Cu_{19}$, $Al_{65}Co_{17}Cu_{18}$. Монокристаллы длиной до 2 мм и поперечным сечением до 1 мм были выращены путем медленной кристаллизации из раствора в расплаве в инертной атмосфере.

Были проведены измерения температурной зависимости электросопротивления данных объектов, что позволило выявить наличие небольшого падения сопротивления в диапазоне температур от 100 до 150 °С при наложении магнитного поля от 5 до 9 Тл (рис.) Данный скачок может быть связан с эффектом Кондо ввиду наличия в материале небольшого количества (до 1 % ат.) магнитных примесей.

Работа была выполнена в рамках государственного задания № 3.2076.2014/К РФФИ № 14-02-01100а, гранта № 14.Y26.31.0005.



1. Черников М.А., Векилов Ю.Х. Квазикристаллы // Успехи физических наук. 2010. Т. 180, № 6. С. 561–586.
2. Dolinšek J. et al. Anisotropic Magnetic and Transport Properties of Orthorhombic $Al_{13}Co_4$ // Physical Review B. 2009. V. 79. P. 184201–1 – 184201–184212.

Исследование квазидвумерных структур TiS_2 и TiSe_2 с вакансиями и их кластерами

О. А. Козлова, М. С. Зеленина, В. Р. Стемпицкий

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Беларусь*

Целью работы являлось исследование квазидвумерных структур на основе TiS_2 и TiSe_2 при наличии в них одиночных вакансий и их кластеров различных размеров и конфигураций, а также отыскание тех конфигураций вакансий, наличие которых приводит к локальной структурной деформации [1].

Слоистые материалы дисульфида и диселенида титана (TiX_2 , где $X = \text{S}, \text{Se}$) – типичные представители квазидвумерных (2D) $3d$ – $5d$ дихалькогенидов переходных металлов, которые проявляют интересные физико-химические свойства. Благодаря слоистой структуре и сильной анизотропии межатомных связей в TiX_2 становится возможным создание различных интеркаляционных и наноразмерных систем (нанотрубок, нанодисков, фуллереноподобных молекул и т. п. [2, 3]). Также известно, что свойства таких материалов могут в значительной степени зависеть от наличия различных атомных дефектов в объеме и на поверхности структуры, таких как одиночные вакансии и их кластеры, дефекты Френкеля и др.

Исследования посредством сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) [1] показали необычные локальные возмущения на поверхности атомной структуры 1T-TiS_2 , что, как было предложено, могло быть вызвано либо наличием атомных дефектов, либо формированием локального эффекта волны зарядовой плотности. Аналогичные снимки СТМ были получены при исследовании двумерных структур дихалькогенидов на основе других переходных металлов (MeX_2 , где $\text{Me} = \text{Mo}, \text{W}, \text{Ta}$; $X = \text{S}, \text{Se}$) [4, 5].

Для моделирования указанных структур создана суперячейка, состоящая из 6×4 элементарных ячеек, построено 8 типов структурных дефектов (точечные вакансии, кластеры вакансий и дефекты Френкеля). По результатам проведенных расчетов получены данные о стабильности исследованных вакансий и их кластеров, плотности электронных состояний и зонной диаграммы исследованных структур. Квазидвумерные структуры 1T-TiXS_2 с призматической координацией атомов Ti проявляют полупроводниковые свойства шириной запрещенной зоны 0,12–0,15 эВ.

1. *G. Van Bakel, J. De Hosson, and T. Hibma.* Appl. Phys. Lett., 56, No 24, 2402–2404 (1990).
2. *A. N. Enyashin and A. L. Ivanovskii.* Inorgan. Mater., 41, No 10, 1118–1123 (2005).
3. *V. V. Ivanovskaya, G. Seifert, and A. L. Ivanovskii.* Semicond., 39, No 9, 1058–1065 (2005).
4. *M. H. Whangbo, J. Ren, S. N. Magonov et al.* Surface Sci., 326, No 3, 311–326 (1995).
5. *M. H. Whangbo, J. Ren, E. Canadell et al.* J. Am. Chem. Soc., 115, No 9, 3760–3765 (1993).

Исследование процессов кристаллизации аморфных материалов на основе $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Sm}_6$

Т. В. Куликова, В. А. Быков, А. А. Белозерова

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Настоящая работа посвящена изучению процесса кристаллизации в аморфном материале $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Sm}_6$. Аморфный сплав был получен спиннингом в виде ленты шириной 7 мм и толщиной 40 мкм. Для исследования применили метод синхронного термического анализа (прибор STA 409 Luxx, Германия). Для расчета кинетических параметров использовали программный комплекс Netzsch Thermokinetics.

Согласно полученным результатам ДСК обнаружен четырехступенчатый характер процесса кристаллизации в ходе нагрева.

Проведенные ДСК-исследования вплоть до температур 800 К, в режиме нагрева и последующего охлаждения при скорости 10 К/мин, позволили определить температуры кристаллизационных процессов: T_{x1} , T_{x2} , T_{x3} , T_{x4} , точки солидус (T_m) и ликвидус (T_l), а также теплоты соответствующих эндо- и экзотермических реакций. Из полученных термических параметров были рассчитаны отношения T_{x1}/T_l , величины переохлаждения $\Delta T_m = (T_m - T_l)$, а также определены степени кристалличности для всех образцов по известному уравнению $\alpha = 1 - \Delta H_{cryst} / \Delta H_{amor}$, полученные результаты приведены в табл. 1.

Таблица 1. Температуры кристаллизации, солидуса и ликвидуса, степень кристалличности

Аморфная лента	T_{x1} , К	T_{x2} , К	T_{x3} , К	T_{x4} , К	ΔH_1 , Дж/г	T_s , К	T_l , К	T_{x1}/T_l	ΔT_m , К	α , %
$\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Sm}_6$	445	592	620	665	20,9	899	1 139	0,385	6,0	0,33

Термическое поведение аморфных сплава $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Sm}_6$ исследовалось методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) несколько раз при различной скорости нагрева, что дало возможность провести модель-независимую оценку кинетических параметров: энергии активации и предэкспоненциального множителя – с помощью метода Киссенжера (табл. 2).

Таблица 2. Кинетические параметры по методу Киссенжера

Образец	E_1 , кДж/моль	E_2 , кДж/моль	E_3 , кДж/моль	E_4 , кДж/моль	$\lg A_1$, с^{-1}	$\lg A_2$, с^{-1}	$\lg A_3$, с^{-1}	$\lg A_4$, с^{-1}
$\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Sm}_6$	201	299	219	183	20,4	24,5	16,2	11,6

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-03-31207 мол_а.

Карбонизация и распад перовскитовых фаз силикат-антимонатов стронция

Ю. Н. Курылева, Д. А. Захарьевич

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Ранее нами было обнаружено, что при комнатной температуре перовскитовые фазы в системе Sr-Sb-Si-O не устойчивы. В связи с этим были проведены исследования на выявление причин неустойчивости.

При выдержке образца в атмосфере пересыщенного водного раствора CO₂ уже через 24 ч на дифрактограмме появились хорошо выраженные максимумы SrCO₃, максимумы перовскитовой фазы уменьшились и расширились. Дальнейшая выдержка до месяца приводит к исчезновению максимумов перовскитовой фазы и появлению максимумов чистых оксидов сурьмы и кремния. Таким образом, даже при комнатной температуре при повышении концентрации углекислого газа происходит карбонизация перовскитовой фазой силикат-антимоната стронция с полным распадом последней.

Поскольку первым определяемым продуктом реакции является карбонат стронция, можно предположить, что механизм реакции включает адсорбцию молекул CO₂ на поверхность кристаллов силикат-антимонатов стронция, образование зародышей новой фазы и их рост. Для объяснения образования именно карбоната стронция при распаде были рассмотрены особенности кристаллического строения этого продукта реакции и его сопоставление со структурой распадающегося перовскита. Параметры *a* и *c* перовскитовой структуры силикат-антимоната стронция очень близки к параметрам *c* и *b* карбоната стронция. Более того, рассмотрение мотивов расположения атомов в соответствующих сечениях этих структур показывает близкое соответствие расположений атомов стронция в плоскостях (100) перовскита и (001) карбоната стронция. В обоих сечениях можно выделить прямоугольники из атомов стронция. Близкое соответствие структур объясняет быстрое образование кристаллического карбоната стронция на поверхности кристаллов перовскитовой фазы. Также в докладе приводятся результаты исследования карбонизации и распада методами РЭМ и АСМ.

Формирование массивов ферромагнитных нанонитей в тонких матрицах анодного оксида

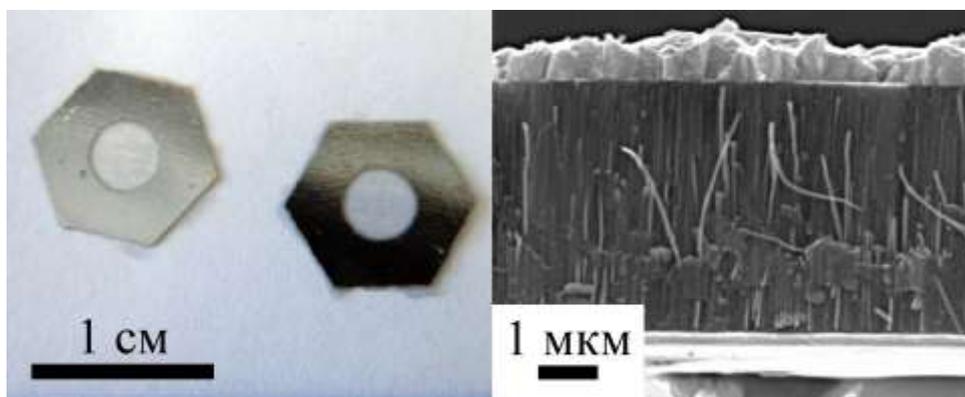
А. П. Леонтьев, О. А. Брылёв, К. С. Напольский

Московский государственный университет, Москва, Россия

Анизотропные наноструктуры из ферромагнитных материалов находят множество применений в различных областях науки и техники. Для их получения широко применяется темплатный метод с использованием пленок анодного оксида алюминия (АОА) в качестве матрицы. Важной задачей является достижение близкой к 100 % степени заполнения пор внедряемым веществом, что возможно при использовании тонких матриц, не содержащих двоящихся каналов.

Целью работы является разработка метода получения массива нанонитей кобальта в тонкой матрице АОА (с толщиной около 5 мкм) с максимальным количеством нитей, достигших поверхности.

Пленки АОА получали методом двухстадийного анодирования алюминия в 0,3 М $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ при напряжении 40 В с кулонометрическим контролем толщины на второй стадии. Далее методом фотолитографии оксидную пленку большой площади разделяли на единичные элементы, представляющие собой шестиугольную алюминиевую основу размером $\sim 1 \text{ см}^2$ с круглым отверстием в центре диаметром 4 мм со слоем оксида на поверхности (рис.). Такая техника позволяет работать с очень тонкими плёнками анодного оксида алюминия и получать сразу несколько образцов за один технологический цикл. Для того чтобы матрицы имели идентичное распределение пор по диаметру, использовали метод контролируемого травления барьерного слоя. В результате были получены матрицы со схожими параметрами (диаметр пор $50 \pm 3 \text{ нм}$, расстояние между центрами пор $100 \pm 5 \text{ нм}$), которые служили матрицами для осаждения кобальта. Электрокристаллизацию Со проводили из электролита, содержащего 0,3 М CoSO_4 и 0,2 М H_3BO_3 , при потенциале $-0,8 \text{ В}$ отн. Ag/AgCl . Данные растровой электронной микроскопии для нанокompозитов АОА/Со свидетельствуют о высокой степени заполнения каналов металлом (рис.).



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-13-00809).

Фазообразование в системе $\text{BaCO}_3\text{--PbO--Fe}_2\text{O}_3\text{--Nb}_2\text{O}_5$

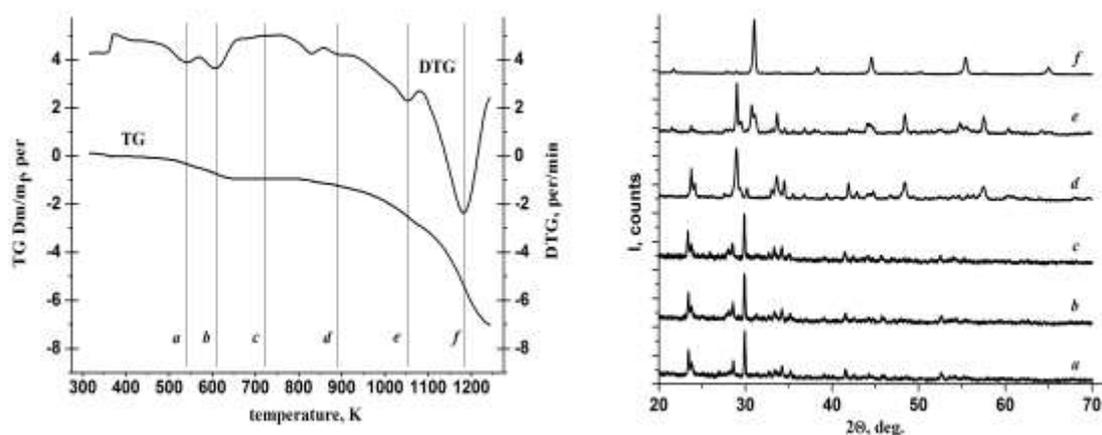
Ю. А. Луницкая, Д. А. Калганов, К. В. Абдрахманова

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Поиск новых материалов, обладающих одновременно электрическими и магнитными свойствами (мультиферроиков), является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния. Такие соединения могут быть получены в системе $x\text{BaCO}_3\text{--}(1-x)\text{PbO--Fe}_2\text{O}_3\text{--Nb}_2\text{O}_5$ путем твердофазной реакции.

Смеси готовили с различным мольным соотношением исходных реагентов системы – оксидов свинца, железа, ниобия, а также карбоната бария – в интервале изменения ($0 \leq x \leq 1,0$) и подвергали высокотемпературной выдержке на воздухе ($T = 1\,373\text{ K}$) до установления постоянной массы образцов. Состав продуктов синтеза определяли методами дериватографии. Фазовый состав контролировали методом рентгеновского анализа на дифрактометре Дрон-3 (CuK α).

Из данных термогравиметрического и рентгеновского анализа следует, что процесс термолитиза имеет сложный характер, протекает в 6 стадий и характеризуется низкотемпературной (300–680 K) и высокотемпературной (700–1 150 K) областями. Так, на дифрактограммах образцов, соответствующих низкотемпературным выдержкам 543, 603, 723 K, фиксируются максимумы, указывающие на образование промежуточных метастабильных фаз (BaNb_2O_6 и BaFe_2O_4) различной симметрии (рис.). Увеличение температуры синтеза приводит к изменению фазового состава системы и образованию ряда оксидных соединений, изоморфных пироклору, о чем свидетельствуют рентгенограммы образцов высокотемпературных выдержек 893, 1 063 и 1 179 K (рис.). Дальнейшее возрастание температуры до 1 373 K приводит к образованию фаз состава $\text{Ba}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Fe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 1,0$) со структурой перовскита кубической симметрии.



Кроме того, в докладе обсуждается модель заполнения ионов по правильной системе точек пространственной группы симметрии $R\bar{3}m$, а также электрические и магнитные свойства полученных соединений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-07-00462.

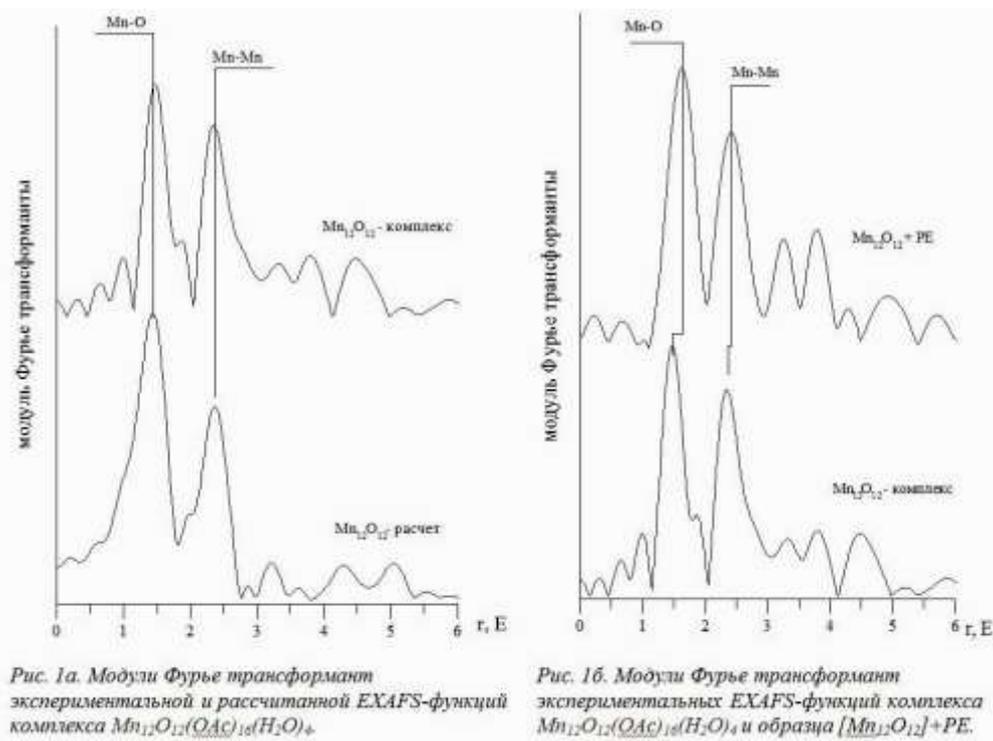
Пятаков А. П., Звездин А. К. Магнитоэлектрические материалы и мультиферроики // УФН 182 593–620 (2012).

Атомное строение полимерного нанокластерного материала $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$

А. В. Максимова, В. Г. Власенко, А. В. Козинкин

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, Россия*

Проведено исследование локального атомного строения нанокластерного полимерного материала $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}] + \text{PE}$ на основе ацетатного двенадцатядерного комплекса $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$, внедренного в полиэтиленовую матрицу. Основная задача – установить возможные структурные изменения кластеров марганца в таком материале по сравнению с соответствующими молекулярными кристаллами. Для решения задачи использовался метод рентгеновской спектроскопии поглощения EXAFS (дальняя тонкая структура рентгеновских спектров поглощения).



На рис. 1а приведены модули Фурье-трансформант (МФТ) рассчитанной и экспериментальной EXAFS-функций комплекса $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$. Основным максимумом МФТ при $r = 1,49$ Å соответствует проявлению первой координационной сферы, состоящей из шести атомов кислорода с различными длинами связей: от 1,87 до 1,90 Å. Таким образом, среднее значение радиуса первой координационной сферы примерно равно 1,89 Å. Вторым максимумом МФТ при $r = 2,4$ Å соответствует проявлению второй и третьей координационным сферам, соответствующим связям Mn-Mn, а именно 2,85 и 3,43 Å, соответственно, для второй и третьей координационных сфер.

На рис. 1б представлены МФТ экспериментальных EXAFS-функций образца $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}] + \text{PE}$ и комплекса $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$. Как видно из рисунка, основные особенности МФТ исследуемых образцов совпадают, за исключением смещения первого максимума МФТ образца $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}] + \text{PE}$ в сторону больших r на $0,14 \text{ \AA}$ и уширения как первого, так и второго максимумов МФТ. Таким образом, в образце $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}] + \text{PE}$ локальное атомное окружение ионов Mn близко к таковой в комплексе $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$. Увеличение радиуса первой координационной сферы в образце $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}] + \text{PE}$ по сравнению с комплексом связано, по-видимому, с увеличением среднего значения расстояния Mn-O/C за счет взаимодействия поверхностных атомов Mn с полимерной матрицей. Атомное строение кластеров марганца в полимерном материале близко к таковому в комплексе $\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{OAc})_{16}(\text{H}_2\text{O})_4$ с учетом влияния полимера полиэтилена.

Предварительные результаты геохимических исследований рыхлых отложений пещеры-рудника Кан-и-Гут в предгорьях Туркестанского хребта (Кыргызстан) методом РФА СИ

Ю. Н. Маркова¹, Е. П. Базарова², К. В. Золотарев³, Я. В. Ракиун³

¹ *Институт геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН, Иркутск, Россия*

² *Институт земной коры СО РАН, Иркутск, Россия*

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

Кан-и-Гут (Рудник Погибели) является одной из наиболее известных пещер Средней Азии, что объясняется ее смешанным происхождением – это естественная карстовая полость, совмещенная с множеством искусственных горных выработок. Данная пещера расположена в предгорьях Туркестанского хребта, к югу от Ферганской долины, неподалеку от оазиса Шадымир в Баткенском районе Ошской области Кыргызстана.

Несмотря на достаточно обширный список публикаций, посвященных Кан-и-Гуту [1], исследователями весьма мало внимания уделялось вторичным отложениям пещеры. Целью данной работы является приведение сведений о химическом составе рыхлых отложений, которые в данной пещере являются в основном продуктами выветривания вмещающих пород. Сопоставление состава разных типов пещерных отложений с составом вмещающих пород дает сведения о малоизученных процессах миграции химических элементов в карстовых полостях с их специфическими и способными в течение долгого времени оставаться неизменными условиями.

Рентгенофлуоресцентный анализ с применением синхротронного излучения (РФА СИ) был выполнен в ЦКП «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения» (Институт ядерной физики СО РАН). Было проанализировано 9 образцов пещерных отложений. Пробоподготовка заключалась в прессовании 30 мг образца в таблетку диаметром 5 мм на ручном прессе с использованием пресс-формы. Перед измерением таблетку упаковывали в полиуретановое кольцо между двумя слоями полиэтиленовой пленки толщиной 5 мкм и помещали в камеру для образцов. Измерения проводились на энергии возбуждения 26 кэВ. Время экспозиции каждого образца составляло 300 с. Расчет значения содержания для каждого элемента производился методом внешнего стандарта.

Было определено содержание К, Са, Ti, V, Mn, Fe, Cu, Zn, Ga, As, Br, Rb, Sr, Y, Zr, Mo, Ag.

Основные результаты представлены в докладе.

1. *Филиппов А.Г., Цибанов В.В.* Наброски к истории исследования пещеры-рудника Кан-и-Гут // Спелеология и спелестология. Сб. материалов III Международной научной заочной конференции. Набережные Челны: НИСПТР, 2012. С. 43–49.

Влияние размола на структуру образца, содержащего однослойные углеродные нанотрубки

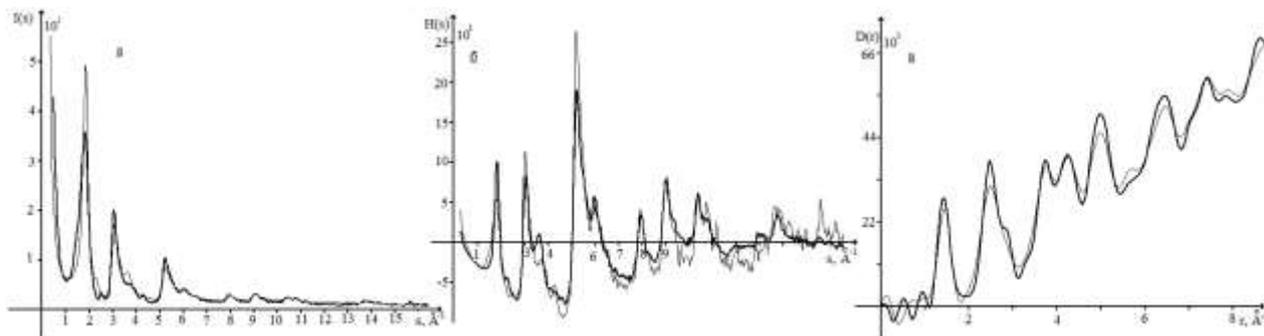
А. Н. Матвеева, Д. В. Логинов

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Целью работы было изучить влияние размола на структуру образца, содержащего однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ). Размол образца проводился в течение часа на Fritsch PULVERISETTE 7 premium line (материал ступки и шаров – малахит, диаметр шаров 10 мм) в воздушной среде.

Исходный и размолотый образцы были подвергнуты прессованию в плоскопараллельную пластинку (давление составляло 100 бар). Рентгенографирование образцов проводилось на автоматизированном дифрактометре ДРОН-6 в Mo-K_α -излучении.

Зависимости интенсивностей от угла рассеяния $I(2\theta)$, были перестроены в масштабе $I(s)$ (где s – длина дифракционного вектора), исправлены на поглощение, поляризацию, переведены в электронные единицы (эл. ед.) и исправлены на комптоновское рассеяние. Из кривой $I(s)$ были рассчитаны интерференционные функции $H(s)$ и функции парного взаимодействия $D(r)$ (рис.).



Кривые распределения интенсивности рассеяния $I(s)$ (а);
 s -взвешенной интерференционной функции $H(s)$ (б); парных функций $D(r)$ (в).
Исходный образец — ; размолотый образец —

На кривой $I(s)$ размолотого образца первый максимум ($s = 1,78 \text{ \AA}^{-1}$) менее размытый и более интенсивный, что может свидетельствовать об увеличении в образце осколков УНТ-параллельных друг другу.

Расчет характеристик ближнего порядка показал, что второе координационное число возрастает на 1,3 ат., четвертое координационное число на 1,5 ат., а третье координационное число уменьшается на 1,3 ат. по сравнению с соответствующими значениями для неразмолотого образца.

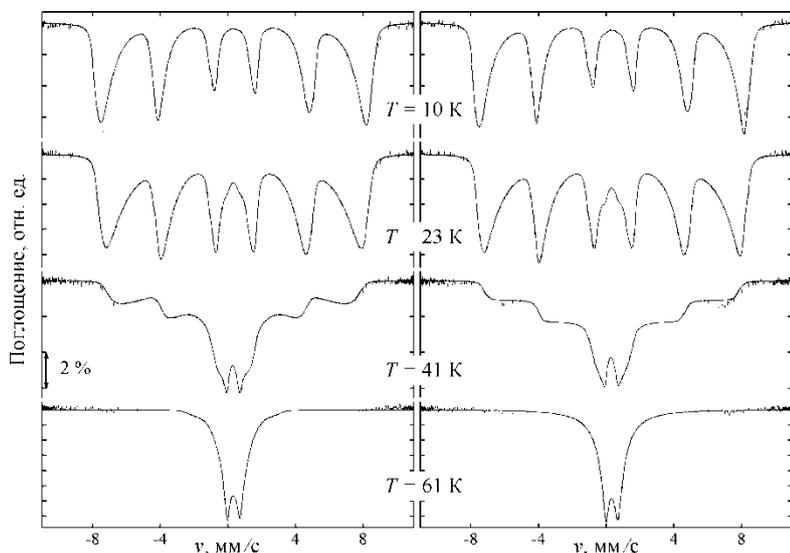
Таким образом, при механическом воздействии на образец может происходить разрушение ОУНТ.

Квантово-механическая и континуальная модели магнитной динамики антиферромагнитных частиц в свете мессбауэровского эксперимента

И. Н. Мищенко, М. А. Чуев

Физико-технологический институт РАН, Москва, Россия

Настоящая работа посвящена исследованию магнитного упорядочения в наночастицах на основе трехвалентного оксида железа методом гамма-резонансной спектроскопии. Часто, вне зависимости от магнитной природы образцов, температурная эволюция мессбауэровских спектров носит универсальный характер и удовлетворительно описывается в рамках многоуровневой релаксационной модели магнитной динамики [1], по своей сути применимой лишь к ферромагнитным частицам. В то же время в экспериментах наблюдается и принципиально иное поведение кривых резонансного поглощения антиферромагнитных наночастиц, основная черта которого заключается в появлении и нарастании с температурой центрального пика (либо квадрупольного дублета линий) на фоне слабо меняющейся разрешенной магнитной структуры. Для объяснения такой картины недавно были предложены реалистичные подходы как на основании квантово-механического рассмотрения антиферромагнитных частиц с равными [2] и различными [3] спинами магнитных подрешеток, так и на базе непрерывного (классического) описания [4].



Экспериментальные мессбауэровские спектры* (вертикальные штрихи) наночастиц Fe_2O_3 при разных температурах и теоретические спектры (сплошные линии), рассчитанные в квантово-механической модели термодинамики (слева) и континуальной модели магнитной динамики (справа) антиферромагнитных частиц.

* Данные предоставлены проф. Литтерстом и д-ром Кракеном, Технический университет Брауншвейга

1. D. H. Jones, K. K. P. Srivastava. Phys. Rev. B. 34 (1986).
2. М.А. Чуев. Письма в ЖЭТФ. 95 (2012).
3. М.А. Чуев. Доклады АН. 447 (2012).
4. М.А. Чуев. Письма в ЖЭТФ. 99 (2014).

Влияние постоянного магнитного поля на параметры магнитопластического эффекта в алюминиевом сплаве Д16ч

А. В. Покоев, М. С. Морозов, Ю. В. Осинская

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Имеющиеся авторские экспериментальные данные и основанные на них качественные модели механизмов влияния магнитных полей на процессы старения медно-бериллиевых сплавов [1, 2] стимулируют постановку новых экспериментов по обнаружению магнитопластического эффекта (МПЭ) и сопутствующих ему магниточувствительных свойств в других металлических сплавах. Одним из наиболее интересных объектов исследований в этом плане является семейство алюминиевых сплавов, в которых эффект дисперсионного твердения при старении является классическим, а практическое значение эффекта является просто бесценным. В данной работе представлены основные результаты исследования влияния постоянного магнитного поля на процессы искусственного старения и свойства алюминиевого сплава Д16ч.

Методами металлографии, микротвердости, гидростатического взвешивания и рентгеноструктурного анализа получены новые данные по влиянию магнитного поля напряженностью 5 кЭ на средний размер зерна, микротвердость, параметр решетки остаточной матрицы, величины относительной микродеформаций, среднего размера блоков когерентного рассеяния и плотность дислокаций алюминиевого сплава Д16ч в зависимости от времен старения от 2 до 12 ч при температуре 190 °С. Получены аналогичные предварительные данные по алюминиевым сплавам Д16, В95пч и АК9.

Обсуждаются возможные физические механизмы МПЭ в металлических сплавах, составы и режимы старения, определяющие оптимальные физико-механические свойства сплавов.

1. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. ФХОМ **3**, 18 (2003).
2. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. Известия РАН. Серия физическая **77**, 1256 (2013).

Одномерные фотонные кристаллы на основе анодного оксида алюминия

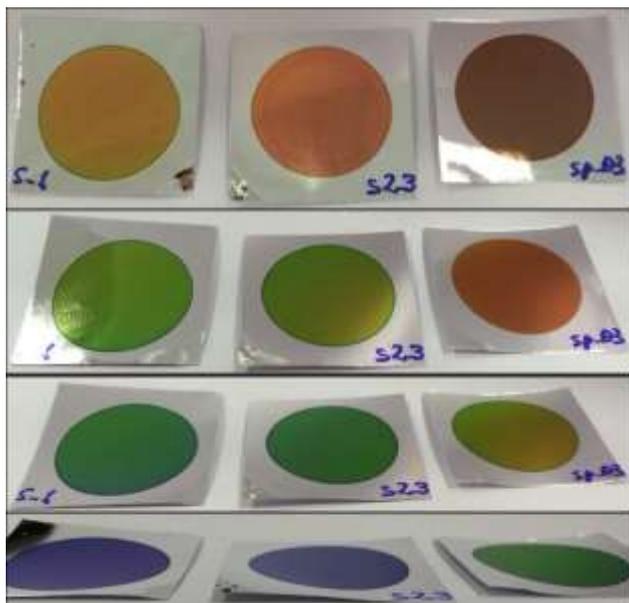
*К. С. Напольский¹, О. С. Воронин¹, С. О. Климонский¹,
В. С. Горелик², А. А. Елисеев¹*

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

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

Создание фотонных кристаллов на основе анодного оксида алюминия перспективно в связи с возможностью воспроизводимого получения фотоннокристаллических покрытий без применения дорогостоящих методик. Целью данной работы является разработка метода формирования одномерных фотонных кристаллов с ярко выраженной стоп-зоной в видимой области спектра.

Фотонные кристаллы были получены методом импульсного анодного окисления высокочистого алюминия (99,99 %, толщина 100 мкм) при периодическом изменении плотности тока [1]. В качестве электролита использовали водный раствор H_2SO_4 1,1 М. В некоторых экспериментах для понижения температуры замерзания электролита в его состав добавляли этиловый спирт. Внешний вид полученных образцов представлен на рис.



Фотография одномерных фотонных кристаллов на основе пористых пленок анодного оксида алюминия. Сверху вниз изменяется угол падения света – от нормального к скользющему

Выявлены основные параметры, влияющие на оптические свойства слоистых пленок анодного оксида алюминия. К ним относятся: отношение напряжений анодирования при разных плотностях тока, протекшие заряды на каждой стадии и их соотношение. Эмпирически установлено, что для создания слоев с различным оптическим контрастом соотношение напряжений должно превышать $\sqrt{2}$. Показано, что при выборе условий импульсного анодирования удобно опираться на стационарные поляризационные кривые. В частности, с их помощью найдены условия анодирования, позволяющие уменьшить продолжительность каждого цикла окисления более чем в 6 раз (1 100–160 с),

что привело к сокращению общей продолжительности экспериментов с 1–2 сут до нескольких ч.

Подбор параметров анодирования позволяет достичь коэффициента отражения в области стоп-зоны более 80 %, при этом положение запрещенной зоны в оптическом спектре определяется зарядом, проходящим при формировании единичных слоев.

На полученных образцах экспериментально наблюдали эффект конверсии: излучение света с длинами волн, соответствующими области стоп-зоны, при облучении образца более высокоэнергетическим излучением.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-08-00838) и правительства РФ (грант Президента РФ МК-7348.2015.8).

1. *Liu Y., Chang Y., Ling Z., Hu X., Li Y.* Structural coloring of aluminum // *Electrochemistry Communications*, 2011, v. 13 (12), pp. 1336–1339.

Влияние постоянного магнитного поля на структуру и свойства $\text{Cu}_{1-x}\text{Be}_x$ -фазы

Ю. В. Осинская, А. В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Известно, что повышение прочностных свойств стареющего сплава связано с взаимодействием дислокаций с фазами, выделяющимися при распаде пересыщенного твердого раствора. В работе [1] установлено, что постоянное магнитное поле (ПМП) напряженностью 7 кЭ увеличивает микротвердость состаренной бериллиевой бронзы БрБ-2 на 30 %, изменяет микроструктуру сплава, при этом размер и количество фазы γ -CuBe различны в образцах, состаренных в ПМП и без него [2]. В связи с этим становится актуальным и практически важным исследовать изменения магнитного и структурного упорядочения непосредственно γ -CuBe-фазы, выделяющейся при старении в ПМП.

Совокупный анализ экспериментальных данных, полученных при наложении ПМП напряженностью от 0 до 7 кЭ на процесс изотермической обработки фазы $\text{Cu}_{1-x}\text{Be}_x$ ($x = 0,43$) при температуре 350 °С длительностью 1 ч, показывает, что наблюдается «положительный» магнитопластический эффект (МПЭ), приводящий к уменьшению микротвердости до 6 %. Методом металлографии установлено, что закалка $\text{Cu}_{1-x}\text{Be}_x$ -фазы приводит к уменьшению среднего размера зерна почти в 1,5 раза по сравнению с исходным состоянием. Однако при наложении ПМП и в его отсутствии микроструктура и средний размер зерна не претерпевают существенных изменений.

Результаты рентгенофазового анализа показывают, что наложение ПМП приводит к увеличению интенсивности и уменьшению полуширины характеристических линий, соответствующих фазе γ -CuBe, что свидетельствует о формировании более совершенной и однородной структуры фазы.

Полученные результаты стимулируют интерес к привлечению нейтронных и магнитных методов для изучения магнитного упорядочения в рассматриваемой фазе и его влияния на величину МПЭ.

1. Ю.В. Осинская, А.В. Покоев. ФХОМ. **3**, 18 (2003).
2. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев, В.В. Рунов. ФТТ **52**, 486 (2010).

***In situ* экспериментальное и теоретическое исследование продуктов разложения борогидрида марганца $Mn(BH_4)_2$**

И. А. Панкин¹, А. А. Гуда¹, В. П. Дмитриев², А. В. Солдатов¹

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

² European Synchrotron Radiation Facility, SNBL, Grenoble, France

Благодаря уникальным термодинамическим свойствам и возможности адсорбировать и выделять водород при относительно низких температурах и давлениях, борогидрид марганца $Mn(BH_4)_2$ зарекомендовал себя как перспективный материал для использования в качестве твердотельных систем хранения водорода.

В настоящем исследовании представлены результаты экспериментального и теоретического исследования фазового перехода, наблюдаемого при нагревании образца. Анализ продуктов реакции термического разложения $Mn(BH_4)_2$ позволит внести ясность в установление причин и механизмов фазового перехода, что в свою очередь необходимо для улучшения цикличности реакции заряда / разряда.

Порошок борогидрида марганца $Mn(BH_4)_2$ нагревался в атмосфере водорода и вакууме. По данным термогравиметрического анализа (TGA) при полной десорбции материал способен выделять до 9–10 мас. % водорода [2]. Однако при полной десорбции реакция термического разложения становится необратимой. Дальний порядок в структуре контролировался в режиме *in situ* с помощью рентгеновской дифракции, а ближний порядок – методом спектроскопии рентгеновского поглощения (рис. 1) за *K*-краем марганца (XANES Mn *K*-edge). При повышении температуры выше 120 °С в вакууме дифракционная картина пропадала (рис. 2) и происходил фазовый переход, сопровождающийся аморфизацией образца и обильным выделением водорода. В связи с чем в качестве основной спектроскопической методики была выбрана спектроскопия поглощения XANES. Этот метод чувствителен не только к зарядовому состоянию поглощающего атома, но и к изменениям в локальной атомной структуре. Стандартная схема разложения $Mn(BH_4)_2$ предполагает выделение водорода, образование металлической фазы марганца и бора [3]. Однако анализ и теоретическое моделирование спектров поглощения показали, что разложение $Mn(BH_4)_2$ происходит преимущественно с образованием боридов марганца. Результаты геометрической оптимизации подтверждают предсказания полуэмпирического правила Натоли [4] и свидетельствуют об уменьшении межатомных расстояний Mn-B на 12–15 %.

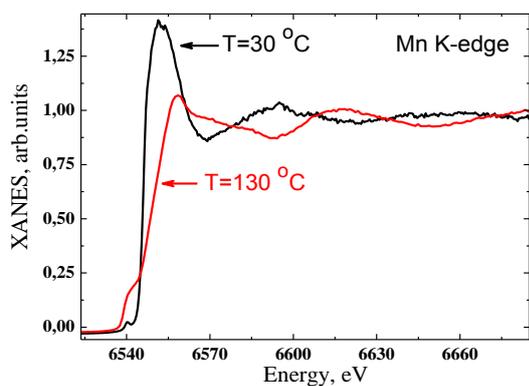


Рис. 1. Изменения в спектрах поглощения XANES за К-краем Mn в результате нагревания образца

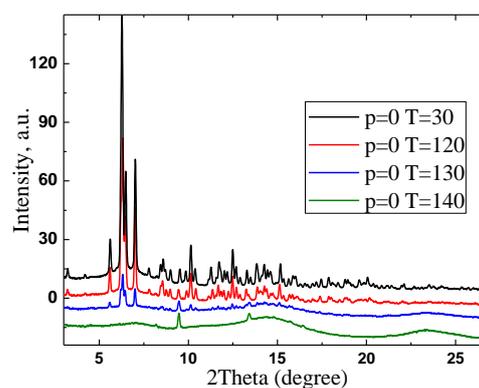


Рис. 2. XRD дифрактограммы до и после нагревания образца до критической температуры

1. *R. Liu, D. Reed, and D. Book.* Journal of Alloys and Compounds 515 (2012) 32.
2. *R. A. Varin, L. Zbroniec, M. Polanski, Y. Filinchuk, and R. Černý.* International Journal of Hydrogen Energy 37 (2012) 16056.
3. *Pabitra Choudhury, Venkat R. Bhethanabotla, and Elias Stefanakos.* J. Phys. Chem. C 2009 113 (2009) 13416.
4. *A. Bianconi, M. Dell Ariccia, A. Gargano, C.R. Natoli* //Bond Length Determination Using XANES. EXAFS and Near Edge Structure, Springer Series in Chemical Physics / Eds. Bianconi A., Incoccia A., Stipcich S. Berlin: Springer, 1987. V. 27. P. 57.

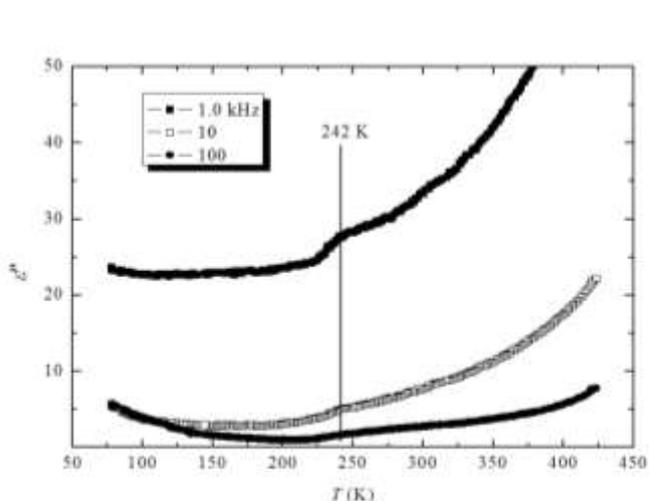
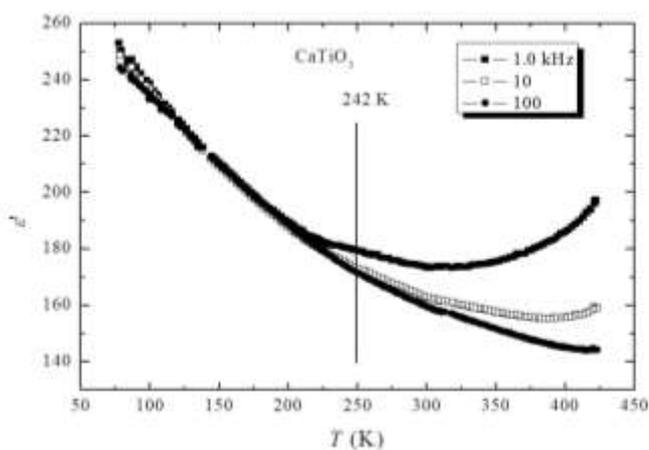
Аномалии диэлектрического отклика природного перовскита в окрестностях 240 К

Ю. А. Панкова^{1,2}, Е. А. Попова^{1,2}, В. Г. Залесский²,
С. Г. Лушников^{1,2}, С. В. Кривовичев¹

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

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

Влияние дефектов, примесей и пр. на динамику решетки является одной из острых проблем в физике конденсированных состояний. В ряде случаев допирование кристалла приводит к появлению дополнительных фаз (как в случае виртуальных сегнетоэлектриков), смещению температуры фазового перехода, появлению новых состояний. К семейству виртуальных сегнетоэлектриков примыкает и перовскит (CaTiO_3). Свойства синтетического соединения хорошо изучены. В номинально чистом кристалле отсутствуют нестабильности решетки ниже комнатных температур. Природные соединения перовскита содержат различные добавки, возникающие в процессе кристаллизации в естественной среде. Таким образом, изучение динамики решетки минерала перовскита дает возможность анализировать влияние примесей на динамику этого модельного соединения.



В данной работе представлены результаты изучения диэлектрических свойств минерала перовскита в низкотемпературной фазе. В качестве объекта исследования выбран монокристалл перовскита (Перовскитовая копь, Южный Урал, Россия) с химическим составом $\text{CaTiO}_3:0,01\text{Fe}$. Исследовались как линейный, так и нелинейный диэлектрический отклик перовскита. Проводились измерения температурной и частотной зависимостей действительной ϵ' и мнимой ϵ'' части комплексной диэлектрической проницаемости ($\epsilon = \epsilon' - i\epsilon''$) и проводимости на постоянном токе. Диэлектрические измерения выполнены при

амплитуде измерительного напряжения 1 В, в диапазоне частот от 12 Гц до 100 кГц, атмосфере сухого азота со скоростью 3 К/мин в диапазоне температур 77–450 К, режиме нагревания или охлаждения. Нелинейный диэлектрический отклик на внешнее электрическое поле измерялся по зависимости тока i от прикладываемого высокого напряжения U амплитудой до 2,5 кВ и частотой $f = 50$ Гц. Анализ данных показал существование аномалий в диэлектрическом отклике в окрестности 240 К, не связанных с возникновением сегнетоэлектрического состояния. Природа наблюдаемых аномалий обсуждается в рамках современных представлений физики фазовых переходов.

Синтез, диагностика и наноразмерная структура квазикристаллических Al-Cu-Fe сплавов

*О. Е. Положенцев, М. А. Брылева, А. Н. Кравцова,
В. К. Кочкина, А. В. Солдатов*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Квазикристаллы – это новый отдельный класс материалов, которые в отличие от традиционных кристаллических структур характеризуются отсутствием трансляционной симметрии. Квазикристаллы интересны как с теоретической, так и экспериментальной точки зрения, обладают уникальными свойствами, что делает их привлекательными для практического применения.

В данной работе разработана методика синтеза квазикристаллов семейства Al-Cu-Fe на основе метода механического сплавления порошков исходных элементов и спекания прессованных форм при температуре 800 °С. Синтезированы квазикристаллы состава $Al_{65}Cu_{23}Fe_{12}$, кристаллы-прекурсоры $Al_{70}Cu_{20}Fe_{10}$ и образцы сравнения составов Al_xFe_y , Al_xCu_y , Cu_xFe_y . Проведена комплексная диагностика синтезированных квазикристаллов состава $Al_{65}Cu_{23}Fe_{12}$, кристаллов-прекурсоров $Al_{70}Cu_{20}Fe_{10}$, образцов сравнения на основе методов SEM, XRD, XANES, XPS, IR.

На основе анализа экспериментальных данных (SEM, XRD, XANES, XPS, IR) и теоретического моделирования структуры квазикристаллов получены данные о локальной атомной структуре окружения атомов меди и железа в квазикристаллах семейства Al-Fe-Cu, о процессе формирования квазикристаллической структуры на основе структурного перехода «кристалл – квазикристалл», и на основе теоретических расчетов по полученной модели атомной структуры квазикристаллов рассчитана электронная структура квазикристаллов. Построена модель ближайшего окружения железа и меди в квазикристаллах семейства Al-Cu-Fe состава $Al_{65}Cu_{23}Fe_{12}$. Определены межатомные расстояния и углы связи. Проведен анализ полных и парциальных плотностей электронных состояний ниже и выше уровня Ферми для структуры квазикристалла.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-02-31514 мол_а.

Исследование деформации монокристалла титаната стронция вследствие обратного флексоэлектрического эффекта

Е. Д. Румянцева, В. Г. Залесский

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

Взаимосвязь градиента деформации и электрической поляризации диэлектрического кристалла носит название флексоэлектрического эффекта (ФЭ) [1]. Отклик неоднородной деформации на внешнее электрическое поле по аналогии с пьезоэффектом назван обратным ФЭ-эффектом и определяется тензором четвертого ранга

$$v_{kij} = \frac{\partial \left(\frac{\partial r_{kl}}{\partial x_i} \right)}{\partial E_j},$$

где dr_{kl}/dx_i – градиент деформации; E_j – компонента электрического поля.

Нахождение значений ФЭ-коэффициентов и их зависимости от диэлектрических свойств и термодинамических параметров является основной задачей в этой области. Впервые экспериментально ФЭ-эффект был изучен на тонких пластинах титаната бария [2]. Согласно [2] ФЭ-коэффициент в титанате бария может быть примерно оценен $v_{1133} = 1 \cdot 10^{-7} \text{ В}^{-1}$ при $E = 20 \text{ кВ/см}$.

Титанат стронция (ST) для исследования ФЭ-эффекта представляет особый интерес, поскольку не является пьезоэлектриком и имеет достаточно большую диэлектрическую проницаемость (~ 300). Задача заключалась в определении характера деформации при поляризации тонких пластин: 2d-деформация изгиба пластин или 3d-деформация прогиба, оценки величины обратного ФЭ-тензора и зависимости его от температуры.

В эксперименте использовались пластины ST толщиной 100–500 мкм, вырезанные вдоль направления (001) с серебряными зеркалами-электродами. Для определения деформации были использованы: интерференционный микроскоп, который позволил оценивать величину смещения до 10 нм, и лазерная гониометрическая установка по измерению радиуса кривизны поверхности с точностью до 100 м.

Измерения показали, что при комнатной температуре в ST наблюдается обратный ФЭ-эффект, на порядок меньший, чем в титанате бария. Установлено, что наблюдается не 3d-деформация прогиба, а неоднородная 2d-деформация изгиба кристаллических пластин. Эффект происходит начиная с порогового поля 17–20 кВ/см, а в поле выше 50 кВ/см выходит в насыщение. По зависимости величины изгиба от прикладываемого однородного поля оценен тензор $v_{1133} = 1 \cdot 10^{-8} \text{ В}^{-1}$. С уменьшением температуры в интервале 130–300 К эффект возрастает в 6–7 раз, и имеется аномалия в области структурного фазового перехода ST 105–130 К.

1. Zubko P., Catalan G., and Tagantsev A. Flexoelectric Effect in Solids, Annual Review of Materials Research, 43, 387–421, 2013.
2. Бурсиан Э. В., Зайковский О. И., Макаров К. В. Поляризация сегнетоэлектрической пластины изгибом, Изв. АН СССР. Сер. физ. 33, 1098–1101, 1969.
3. Залесский В. Г., Румянцева Е. Д. Обратный флексоэлектрический эффект в монокристалле SrTiO₃. Физика твердого тела. 56, 1301–1303, 2014.

Структурные преобразования протонированного полтитаната калия, модифицированного солями меди

С. И. Саунина¹, Ш. Ш. Ягафаров¹, Е. В. Третьяченко², А. В. Гороховский²

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

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

Слоистые частицы полтитанатов калия обладают высокой способностью к интеркаляции, поэтому они являются перспективными объектами для создания новых композиционных материалов.

Целью данной работы было исследование фазового состава протонированного полтитаната калия (ПТКП), модифицированного в растворе CuSO_4 в зависимости от температуры обработки. Содержание меди в конечных продуктах в пересчете на оксид составило 1,34 и 5,5 масс. %.

Исследование фазового состава образцов, обработанных в течение двух часов при 650, 850 и 1 100 °С, проводилось методами рентгенофазового анализа с использованием Cu-K_α -излучения и электронной сканирующей микроскопии. Скорость нагрева образцов до заданной температуры составила ~ 21 град./мин.

На рентгенограммах всех исходных образцов в области углов ~ 27,5° обнаруживается 100 % линия рутила, а в области углов ~ 30 и 48° наблюдаются широкие дифракционные максимумы, которые, по-видимому, формируются нанодисперсными полтитанатами калия. После термообработки при 650 °С в образце ПТКП, не содержащем добавок, появляется новая фаза анатаз и формируются достаточно крупные кристаллы $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ и $\text{K}_2\text{Ti}_8\text{O}_{17}$. В образце, содержащем добавку оксида меди ~ 1,34 масс. %, обнаруживаются фазы анатаз, рутил и $\text{K}_2\text{Ti}_2\text{O}_5$. В образце с содержанием оксида меди ~ 5,5 масс. %, кроме фаз рутил и анатаз, образуется $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$.

После термообработки при 850 °С в образцах без добавок и с содержанием оксида меди ~ 1,34 масс. % присутствуют анатаз, рутил и $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$. При увеличении содержания в образце добавки до ~ 5,5 масс. % формируются фазы анатаз, рутил и $\text{KTi}_8\text{O}_{16}$, однако содержание последней невелико.

После термообработки при 1 100 °С на рентгенограммах всех образцов дифракционные максимумы, характерные фазе анатаз, отсутствуют. В образце без добавок присутствуют фазы рутил и $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$. В образце с содержанием CuO ~ 1,34 масс. % формируются фазы рутил, $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ и $\text{KTi}_8\text{O}_{16}$. В образце, содержащем ~ 5,5 масс. % CuO , обнаруживаются фазы рутил и $\text{KTi}_8\text{O}_{16}$.

Микроструктура, фазовый анализ и диэлектрический отклик пленок PZT в области морфотропной фазовой границы

С. В. Сенкевич

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

Тонкие пленки цирконата-титаната свинца ($\text{PbZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$, или PZT) являются базовыми сегнетоэлектрическими материалами для использования в микроэлектромеханических преобразователях (MEMS). Повышение эффективности MEMS-устройств связывают с использованием тонких пленок составов PZT, соответствующих области морфотропной фазовой границы, где диэлектрические и электромеханические характеристики достигают максимума. В последние годы были высказаны предположения, что большие диэлектрические и электромеханические (пьезоэлектрические) отклики могут быть связаны с наличием высокой плотности сегнетоэлектрических доменов [1] или существованием моноклинной модификации сегнетоэлектрической фазы в области морфотропной фазовой границы [2]. В настоящей работе для выявления присутствия моноклинной фазы исследовались тонкие пленки PZT, полученные ВЧ магнетронным распылением керамической мишени состава $x = 0,46$ при варьировании расстояния от мишени до подложки и изменении давления рабочего газа в распылительной камере. Пленки отжигались на воздухе в диапазоне температур 550–650 °С. В качестве подложки использовалась платинированная пластина кремния Pt/TiO₂/SiO₂/Si.

Для определения фазового состояния тонких пленок использовалась оптическая микроскопия, рентгеноструктурный анализ и дифракция быстрых электронов. Микроструктурные исследования проводились на растровом электронном микроскопе EVO-40, а состав выявлялся с помощью энергодисперсионной приставки INCA. Для измерения диэлектрических свойств (диэлектрическая проницаемость и потери) использовался измеритель иммитанса E7-20.

Фазовый анализ показал, что тонкие пленки характеризуются смесью моноклинной и тетрагональной модификаций сегнетоэлектрической фазы. Варьирование технологических параметров приводило к «тонкому» изменению элементного состава (соотношения атомов Zr и Ti) в пределах 1–2 %. Обсуждается связь изменения состава, фазового состояния тонких пленок с микроструктурой и диэлектрическими свойствами.

1. *Y.L. Wang, Z.B. He, D. Damjanovic, A.K. Tagantsev, G.C. Deng, N. Setter. Unusual Dielectric Behavior and Domain Structure in Rhombohedral Phase of BaTiO₃ Single Crystals // Journal of Applied Physics. 2011. V. 110. 014101.*
2. *B. Noheda, L. Wu, Y. Zhu. Low-Temperature Superlattice in Monoclinic Pb(Zr_{0.52}Ti_{0.48})O₃ // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. 060103(R).*

Тонкопленочные композиты титаната бария-стронция на монокристаллических подложках (001) MgO

Д. В. Стрюков

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

На основе данных рентгендифракционных исследований, проведенных на дифрактометре Ultima IV, исследованы тонкие многослойные пленки с чередованием слоев $Ba_{0,4}Sr_{0,6}TiO_3$ и $Ba_{0,8}Sr_{0,2}TiO_3$, полученные на монокристаллических подложках (001) MgO методом ВЧ катодного распыления.

В настоящей работе получены и в сравнении исследованы две серии пленок, различающиеся порядком напыления слоев:

1. Пленки MgO/BST0.4/BST0.8, в которых первым слоем, напыленным на подложку, являлся BST0.4.

2. Пленки MgO/BST0.8/BST0.4, в которых на подложку первым слоем напылялся BST0.8.

В каждой серии получены многослойные пленки с 1 и 3 парами чередующихся слоев BST0.4 и BST0.8 с равной толщиной слоев

При напылении на подложку первой пары слоев с нижним слоем BST0.8 формируется композит с одиночными рефлексами 001, то есть с одинаковым параметром c для обоих слоев. Значение параметра c решетки первой пары слоев меньше параметров c решетки обоих объемных материалов. Рефлексы 001 в шестислойном образце с тем же нижним слоем расщепляются на три компоненты: дифракционная картина образована как результат отдельного рассеяния каждой из трех пар слоев, причем параметры решетки вышележащих пар больше параметров решетки соответствующих объемных материалов.

При напылении BST0.4 первым слоем на подложку формируются пленки, у которых рефлексы 001 расщепляются на две компоненты независимо от числа слоев. Наблюдаемую структуру рефлексов 001 можно объяснить формированием в таком композите двух фаз различного состава, параметры c решетки каждой из которых одинаковы во всех слоях.

Анализ профильных характеристик рефлексов $hk0$ и hkl , полученных при φ -сканировании, указывает на эпитаксиальный рост «куб-на-кубе»: в пределах экспериментальной погрешности параметры a и b решетки равны друг другу и угол γ между осями $[100]$ и $[010]$ равен 90° .

В результате проведенной обработки профильных данных установлено, что все формирующиеся в них фазы имеют моноклинную ячейку с параметрами $a = b \neq c$; $\gamma = 90^\circ$, $\alpha = \beta < 90^\circ$.

Локальная атомная и электронная структуры наноструктурированных сегнетоэлектрических материалов: компьютерное моделирование и рентгеноспектральная диагностика

*Г. Б. Сухарина, А. А. Гуда, Н. Ю. Смоленцев,
К. Г. Абдудвакхидов, А. В. Солдатов*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Компьютерное моделирование и спектральная диагностика представляют мощный инструмент для исследования свойств наноматериалов [1]. Физико-химические свойства зависят от особенностей локальной атомной и электронной структуры материала. Наноструктурированные сегнетоэлектрические материалы применяются во многих функциональных устройствах как активные элементы. Основными задачами при получении таких материалов является воспроизводимость физических свойств и возможность целенаправленно управлять ими. Одним из возможных способов получать материалы с заданными свойствами является изменение концентрации и типа структурных дефектов, реализуемое методом механоактивации.

В данной работе для исследования наноструктурированной сегнетокерамики использовали совокупность экспериментальных методов: рентгеновская спектроскопия XANES (X-ray absorption Near Edge Structure), рентгеновская дифракция, сканирующая электронная микроскопия, а также многомасштабное компьютерное моделирование. Теоретический анализ экспериментальных данных был выполнен на основе метода полного многократного рассеяния (FEFF) [2] и метода конечных разностей (FDMNES) [3]. Используемый комплексный подход позволяет эффективно определять 3D-структуру наноструктурированных материалов. В работе представлены результаты исследований изменений в локальной атомной структуре скандотанталата свинца после механоактивации.

1. Pohl A.H., Guda A.A., Shapovalov V.V., Witte R., Das B., Scheiba F., Rothe J., Soldatov A.V.
2. Ankudinov A.L., Bouldin C.E., Rehr J.J. Phys. Rev. B. 2002. No 65(10). P. 1041071.
3. Joly Y. Phys. Rev. B. 2001. No 63. P. 125120.

Исследование пространственной локализации атомов водорода в гидридах титана и циркония спектрометрическими и дифракционными методами

*М. С. Сыртанов¹, Н. А. Тимченко¹, В. Н. Кудияров¹,
Я. В. Зубавичус², Е. В. Храмов²*

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

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

Проблема водорода в материалах имеет богатую историю и постоянно находится в центре внимания широкого круга исследователей. Это связано с тем, что при эксплуатации изделий из металлов в водородосодержащих средах (водяной пар, углеводородные соединения) в них проникает водород [1, 2]. В результате происходит охрупчивание материала, что проявляется в возникновении макротрещин и деградации механических характеристик [3].

Однако большой разброс в известных к настоящему времени экспериментальных данных, касающихся динамики накопления водорода, дефектов, им вызванных, не позволяет с достаточной точностью прогнозировать изменения свойств изделий из титана и циркония в процессе их эксплуатации в условиях взаимодействия со средой, содержащей водород. Поэтому существует необходимость получения комплекса экспериментальных данных, связывающих степень насыщения водородом с изменениями в кристаллической и электронной энергетической структурах титана и циркония.

В представляемой работе исследованы образцы технически чистого титана и циркониевого сплава Э110. Дифракционные измерения и измерение XAFS-спектров проводились одновременно в процессе насыщения образцов водородом на станции структурного материаловедения Курчатовского источника синхротронного излучения. Проведено сопоставление полученных данных с соответствующими параметрам теоретических моделей с целью выяснения деталей процессов абсорбции, миграции и пространственной локализации водорода в различных условиях.

1. Титан и титановые сплавы для освоения месторождений нефти и газа на шельфе. Проекты, технологии, оборудование // Сфера Нефтегаз. 2011. № 5. С. 80–82.
2. Неразрушающие методы контроля водородного охрупчивания конструкционных материалов / И. П. Чернов [и др.] // Альтернативная энергетика и экология, 2009. № 2. С. 15–21.
3. Чернов И. П. Методы исследования систем металл-водород / И. П. Чернов, Ю. П. Черданцев, Ю. И. Тюрин. М.: Энергоатомиздат, 2004. 270 с.

***E-T* фазовые диаграммы твердых растворов с участием сегнетоэлектриков-релаксоров**

М. В. Таланов, А.А. Павелко

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, Россия*

Материалы на основе сегнетоэлектриков-релаксоров привлекают внимание как перспективная основа для создания различного рода актюаторов и гидрофонов благодаря гигантским значениям пьезоэлектрических откликов. Приложение внешнего электрического поля (E) приводит к возникновению макроскопической доменной структуры и переходу в нормальное сегнетоэлектрическое состояние. Целью данной работы стало построение фазовой $E-T$ -диаграммы керамик на основе многокомпонентной системы $y\text{PbZn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3 - m\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3\text{PMN} - n\text{PbNi}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3 - x\text{PbTiO}_3$, состава вблизи морфотропной фазовой границы, по результатам измерения реверсивной диэлектрической проницаемости, температурных зависимостей пироэлектрического коэффициента и частоты пьезоэлектрического резонанса.

Установлено, что при одном и том же значении напряженности постоянного электрического поля ($E \approx 4$ кВ/см) наблюдается минимум температур пиков диэлектрической проницаемости, исчезновение гистерезиса на зависимостях температур максимумов пироэлектрического коэффициента от напряженности электрического поля, что свидетельствует о близости к критической точке на $E-T$ фазовой диаграмме, и достижение насыщения максимальных значений пироэлектрического коэффициента твердых растворов в окрестности морфотропной области системы.

В докладе представлено более подробное описание полученных результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая и проектная части гос. задания темы № 213.01-11/2014-21, 213.01-2014/012-ВГ и 3.1246.2014/К) и ФЦП (ГК № 14.575.21.0007).

Магнитные свойства магнитомягких пленок Fe-Zr-N, изготовленных методом магнетронного напыления

*А. О. Титова*¹, *А. С. Семисалова*¹, *Е. В. Харин*², *В. А. Теджетов*²,
*Е. Н. Шефтель*², *Н. С. Перов*¹

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

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

В связи со стремлением к миниатюризации устройств современной микроэлектроники широкое применение нашли нанокристаллические пленки магнитомягких сплавов, принадлежащих по химическому составу к квазибинарным системам Fe-MeX (где Me – Ti, Zr, Hf, Nb, Ta; X – C, N, B или O). В данной работе исследованы пленки Fe-Zr-N, магнитные свойства которых рассмотрены в рамках модели случайной магнитной анизотропии [1, 2]. При размере ферромагнитного зерна $2R_c$ меньше длины обменного взаимодействия R_L , локальная (внутризеренная) эффективная энергия магнитной анизотропии K_{eff} становится подавленной на масштабе R_L , что вызывает образование стохастических магнитных доменов размером $2R_L$, свойства которых определяют поведение материала во внешнем магнитном поле. В итоге наименьшая коэрцитивная сила H_c достижима при уменьшении размера ферромагнитного зерна $2R_c$ до тех пор, пока сохраняется малая локальная анизотропия K_{eff} , высокая доля ферромагнитных зерен с максимально возможной намагниченностью насыщения M_s и высокая обменная энергия A : $H_c \sim K_{eff}^4 (2R_c)^6 / M_s A^3$.

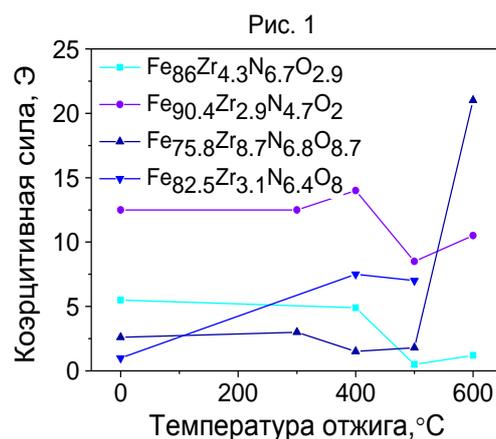
Фазово-структурное состояние пленок оценивали методом РДА. Химический состав определен методом ОЭСТР. Толщины пленок измерены по снимкам поперечных срезов на СЭМ. Магнитные свойства образцов исследованы на вибрационном магнитометре в магнитных полях до 16 кЭ при комнатной температуре.

Основной целью было поставлено снижение коэрцитивной силы, для достижения которой были сформулированы главные задачи: 1) уменьшение размера ферро-магнитного зерна и 2) снижение локальной эффективной энергии магнитной анизотропии. Первая задача решена за счет твердорастворного легирования и дисперсного упрочнения в процессе напыления пленок. Вторая задача решена с помощью вакуумных отжигов при температурах 300, 400, 500 и 600 °С в течение 1 ч. Установлено, что под влиянием отжига при 500 °С достигается наименьшая коэрцитивная сила (рис.).

Поддержано РФ НИИ-6207.2014.3 и РФФИ (15-08-02831, 15-32-21118).

1. G. Herzer. Acta Materialia, 2013, v. 61, p. 718–734.

2. R.S. Iskhakov, S.V. Komogortsev. Physics of Metals and Metallography, 2011, v. 112, p. 666–681.



Структурные особенности, магнитные и резистивные свойства твердых растворов $\text{La}_{0,54}\text{Ho}_{0,11}\text{Sr}_{0,35}\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_{3\pm\delta}$ ($x = 0-0,2$)

М. Л. Краус^{1,2}, В. А. Турченко^{1,3}, Н. Корне⁴, С. Г. Шеврев¹, А. И. Бескровный¹

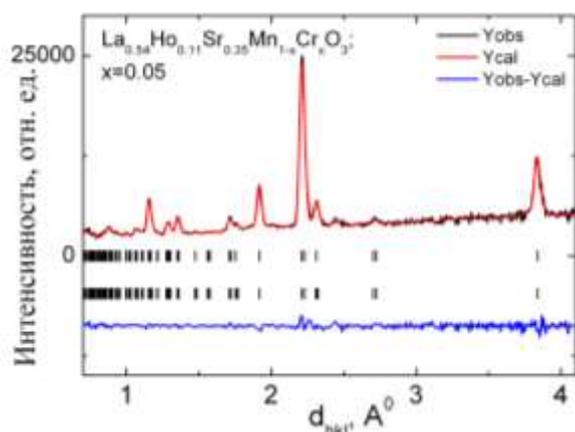
¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Национальный научно-исследовательский институт технической физики, Румыния

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

⁴ Университет имени А. И. Кузы, Румыния

Интерес к исследованию манганит-лантановых перовскитов и твердых растворов на их основе связан с наблюдаемым в области фазовых переходов колоссальным магниторезистивным эффектом [1, 2], что делает перспективным их применение в датчиках тока и магнитных полей, в устройствах хранения и считывания информации. Возможности управления физическими свойствами



посредством замещения ионов в А-подрешетке, посвящено большое число научных работ [3, 4]. Целью данной работы является установление влияния замещения ионов марганца (в В-позициях) ионами хрома на особенности кристаллической и магнитной структуры, магнитные и резистивные свойства. Образцы $\text{La}_{0,54}\text{Ho}_{0,11}\text{Sr}_{0,35}\text{Mn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ были получены методом золь-гель и спечены при 1200°C . Были проведены их

рентгенофазные и рентгеноструктурные исследования на дифрактометре фирмы Philips. Исследования кристаллической и магнитной структур были выполнены методом нейтронной дифракции на установке ДН-2 реактора ИБР-2 (Дубна).

Изменения намагниченности исследуемых образцов проводили на магнетометре. Исследование резистивных и магниторезистивных свойств проводили стандартным 4-контактным методом.

Согласно данным рентгеновской и нейтронной дифракции (рис.) практически все образцы – однофазные, с ромбоэдрически искаженной кристаллической решеткой, соответствующей пространственной группе $R3c$ (№ 167). Объем элементарной ячейки монотонно уменьшается по мере замещения ионов Mn ионами Cr. Установлено изменение молярной намагниченности от величины магнитного поля в процессе нагревания/охлаждения исследуемых образцов. Подобное поведение может быть следствием существования ферромагнитного упорядочения и спин-стекольного состояния. Температура перехода из спин-стекольного состояния в магнитоупорядоченное зависит от химического состава образцов. Изменение резистивных характеристик определяется не только величиной приложенного магнитного поля, но и по аналогии с намагниченностью, от величины

магнитного поля, в котором происходит его нагревание/охлаждение, т. е. концентрация ферромагнитной фазы и спин-стеклового состояния.

1. *M. McCormack, S. Jin, T. H. Tiefel et al.* // *Appl. Phys. Lett.* 1994. V. 64. P. 3045–3048.
2. *Liu Yu-Kuai, Yin Yue-Wei and Li Xiao-Guang* // 2013. *Chin. Phys. B* V. 22. P.087502.
3. *E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo* // *Physics Reports.* 2001. V. 344. P. 1–153.
4. *M. B. Salamon, M. Jaime* // *Rev. Mod. Phys.* 2001. V. 73. P. 583628.

Магнитная анизотропия и доменная структура аморфных пленок TbCo

*В. Уклеев^{1,2}, Р. Моубах^{3,4}, Д. Баранов⁵, С. Гастев⁵, Б. Кричевцов⁵, Н. Кулеш⁶,
Ю. Четвериков¹, Е. Величко¹, С. Григорьев^{1,7}*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

² *Санкт-Петербургский академический университет НОЦ нанотехнологий РАН,
Санкт-Петербург, Россия*

³ *Uppsala University, Department of Physics and Astronomy, Упсала, Швеция*

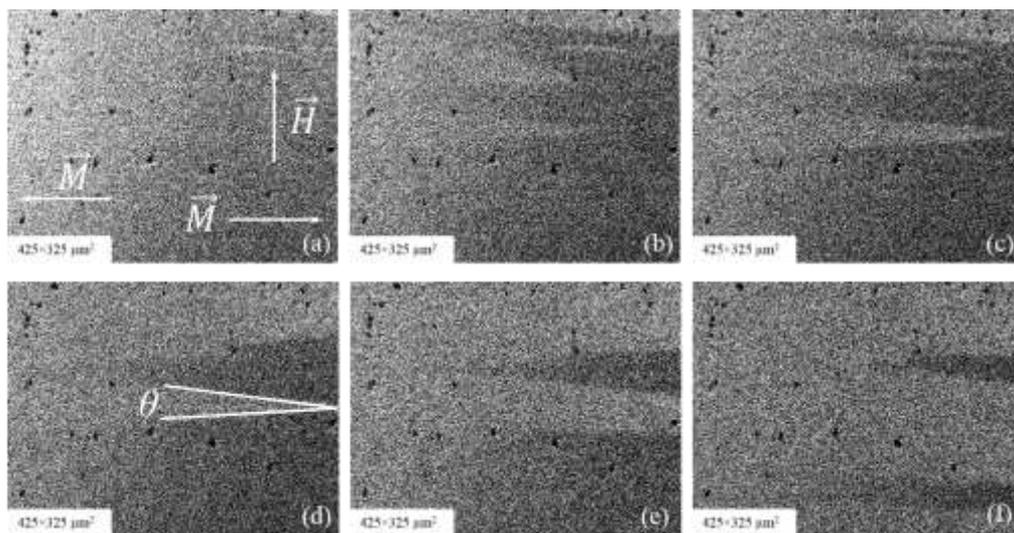
⁴ *Université Hassan II de Casablanca, Касабланка, Марокко*

⁵ *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

⁶ *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

⁷ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

В работе были исследованы магнитные свойства аморфных пленок $Tb_xCo_{(1-x)}$ с наведенной магнитной анизотропией. Пленки выращивались методом магнетронного напыления в присутствии магнитного поля величиной 100 Э. В данной работе представлены результаты магнитооптических исследований пленок толщиной 100 и 500 нм и концентрациями редкоземельного элемента $x = 12\%$ ат. и $x = 34\%$ ат. Все изученные образцы демонстрируют ярко выраженную одноосную магнитную анизотропию в плоскости пленки, совпадающую по направлению с внешним магнитным полем, приложенным в процессе напыления. Коэрцитивные поля у образцов с увеличением концентрации Tb вырастают практически на один порядок. Кроме того, в данных образцах появляется компонента намагниченности вне плоскости пленки. Крупномасштабная магнитная структура пленок TbCo впервые была исследована методом керровской микроскопии. В образцах $Tb_{12}Co_{88}$ наблюдается зигзагообразная доменная структура (рис.).



Зигзагообразная доменная структура аморфной пленки $Tb_{12}Co_{88}$ толщиной $d = 100$ нм в различных магнитных полях $H = 15$ Э (a), 39 Э (b), 50 Э (c), 58 Э (d), 73 Э (e), 116 Э (f), приложенных перпендикулярно оси легкого намагничивания

Угол зигзага зависит от толщины пленки и величины приложенного поля. В то же время крупномасштабных доменов в образцах с концентрацией Тб $x = 34\%$ не обнаружено. Можно заключить, что крупномасштабная доменная структура определяется сочетанием наведенной и локальной анизотропий и различной величиной обменного взаимодействия, зависящих от соотношения концентраций редкоземельного и переходного металлов.

Транспортные свойства сплавов $\text{Cu}_{50-x}\text{Zr}_x$ ($x = 50-66,6$)

*С. А. Упоров, С. Х. Эстемирова, Р. Е. Рыльцев,
Н. М. Щелкачев, Н. С. Упорова*

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Поликристаллические сплавы $\text{Cu}_{50-x}\text{Zr}_x$ ($x = 50, 54, 60$ и $66,6$) были получены методом электродугового сплавления исходных чистых металлов. Структурный и фазовый анализ полученных слитков выполнен с привлечением методов рентгеновской дифракции (дифрактометр Shimadzu XRD-7000, Cu-K_α -излучение). Выявлено, что моноклинные (неравновесные) структуры сосуществуют во всех образцах, кроме состава $\text{Cu}_{33,4}\text{Zr}_{66,6}$. Для последнего характерно однофазное состояние с тетрагональной структурой CuZr_2 . Исследование электропроводности стандартным четырехзондовым методом и констант Холла (Cryogenic VSM CFS-9T-CVTI) в диапазоне температур $T = 4-300$ К показало, что все полученные образцы характеризуются металлической проводимостью, а также демонстрируют аномалию типа Кондо ниже 20 К. Проведенные оценки подвижности электронов, а также решеточных вкладов в проводимость указывают на существование в сплавах сильного структурного беспорядка и множества решеточных дефектов. Анализ температурных зависимостей электропроводности показал, что экспериментальные данные могут быть удовлетворительно описаны в рамках модифицированной модели Блоха – Грюнайзена.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 14-13-00676).

Гигантский магнитокалорический эффект в сплавах Гейслера Ni-Mn-(Co)-In

Р. Р. Файзуллин¹, А. В. Маширов², В. Д. Бучельников¹, М. В. Жуков³

¹ Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

² Институт радиотехники и электроники им В. А. Котельникова РАН, Москва, Россия

³ Российский научно-исследовательский институт трубной промышленности,
Челябинск, Россия

Магнитокалорическим эффектом (МКЭ) принято называть адиабатическое изменение температуры магнетика, индуцированное изменением внешнего магнитного поля. Материалы с большими значениями МКЭ могут быть использованы в технологии магнитного охлаждения [1]. Недавние экспериментальные исследования показали, что сплавы Гейслера Ni-Mn-X (X = Ga, In, Sb) также являются привлекательными для применения в магнитных холодильных установках [2].

В работе экспериментально изучены структурные и магнитные превращения в сплавах Гейслера $Ni_{1,81}Mn_{1,64}In_{0,55}$, $Ni_{1,73}Mn_{1,80}In_{0,47}$ и $Ni_{1,72}Mn_{1,51}In_{0,49}Co_{0,28}$. Во всех сплавах обнаружен метамагнитоструктурный фазовый переход из антиферромагнитной или смешанной ферро-антиферромагнитной мартенситной фазы в ферромагнитную кубическую фазу. Определены температуры данных переходов в малых полях и в магнитном поле 3 Тл, а также скрытая теплота структурных превращений. Прямым методом по различным протоколам измерен магнитокалорический эффект [3]. Вблизи метамагнитоструктурных фазовых переходов, величина МКЭ сильно зависит от режимов нагрева (охлаждения) сплавов и от режимов изменения магнитного поля. Максимальные значения МКЭ наблюдаются вблизи метамагнитоструктурных фазовых переходов. Максимальный эффект в сплаве $Ni_{1,81}Mn_{1,64}In_{0,55}$ при температуре $T = 229,9$ К составил $-3,72$ К при изменении магнитного поля от 0 до 2 Тл. Для сплавов $Ni_{1,73}Mn_{1,80}In_{0,47}$ и $Ni_{1,72}Mn_{1,51}In_{0,49}Co_{0,28}$ максимальные значения МКЭ имеют несколько меньшую величину. Для сплава $Ni_{1,73}Mn_{1,80}In_{0,47}$ наибольшее значение $\Delta T_{ad} = -2,1$ К наблюдается при температуре $T = 291,7$ К. Для сплава $Ni_{1,72}Mn_{1,51}In_{0,49}Co_{0,28}$ максимальная величина МКЭ зарегистрирована при температуре $T = 311$ К и составила $\Delta T_{ad} = -2,36$ К.

Эта работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-12-00570 (измерения МКЭ) и гранта министерства образования и науки РФ № 3.2021.2014 / К (измерения намагниченности).

1. Gschneidner K. Jr., Pecharsky V.K. // Int. J. Refrig. 2008. V. 31. P. 945.
2. Pecharsky V.K., Horn A.P., Gschneidner K.A. Jr., Rink R. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 197204/1.
3. Basso V., Sasso C.P., Skokov K. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 014430.

Ионопроводящие материалы на основе церата бария, допированного редкоземельными металлами

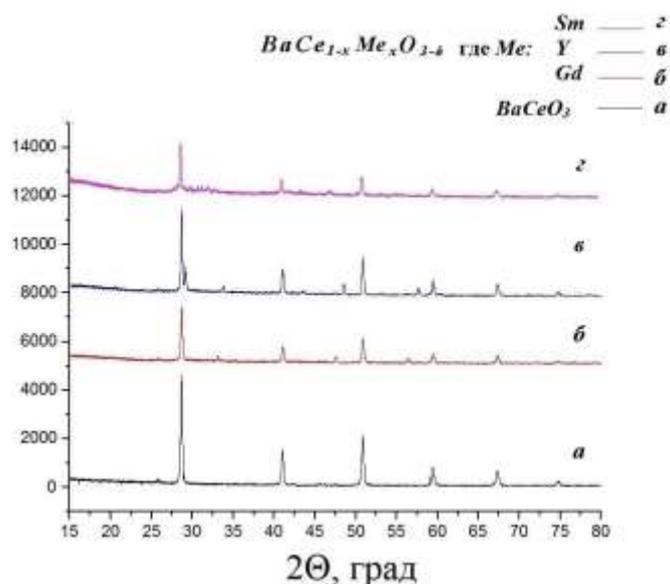
Е. М. Филоненко, Ю. А. Луницкая

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Сложные оксиды семейства ABO_3 , имеющие структуру типа перовскита (пространственной группы симметрии $Pm\bar{3}m$), являются перспективными функциональными материалами, обладающими ионопроводящими и ионообменными свойствами [1]. Особый интерес представляют соединения на основе церата бария с большой разупорядоченностью катионной и анионной подрешеток, носителями заряда в которых являются ионы редкоземельных металлов и анионы кислорода [2]. Получить такие материалы можно путем твердофазного синтеза, а также цитрат-нитратным методом [3] в системе $BaCO_3 - CeO_2 - Me_2O_3$ ($Me = Gd^{3+}, Y^{3+}, Sm^{3+}$) при нагревании.

Фазовый состав продуктов синтеза контролировали методом рентгеновского анализа на дифрактометре D8 ADVANCE (Bruker, Германия). Методом Ритвельда проведено уточнение фазового состава образцов на основе церата бария. Измерения ионной проводимости на переменном токе осуществляли с помощью измерителя RLC Актacom АМ-3028 при частоте 10^5 Гц.

Из данных термогравиметрического и рентгеновского анализа следует, что в данной оксидной системе при температуре синтеза 1373 К образуются твердые растворы $BaCe_{1-x}Me_xO_{3-\delta}$, кристаллизующиеся в рамках структуры типа перовскита $Pm\bar{3}m$ (рис.).



Рентгеновские дифрактограммы фаз состава $BaCe_{1-x}Me_xO_{3-\delta}$, полученные при температуре 1373 К

Сравнение проводимости BaCeO_3 и фаз, допированных ионами гадолиния, иттрия и самария, показывает, что наибольшая величина проводимости и наименьшая энергия активации наблюдаются для фазы, содержащей ионы гадолиния $\text{BaCe}_{0,9}\text{Gd}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$.

1. *Medvedev D., Murashkina A. et al.* Progress in Materials Science. **60**, 72–129 (2013).
2. *Кузьмин А.В., Горелов В.П., Ваганов Е.Г. и др.* Фазовые переходы, термодесорбция газов электропроводность BaCeO_3 – базового соединения для высокотемпературных протонных проводников. Электрохимия. Т. 41, № 5, С. 620–626 (2005).
3. *Михайлов М.Д., Семенча А.В., Колесников И.Е. и др.* Синтез и исследование структуры наночастиц оксидов Y_2O_3 :Eu. Современные проблемы науки и образования. № 2 (2012).

Морфология и оптические свойства самоорганизующихся серебряных наноструктур на GaAs

П. В. Чернова, И. А. Гладских, Н. А. Торопов

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

Как известно, металлические наноструктуры обладают уникальными оптическими свойствами в видимом спектральном диапазоне, это происходит за счет коллективных электронных возбуждений. Благодаря таким свойствам они играют решающую роль в повышении поглощения и флуоресценции органических молекул, а также в фотохимических превращениях [1, 2] и во многих других существующих и возникающих областях современной фотоники [3]. Яркие оптические свойства гибридов металлических наночастиц, органических и неорганических материалов составляют основу их применения в фотоприемниках [4], оптических коммутационных датчиках, устройствах памяти и т. д. В частности, структуры на основе GaAs, содержащие массивы металлических наночастиц [5], являются многообещающими с точки зрения улучшения характеристик в оптико-электронных приборах. В то же время процессы роста и оптические свойства этих наноструктур изучены на данный момент недостаточно.

В данной работе мы сообщаем о результатах наших исследований морфологии и оптических свойств наноструктурированных пленок серебра на поверхности GaAs. Нами использовалось серебро (99,99 %), которое осаждалось на подложку GaAs при комнатной температуре в вакуумной камере PVD-75 (Kurt J. Lesker) в условиях высокого вакуума. Эквивалентная толщина осажденной пленки контролировалась кварцевым датчиком. Морфология образцов была получена с помощью атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии. Образец с толщиной серебряной пленки 10 нм изображен на рис. 1.

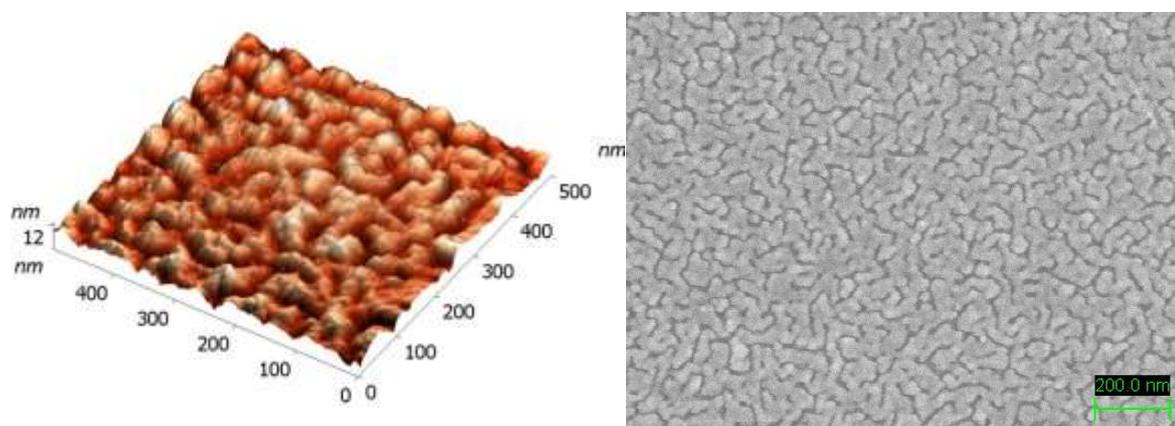


Рис. 1. 3D-AFM (слева) и SEM (справа) изображения серебряных наноструктур на GaAs

Анализируя полученное изображение, мы приходим к выводу, что серебряная пленка имеет лабиринтную структуру с четкими границами между нерегулярными, но хорошо разделенными гранулами. Типичная высота неоднородностей составляет около 10 нм.

Принимая во внимание, что подложки GaAs имеют макроскопическую толщину и при этом являются полностью непрозрачными в видимом диапазоне, измерения экстинкции не могут быть осуществлены для изучения оптических свойств серебряной пленки. С другой стороны, измерения отражательной способности может быть достаточно легко осуществлено. Так на рис. 2 участки спектров отражения получены с многоканальным анализатором фотонного РМА-12 (Hamamatsu) в диапазоне от 350 до 1100 нм при различных углах падения.

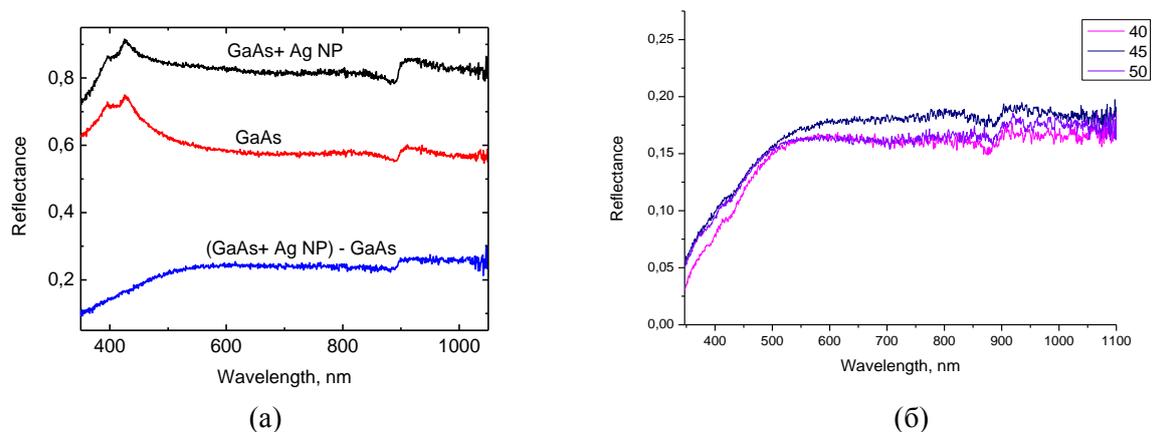


Рис. 2. Спектры отражения Ag наноструктур на подложке GaAs (черная линия), чистая подложка GaAs (красная линия) и их разность (синяя линия) (а); разностные спектры отражения при различных углах (б)

В данном спектре присутствуют две существенные особенности. Во-первых, плазмонная полоса неоднородно уширена, и сдвиг ее в красную область. Во-вторых, наличие скачка в отражении на краю фундаментального поглощения в GaAs (около 900 нм), который сохраняется в разностном спектре. Поскольку сама пленка серебра не располагает какими-либо спектральными особенностями на этой длине волны, этот скачок разности спектра может быть объяснен усилением поглощения GaAs вблизи серебряных наночастиц.

Работа частично выполнена в рамках НИР № 2350 по государственному заданию № 2014/190.

1. Toropov N.A., Parfenov P.S., Vartanyan T.A. J. Phys. Chem. C. **118**(31) (2014) 18010–18014.
2. Toropov N.A., Kaliteevskaya E.N., Leonov N.B., Vartanyan T.A. Opt. and Spectrosc. **113**(6) (2012) 616–620.
3. Atwater H.A. Polman A. Nature Materials **9** (2010) 205–213.
4. Stuart H.R., Hall D.G. Appl. Phys. Lett. **73** (1996), 3815–3817.
5. Nevedomskiy V.N., Bert N.A., Chaldyshev V.V., Preobrazhenskiy V.V., Putyato M.A., Semyagin B.R. Semiconductors **47**(9) (2013) 1185–1192.
6. Vartanyan T.A., Gladskikh I.A., Leonov N.B., Przhibel'skii S.G. Physics of the Solid State (2014) **56**(4) 816–822.

Избыток гелия и молекулярного водорода в конжеляционном льду подледникового озера Восток, Восточная Антарктида

*Ю. О. Четвериков¹, Р. Jean-Baptiste², И. Л. Федичкин⁵,
Р. В. Тюкальцев⁵, В. Ф. Ежов¹, В. А. Соловей¹, С. Н. Клямкин⁴,
Н. Н. Аруев⁵, В. Я. Липенков³, С. А. Булат¹*

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

² *Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, Saclay, France*

³ *Арктический и антарктический научно-исследовательский институт,
Санкт-Петербург, Россия*

⁴ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

⁵ *IPTI, St. Petersburg*

Исследовано содержание легких газов – гелия и молекулярного водорода, растворенных в кернах намерзшей на ледник воды озера Восток. Керна извлечены с глубин 3 596–3 699 м скважины 5Г-3 станции «Восток», Восточная Антарктида. Лед кернов является сверхчистым и содержит относительно малое количество растворенных газов (тип 2). Легкие газы собраны в стеклянные колбы в течение трех дней дегазации кернов только что поднятых из скважины. За этот период времени большинство гелия и водорода выходило в окружающий объем контейнера керна и емкости пробоотбора. Чтобы уменьшить давление фоновых газов в начале дегазации контейнер вакуумировался в течении 15–30 мин, после чего основная часть легких газов продолжала диффундировать в контейнер и сообщающийся с ним пробоотборник. Пробы исследовались на времяпролетном масс-спектрометре (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) через 6 мес. после пробоотбора и на масс-спектрометре изотопных соотношений He_3/He_4 MAP-215-50 (LSCE, CEA Сакле, Франция) через 9 мес. после пробоотбора.

Анализ проб показал, что концентрация водорода в конжеляционном льду типа 2 в среднем $3 \pm 0,31$ мкМ на литр льда, тогда как концентрация гелия составляла около $0,53 \pm 7$ мкМ/л. Эти значения на несколько порядков выше, чем равновесная концентрация гелия и водорода в метеорном льду (для гелия – 0,01–0,02 мкМ/л, водорода 0,001–0,002 мкМ/л). В предыдущих исследованиях содержание гелия в конжеляционном льду с аналогичного диапазона глубин (3 530–3 610 м) намного меньше (0,01–0,04 мкМ/л). Данная работа объясняет это расхождение криосорбцией в поглотителе фоновых газов, которая приводит к занижению значений содержания гелия, измеренных масс-спектрометром MAP-215-50 в работе [1].

Изотопные соотношения $He_3/He_4 = 0,13–0,17 R_a$ ($R_a = 1,38 \cdot 10^{-6}$ – He_3/He_4 отношение для воздуха) льда в пределах ошибки соответствуют измеренным в работе [1]. Таким образом, полученные данные по соотношению He_3/He_4 говорят об ограничении геотермальной активности в подледниковом озере Восток. В то время как данные по содержанию легких газов указывают на

колоссальный избыток легких газов – гелия и водорода. Колоссальное превышение содержания водорода является косвенным подтверждением достоверности нахождения во льду озера уникальных водородных бактерий [2] и указывают на возможность существования жизни в условиях как отсутствия света, так и низкой геотермальной активности.

1. *Philippe Jean-Baptiste et al.* Nature, **411**, 460–462 (2001).
2. *S.A.Bulat et al.* International Journal of Astrobiology, **3**, 1, p 1–12 (2004).

Интерфейсный магнитоэлектрический эффект в слоистых гетероструктурах (Co, Ni)/ЦТС и (Co, Ni)/GaAs

А. И. Стогний¹, Н. Н. Новицкий¹, С. А. Шарко¹, В. А. Кецко², Н. Н. Поддубная³

¹ Научно-практический центр НАНБ по материаловедению», Минск, Беларусь

² Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

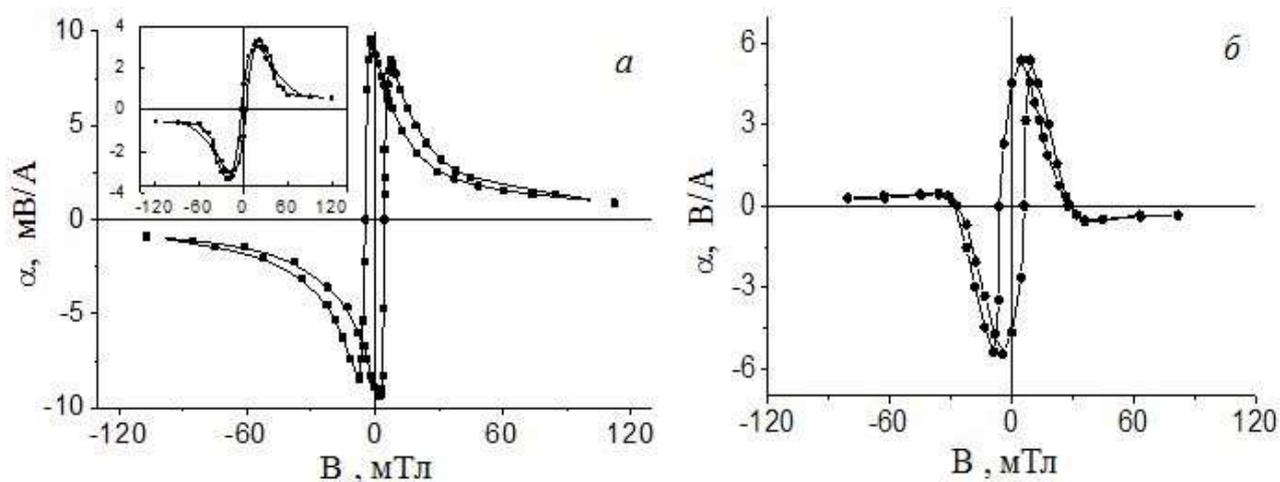
³ Институт технической акустики НАНБ, Витебск, Беларусь

Магнитоэлектрический (МЭ) эффект в пространственно-неоднородных средах, содержащих границы раздела – интерфейсы, представляет интерес, поскольку нарушение трансляционной симметрии на границах в таких средах налагает запрет на существование в них МЭ-взаимодействия.

В настоящем докладе показано, что в гетероструктурах, полученных методом ионно-лучевого распыления/осаждения, в виде слоев металлов кобальта и никеля на подложках цирконата титаната свинца (ЦТС) и арсенида галлия GaAs наблюдается интерфейсный МЭ-эффект. В указанных гетероструктурах пленки металлов образуют прямой контакт с подложками, и их толщина более чем на два порядка меньше толщины подложек. МЭ-эффект не зависит от толщины ФМ-пленки и степени шероховатости подложки, а определяется адгезионными свойствами пленки металла. Данный эффект наблюдается независимо от толщины ФМ-пленки и степени шероховатости подложки и определяется адгезионными свойствами пленки металла, причем интенсивность МЭ-взаимодействия уменьшается с ослаблением адгезионной связи пленки с подложкой. Для него характерно наличие максимума на зависимости МЭ-коэффициента по напряжению от толщины ФМ-пленки в области 1,5–2,5 мкм и равномерное уменьшение коэффициента с толщиной ЦТС подложки [1]. Величина МЭ-взаимодействия растет с уменьшением шероховатости подложки (рис.) и достигает наибольших значений на гладких подложках GaAs, не требующих дополнительной операции ионно-лучевой планаризации поверхности. Максимальные значения МЭ-коэффициента в гетероструктурах Ni/GaAs составляют 82 В/А (65,5 В/(см · Э)) при комнатной температуре [2].

Данная работа представляет определенный интерес для дальнейшего исследования методами поляризованных нейтронов распределения внутренних

напряжений по толщине пьезоподложки GaAs, наводимых пленкой ФМ-металла вследствие МЭ-эффекта.



Полевые зависимости МЭ коэффициента по напряжению гетероструктур Co /ЦТС /Co на планаризованных, полированных (вставка) подложках ЦТС (а) и гетероструктур Co /GaAs (б)

1. Стогний А.И., Новицкий Н.Н., Шарко С.А., Беспалов А.В., Голикова О.Л., Sazanovich A., Dyakonov V., Szymczak H., Кецо В.А. Вклад межфазных границ на магнитоэлектрические свойства гетероструктур Co /ЦТС /Co // Неорганические материалы. 2014. Т. 50. № 3. С. 303–307.
2. Лалетин В.М., Стогний А.И., Новицкий Н.Н., Поддубная Н.Н. Магнитоэлектрический эффект в структурах на основе металлизированных подложек арсенида галлия // ПЖТФ. 2014. Т. 40. № 21. С. 71–78.

Рентгеновские исследования формирования доменов в горных породах под взрывным воздействием

М. Д. Шарков¹, М. Е. Бойко¹, А. М. Бойко¹, В. А. Боровиков², С. Г. Конников¹

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

² *Национальный минерально-сырьевой университет «Горный», Санкт-Петербург, Россия*

Был произведен взрыв образца-модели горной породы, представлявшего собой блок бетона марки 100, в котором были размещены монокристаллические пластины синтетического кварца размера $15 \times 15 \times 0,35$ мм с ориентацией (0001). Использовались три набора пластин, размещенных внутри бетонного блока на расстояниях около 150, 300 и 500 мм от центра взрыва соответственно. Объемы бетона, задействованные при непосредственном заливании кварцевых пластин, были маркированы краской, выбранной в соответствии с расстоянием от данной (заливаемой) пластины до центра взрыва.

Были проведены исследования методом МУРР трех образцов, изъятых из взорванного материала и содержащих фрагменты кварцевых пластин. Отбор образцов проводился с учетом цветовой маркировки, чтобы были выбраны образцы, включающие в себя фрагменты кварцевых пластин каждого из трех наборов (соответствующих исходному расстоянию от данного фрагмента кварцевой пластины до центра взрыва). Данные МУРР были получены на установке МАРС-2 (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) в просвечивающем режиме при $\text{Cu-K}_{\alpha 1}$ -излучении ($\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$).

Анализ полученных кривых МУРР в соответствии с моделью Гинье показал, что размеры однородностей (зерен, доменов) в образцах составляют от 200 до 220 нм. Чем дальше образец находился от центра взрыва, тем большую величину имел вычисленный из кривых МУРР размер зерен (доменов). Применение модели Порода показало, что каждый из образцов содержит линейчатые компоненты или одномерные дефекты. Можно предположить, в частности, что во взорванном материале домены разделены дислокационными стенками.

Кроме того, на кривых МУРР наблюдались интенсивные брэгговские пики, отвечавшие латеральному линейному размеру от 80 до 100 нм, и последовательности брэгговских пиков, отвечающих величинам от 300 до 500 нм. Все полученные линейные величины росли с увеличением расстояния от начального местоположения пластины до центра взрыва. Большое число брэгговских пиков может говорить о присутствии в образцах двух- или трехмерной сверхрешетки.

Магнитные свойства инвертированных опалоподобных структур

*И. С. Шишкин^{1,2}, А. А. Мистонов^{1,2}, Н. А. Григорьева¹, С. В. Григорьев^{1,2},
Д. Менцель³*

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

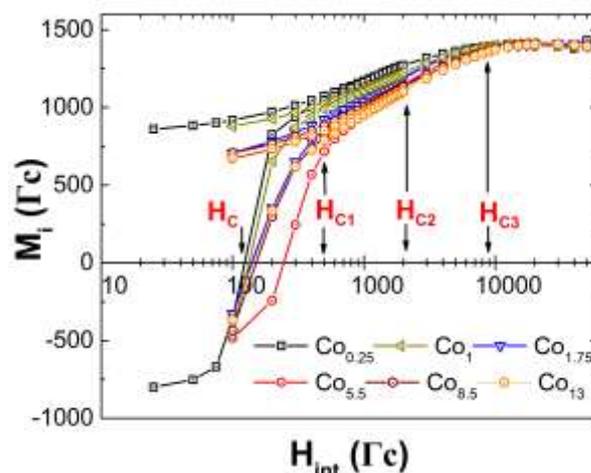
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

³ Institute of Condensed Matter Physics, Braunschweig, Germany

Исследована магнитная структура инвертированных опалоподобных структур (ИОПС) на основе кобальта и никеля. Металлические, ферромагнитные пленки были сформированы на основе матрицы искусственного опала и имеют пористую ГЦК-структуру с периодом решетки $a_0 = 720 \pm 20$ нм. Толщина пленок составила 0,25; 1,00; 1,75; 5,50; 8,50; 13,00 мкм.

Методом СКВИД-магнитометрии были измерены зависимости полной намагниченности образцов от величины внешнего магнитного поля, когда внешнее магнитное поле прикладывалось в плоскости пленки вдоль кристаллографической оси [1–21]. Полученные результаты были нормированы на намагниченность насыщения и представлены на рис. в зависимости от величины внутреннего магнитного поля. Показано, что полевая зависимость намагниченности характеризуется четырьмя критическими полями H_C , H_{C1} , H_{C2} , H_{C3} – коэрцитивная сила, точка изменения наклона кривой прямого хода, точка пересечения кривых перемагничивания прямого и обратного хода и поле насыщения соответственно.

По аналогии с экспериментом по нейтронной дифракции [1] эти критические поля соответствуют повороту векторов локальной намагниченности от кристаллографических направлений типа [111], вдоль которых локальные намагниченности были зафиксированы из-за поля структурной анизотропии ИОПС. Из исследования зависимостей величины критических полей от толщины пленки для ИОПС на основе Co установлено, что коэрцитивная сила H_C и поле насыщения H_{C3} не меняют своего значения с увеличением толщины. При этом значения H_{C1} и H_{C2} растут с увеличением толщины пленки, что свидетельствует о наличии связи между слоями. Для ИОПС на основе Ni значения H_C , H_{C1} , H_{C2} незначительно увеличиваются с ростом толщины, поле насыщения H_{C3} своего значения не меняет.



1. A. A. Mistonov, N. A. Grigoryeva, A. V. Chumakova, H. Eckerlebe, S. V. Grigoriev // PRB. 2013. Vol. 87. P. 220408.

Исследование магнитных свойств медь-замещенного гексаферрита бария $\text{BaFe}_{12-x}\text{Cu}_x\text{O}_{19}$

*А. К. Якушечкина¹, А. С. Семисалова¹, Д. А. Винник², Н. С. Перов¹,
Л. С. Машиковцева², Д. А. Жеребцов²*

¹ *Московский государственный университет, Москва, Россия*

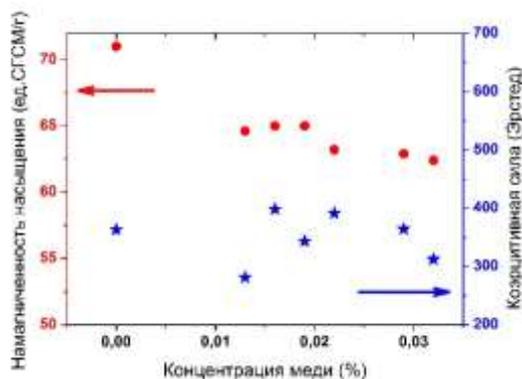
² *Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия*

Гексаферриты бария являются ферритами М-типа, имеющими структуру магнетоплюмбита, и представляют большой интерес с точки зрения их свойств, позволяющих использовать их в качестве постоянных магнитов и поглотителей микроволнового излучения, в высокочастотных устройствах, а также в элементах памяти с высокой плотностью записи. Также эти соединения интересны тем, что их свойства могут изменяться в зависимости от способа приготовления образцов или при частичном замещении бария или железа.

В данной работе исследовали магнитные свойства серии образцов измельченных кристаллов состава $\text{BaFe}_{12-x}\text{Cu}_x\text{O}_{19}$ (концентрация меди принимала значения $x = 0,013; 0,016; 0,019; 0,022; 0,029$ и $0,032$), полученных из раствора оксида железа (III) Fe_2O_3 , оксида меди CuO , карбоната бария BaCO_3 и карбоната натрия Na_2CO_3 . Измерения проводились на вибрационном магнитометре Lake Shore 7407 при комнатной температуре в диапазоне полей $[-16... +16 \text{ кЭ}]$. По полученным

результатам был проведен анализ зависимости основных магнитных свойств, таких как намагниченность насыщения и коэрцитивная сила от концентрации меди.

Был сделан вывод о том, что присутствие меди заметно влияет на магнитные свойства бариевого гексаферрита. Значение намагниченности насыщения демонстрирует плавный спад (рис.) от 71 ед. СГСМ/г (для чистого $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) до 62,4 ед. СГСМ/г для образца с максимальным значением концентрации



Влияние концентрации меди в образцах $\text{BaFe}_{12-x}\text{Cu}_x\text{O}_{19}$ на магнитные свойства

меди. Коэрцитивная сила же, в отличие от намагниченности насыщения, показывает плавный спад лишь при x , большем 0,022.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 13-02-12443), МОН РФ №11.1470.2014/К) и ФЦП № 14.574.21.0122).

D.A. Vinnik, A.K. Yakushechkina et al. Cu-Substituted Barium Hexaferrite Crystal Growth and Characterization (Направлена в Ceramics International).

Мессбауэровское исследование фотосистемы 2, выделенной из шпината с замещением ионов марганца на ионы железа в каталитическом марганцевом кластере

Т. Г. Балуюн, А. А. Новакова, Б. К. Семин

Московский государственный университет, Москва, Россия

Фотосинтез – исключительно важный для существования жизни на Земле процесс, в результате которого молекулы воды расщепляются с выделением кислорода и энергии. В растениях фотосинтез осуществляется фотосистемой 2, состоящей из марганцевого кластера, который, в свою очередь, состоит из четырех атомов марганца, одного атома кальция и пяти атомов кислорода и окружающих этот кластер белковых соединений.

В данной работе методом мессбауэровской спектроскопии исследовались образцы фотосистемы 2 (ФС2 (–Mn)), экстрагированные из листьев шпината. Цель данной работы – выявить особенности замещения марганца в кластере фотосистемы 2 ионом железа. Исследование этого замещения было проведено методом мессбауэровской спектроскопии. Исследовались два образца: насыщенный железом экстракт мембран (содержащих ФС2) шпината (образец 1) и инкубированный в растворе сульфата железа тот же экстракт для замещения атомов марганца (образец 2).

Сравнительный анализ мессбауэровских спектров образцов 1 и 2, снятых при температуре 80 К, показал наличие в образце 1 неспецифически связанных ионов железа (т. е. таких ионов, которые не заместили марганец в кластере, а связались с периферическими белками ФС2), в то время как в образце 2 были выявлены ионы, связанные как неспецифически, так и специфически (с замещением марганца из кластера). Помимо этого образец 1 исследовался в широком интервале температур от 2,5 до 80 К, а также во внешнем магнитном поле. Математическая обработка спектров выявила различия параметров спектров, соответствующих неспецифическому и специфическому связываниям ионов железа в ФС2; прослежена динамика их изменения с температурой, что позволит характеризовать силу этого связывания.

Y. Umena, K. Kawakami, J.-R. Cher et al. Crystal Structure of Oxygen-Evolving Photosystem II at a Resolution of 1.9 Å. Nature doi:10.1038/nature/nature09913.

Низкочастотная динамика белков разных типов структур

*В. Э. Вашченко^{1,2}, А. В. Дмитриев^{1,2}, А. И. Федосеев²,
В. П. Романов¹, С. Г. Лушников^{1,2}*

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

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

В настоящей работе с помощью мандельштам-бриллюэновского рассеяния (МБР) света изучали низкочастотную динамику белков в растворах в условиях тепловой денатурации. Объектами исследования были выбраны белки с разными структурными мотивами: α -белок бычий сывороточный альбумин (БСА) и два $\alpha+\beta$ -белка, лизоцим и α -лактальбумин.

МБР позволяет исследовать колебание молекулы как целого. При фазовых превращениях, связанных с изменением температуры, меняется конформация молекул и, соответственно, скорость распространения звука в растворе. Эти изменения сказываются на спектрах МБР как изменение величины сдвига компонент Мандельштама – Бриллюэна (МБК) относительно несущей несмещенной линии и интенсивностями этих линий. В эксперименте исследовались растворы белков в натрий-фосфатном буфере с $\text{pH} = 7,45$. Температура менялась от 293 до 367 °К, что позволяло наблюдать как тепловую денатурацию белков, так и переход в гель.

Были получены температурные зависимости сдвига, интенсивностей и полуширины на полувысоте дублетов МБР света и интенсивностей компонент упругого рассеяния в растворах белков на разной концентрации. Характер аномалий в окрестностях точек денатурации и гелеобразования позволяет говорить о различном характере процесса денатурации в белках разных структурных типов.

Синхротронное рассеяние в исследовании структуры белков-партнеров неорганической пирофосфатазы

Л. А. Дадинова^{1, 2}, Е. В. Родина², Н. Н. Воробьева³, С. А. Курилова³,
Т. И. Назарова², Э. В. Штыкова^{1, 4}

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

² Московский государственный университет, Москва, Россия

³ Научно-исследовательский институт физико-химической биологии им. А. Н. Белозерского, Москва, Россия

Для регулирования процессов клеточного метаболизма важно знать и понимать на функциональном уровне молекулярные взаимодействия белков, участвующих в этих процессах [1]. Неорганическая пирофосфатаза (PPase) является ключевым ферментом в биосинтезе белков и нуклеиновых кислот [2]. Кроме того, PPase рассматривают в качестве потенциального партнера для образования биологических комплексов при взаимодействии с такими цитоплазматическими ферментами, как новый тип фруктозо-1,6-бисфосфат альдозазы (FbaB), играющей ключевую роль в регуляции метаболизма [3]; 5-кето-4-дезоуридонат изомеразы (KduI), участвующей в разложении пектина [4]; и глутамат декарбоксилазы (GadA), единственного нецитоплазматического фермента, катализирующего декарбоксилирование глутамата в γ -аминобутират [5]. Для изучения функциональных характеристик этих белков необходимо знать поведение и структуру каждого из них в растворе. В настоящей работе впервые PPase и ее потенциальные белки-партнеры были изучены и охарактеризованы методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) с использованием синхротронного излучения на линии P12 накопителя Petra III (DESY, Гамбург). На основе экспериментальных данных МУРР, мы рассчитали важные структурные параметры, описывающие поведение исследованных образцов в растворе и нами были впервые предложены трехмерные модели, описывающие их четвертичную структуру. Кроме того, было обнаружено, что часть ферментов (KduI, GadA) в растворе может одновременно и диссоциировать, и образовывать ассоциаты. Полученные результаты являются необходимыми для дальнейшего исследования взаимодействий и комплексообразования белков-партнеров PPase и позволяют по-новому взглянуть на роль этого фермента в жизнедеятельности клетки.

1. Rodina E., Vorobieva N., Kurilova S., Mikulovich J., Vainonen J., Aro E.M., Nazarova T. Identification of New Protein Complexes of *Escherichia coli* Inorganic Pyrophosphatase Using Pull-Down Assay. *Biochimie*. 93(9) (2011) 1576–1583.
2. Heinonen J.K. Biological Role of Inorganic Pyrophosphate. Kluwer Academic Publishers, Boston, 2001.
3. Lorentzen E., Pohl E., Zwart P., Stark A., Russell R.B., Knura T., Hensel R., Siebers B. Crystal Structure of an Archaeal Class I Aldolase and the Evolution of (Betaalpha)₈ Barrel Proteins. *J. Biol. Chem.* 278(47) (2003) 47253–47260.

4. *Condemine G., Robert-Baudouy J.* Analysis of an *Erwinia Chrysanthemi* Gene Cluster Involved in Pectin Degradation. *Mol. Microbiol.* 5 (9) (1991) 2191–2202.
5. *Capitani G., De Biase D., Aurizi C., Gut H., Bossa F., Grütter M.G.* Crystal Structure and Functional Analysis of *Escherichia coli* Glutamate Decarboxylase. *Embo J.* 22 (2003) 4027–4037.

Биогенные, функционализированные и магнитные наночастицы для биомедицинского применения

В. К. Кочкина

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

Магнитная жидкость на основе наночастиц Fe_3O_4 все более широко используется в противоопухолевом лечении в качестве самостоятельного противоопухолевого агента, средств адресной доставки противоопухолевых препаратов, гипертермии, контрастного средства для визуализации, в хирургии в качестве барьера тока крови при использовании магнитов для удержания магнитной жидкости.

Синтез магнитных наночастиц проводился по методу химической конденсации высокодисперсного магнетита по реакции В. С. Элмора с использованием технологии микроволнового синтеза в микроволновой печи. Получены чистые и допированные атомами редкоземельных металлов (Eu, Sm) магнитные железосодержащие наночастицы в виде коллоидного раствора с заданными ПАВ и также в виде порошка. Исследование размеров, формы чистых Fe_3O_4 наночастиц и допированных наночастиц Fe_3O_4 (Eu, Sm) проводилось с помощью просвечивающего электронного микроскопа. Частицы имеют сферическую форму, примерно одинакового размера; средний размер частиц

~ 4–5 нм. Усредненная кристаллическая структура и оценка среднего размера чистых и допированных атомами металлов магнитных железосодержащих наночастиц определялась методом рентгеновской дифракции (XRD). Наноразмерная локальная атомная и электронная структуры (фазовое состояние, степени окисления железа) вокруг атомов редкоземельных металлов исследовались методом рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES), особенности химической связи – методами Фурье инфракрасной спектроскопии (FTIR) и спектроскопии видимой и ультрафиолетовой области спектра (UV-vis).

Важным аспектом исследований явилось изучение системных изменений, обусловленных введением исследованных наночастиц, в организме крыс-опухоленосителей. Такие эффекты были весьма выражены при введении магнитных наночастиц, что связано с их эффективностью в отношении опухолей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ № 14-35-00051.

Моделирование распределения поглощенной дозы синхротронного излучения в объеме материала

А. Г. Лемзяков, Б. Г. Гольденберг, К. Э. Купер

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

Синхротронное излучение является уникальным инструментом, который используется в ИЯФ СО РАН для получения высокоаспектных микроструктур посредством глубокой рентгеновской литографии, в метрологии и в исследовании радиотерапии.

Одной из проблем рентгеновской литографии является уширение топологических размеров, обусловленное в основном разлетом фотоэлектронов. Также при экспонировании очень толстых слоев резиста (порядка 1 мм и больше) начинает сказываться комптоновское рассеяние, создающее засветку в теневой области. Поэтому для получения желаемой топологии необходима коррекция режимов экспонирования по результатам анализа распределения поглощенной дозы в толще материала. Другая задача, решаемая в настоящий момент в ИЯФ, – исследование микропучковой терапии рака. Предлагается использовать матрицу микропучков (шириной порядка 100 мкм) жесткого рентгеновского излучения (энергия более 30 кэВ) для радиотерапевтического воздействия на опухолевые клетки. При этом один из важнейших параметров – отношение дозы в теневой области и в зоне засветки. Надо заметить, что широко используемый для рентгеновской литографии резист ПММА (полиметилметакрилат) имеет плотность и элементный состав, достаточно близкий к биологической ткани, и может быть использован как аналог при модельных экспериментах.

Для решения этих задач используется моделирование методом Монте-Карло с использованием библиотеки Geant4. Построена модель, и получены аналитические результаты распределения доз по объему ПММА.

Анализ порошковой рентгенограммы диметилового эфира парабензойной кислоты

А. А. Лобова, Т. А. Екимова

Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

Сложные эфиры карбоновых кислот широко используются в медицине, например как стоматологические реставрационные материалы, а также в качестве растворителей, пластификаторов, ароматизаторов и т. д. Данные вещества находят широкое применение в различных областях науки и технологии, однако их структура изучена пока недостаточно, поэтому они являются интересной темой для исследования.

Целью работы был анализ рентгенограммы диметилового эфира парабензойной кислоты $C_{11}H_{15}NO_2$ по порошковым дифракционным данным.

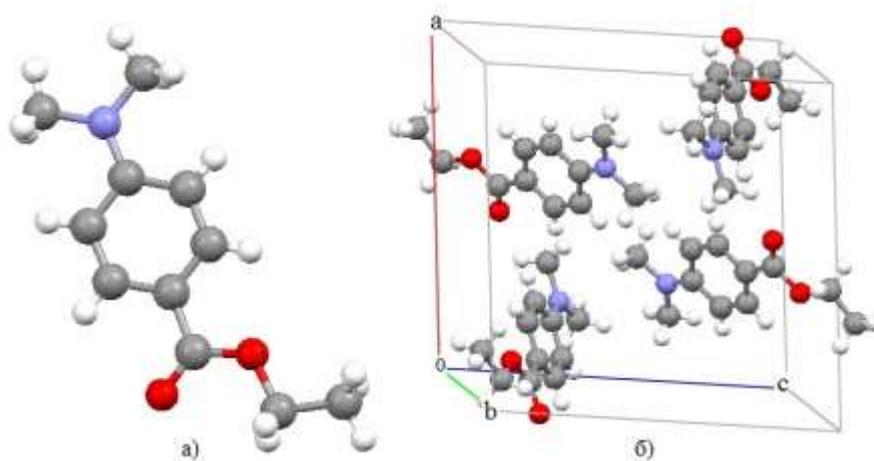
Образец был синтезирован в виде порошка на кафедре молекулярной биологии биологической и органической химии Петрозаводского государственного университета. Рентгенографирование образца проводилось на дифрактометре ДРОН-6 в медном K_{α} -излучении в интервале углов 2θ от 6° до 70° с шагом по углу 0,02. Время экспозиции в каждой точке составляло 10 с.

Индексирование рентгенограммы проводилось по 20–30 самым сильным линиям в программе DICVOL04. Результаты индексирования представлены в табл.

Таблица. Результаты индексирования рентгенограммы диметилового эфира пара-бензойной кислоты

№	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$\alpha, ^{\circ}$	$\beta, ^{\circ}$	$\gamma, ^{\circ}$	V	M(n)	F(n)
1	10,78(8)	11,25(1)	12,88(3)	98,94(7)	99,30(1)	109,91(7)	1 413,8	6,3	12,8
2	13,11(2)	9,81(5)	15,76(8)	80,28(1)	122,29(9)	113,56(6)	1 569,68	5,1	10,4
3	11,70(6)	12,57(2)	13,15(1)	79,63(4)	64,20(8)	75,78(6)	1 683,36	6,6	12,5

Показано, что рентгенограмму исследуемого соединения можно проиндексировать в триклинной сингонии, пространственная группа P-1, число молекул на элементарную ячейку $Z = 4$. В настоящее время проводится FPD-разложение рентгенограммы в программе MR1A для варианта № 1 с кристаллографическими характеристиками $a = 10,78(8) \text{Å}$, $b = 11,25(1) \text{Å}$, $c = 12,88(3) \text{Å}$, $\alpha = 98,94(7)$, $\beta = 99,30(1)$, $\gamma = 109,91(7)$.



Для варианта № 1
положение молекулы – а; ее упаковка в элементарной ячейке – б

Методом симулированного отжига было найдено положение молекулы в независимой части элементарной ячейки и построение упаковки молекул в элементарной ячейке (рис.).

Исследование взаимодействия магнитных наночастиц с моделью клеточной мембраны на границе раздела вода / воздух

Е. П. Миронов¹, Т. В. Букреева^{1, 2}, Н. Н. Новикова¹

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

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

Наноконпозиты из органических и неорганических наночастиц имеют огромный потенциал практического применения в различных областях, начиная с запоминающих устройств и заканчивая биомедициной. Одна из основных областей практического применения магнитных наночастиц – использование их в терапевтических целях. Для этих целей требуется использование биосовместимых магнитных материалов, например оксида железа Fe_3O_4 – магнетита. Для применения наночастиц в медицине необходимо исследовать взаимодействие разрабатываемых систем с клетками, которое начинают с экспериментов на моделях клеточных мембран. В качестве такой модели можно использовать ленгмюровский монослой дипальмитоилфосфатидилхолина (DPPC).

Особый интерес для современной науки представляют исследования биофизических и биохимических процессов, протекающих в биомембранах в их «естественной среде обитания», на жидкости. В природе они имеют «жидкую» структуру, обладающую большой свободой движения. И именно такие уникальные эксперименты, как одновременное использование методов π -А-изотерм, XRSW и GID, необходимы для формирования полной картины взаимодействия наночастиц с моделью клеточной мембраны в условиях, наиболее приближенных к естественным условиям их функционирования в живых клетках.

Молекулярная упаковка монослоя DPPC на границе раздела жидкость / газ была исследована методом стоячих рентгеновских волн в условии полного внешнего отражения (XRSW) и методом двумерной дифракции в геометрии скользящих углов (GID) на станции «Ленгмюр» Курчатовского источника синхротронного излучения. Было показано, что наночастицы магнетита достаточно сильно взаимодействуют с монослоем DPPC: под действием кулоновских сил они «вытягиваются» из субфазы к границе раздела жидкость / воздух. Наличие наночастиц Fe_3O_4 в приповерхностном слое было показано с помощью XRSW-метода. Метод GID показал изменения в кристаллической структуре монослоя DPPC при взаимодействии с магнитными наночастицами.

Синтез и диагностика наночастиц биогенных металлов для использования в противоопухолевом лечении

О. Е. Положенцев¹, П. С. Качесова²

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

² Ростовский научно-исследовательский онкологический институт, Ростов-на-Дону, Россия

В настоящее время по-прежнему остается актуальной проблема поиска и исследования новых эффективных противоопухолевых средств. Одним из перспективных направлений в онкологии являются нанотехнологии и применение наночастиц биогенных металлов (Cu, Fe, Zn), которые обладают выраженной противоопухолевой активностью, нетоксичностью на организм и другими видами биологической активности.

В настоящей работе разработаны методики синтеза наночастиц биогенных металлов (Cu, Fe, Zn) с заданными характеристиками (размер, форма, концентрация НЧ, растворы, ПАВ) на основе методов микроволнового синтеза с использованием фокусированного микроволнового излучения, гидротермального синтеза и плазмохимического способа. Получены наноразмерные порошки и стабильные коллоидные растворы наночастиц биогенных металлов (Cu, Fe, Zn) с заданными характеристиками. Синтезированы наночастицы меди, железа, оксидов меди, оксида железа (II, III) и ZnO. Получены стабильные коллоидные растворы наночастиц сферической формы Cu и CuO (10–30 нм, 50–80 нм), кубической формы Cu₂O (50–150 нм), мицеллярные наночастицы Cu₂O и CuO (150–200 нм), Fe (70–80 нм), магнитные наночастицы Fe₃O₄ сферической формы (5–10 нм), сферические наночастицы ZnO (20–50 нм).

Проведена экспериментальная диагностика наночастиц биогенных металлов (Cu, Fe, Zn) с использованием методов электронной микроскопии (ТЕМ, SEM), рентгеновской дифракции (XRD), рентгеновской спектроскопии поглощения (XANES), ультрафиолетовой и видимой (UV-vis) и инфракрасной (IR) спектроскопий. Апробирована экспериментальная методика построения двумерных карт распределения наночастиц в биологических опухолевых и немалигнизированных тканях с помощью мелкоточечного микрорентгенофлуоресцентного анализа. Данная комплексная методика позволяет исследовать механизмы противоопухолевого действия наночастиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-04-32046 мол_а.

Молекулярная динамика амлодипина бесилата

Т. В. Попюк^{1,2}, Д. Худоба¹, Я. В. Вонсицки³, Л. А. Булавин²

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

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

³ *Университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша*

Детальное изучение фазовых переходов, происходящих вследствие влияния внешних факторов, а также исследование структурных особенностей новых полиморфных форм лекарственных веществ представляет одну из актуальных проблем современной фармакологии и физики конденсированных сред [1].

Амлодипин – новое поколение лекарственных средств. Производное дигидропиридина – блокатор медленных кальциевых каналов (БМКК), блокирует поступление ионов кальция через мембраны в гладкомышечные клетки миокарда и сосудов. Как и другие представители группы БМКК, амлодипин используется для понижения кровяного давления (путем расслабления мышц, регулирующих диаметр кровяных сосудов) и предотвращения грудных болей. Увеличивая диаметр кровяных сосудов, понижает давление. Оказывает антиангинальное и гипотензивное действие. Применяется при лечении ишемической болезни сердца и гипертонии. Известны 3 его полиморфные формы: бесилат, мезилат и малеат. Эффективность препарата в виде двух последних форм существенно ниже их аналога – бесилата, в связи с чем и исследовалась именно эта форма [2].

Целью работы является определение динамики метильных групп амлодипина в зависимости от температуры методом ЯМР.

Амлодипин бесилат исследовали в интервале температур от 77 до 290 К. В работе приведено сравнение результатов эксперимента с результатами моделирования динамики молекул амлодипина бесилата.

1. *Brittain H.G. // J. Pharm. Sci. 2002. V. 91(7) P. 1573–80.*
2. *Татаренко О. // Здоровье Украины. 2008. №. 20. С. 26–27.*

Новые эндометаллофуллеренолы железа

А. А. Сжогина, В. П. Седов, В. Т. Лебедев, Ю. П. Черненко

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

Вскоре после открытия фуллерена C_{60} были получены первые эндоэдральные структуры на основе лантана ($La@C_{60}$) [1]. До сих пор синтез эндометаллофуллеренов (ЭМФ) ограничивался главным образом получением такого рода структур для редкоземельных элементов (Gd, Ho, Dy, Nd и др.)

Для железа удавалось получать в основном экзоэдральные соединения [2]. Инкапсулирование железа было достигнуто только в углеродные оболочки в виде нанотрубок и графитовых слоев [3].

Следует заметить, что железо, благодаря наличию магнитных свойств, является чрезвычайно интересным с точки зрения возможности помещения его в фуллереновый кейдж и дальнейшего применения в медицинских целях, прежде всего в составе контрастирующих агентов для магнито-резонансной томографии (МРТ). Для такого рода разработок наиболее привлекательными представляются эндометаллофуллеренолы типа $Fe@C_{60}(OH)_x$, способные служить контрастирующими агентами, не содержащими токсичных тяжелых металлов (Gd в промышленных препаратах «Магневист», «Гадовист») и обладающими дополнительными полезными свойствами. В составе $Fe@C_{60}(OH)_x$ атом железа заключен в углеродную оболочку и сохраняет исходные магнитные свойства, а органическая составляющая – $C_{60}(OH)_x$, обладает антиоксидантной, антимуtagenной, антиопухоловой активностью, является нетоксичной и перспективна как компонент композиционных биоматериалов [4–6].

Авторы разработали метод, основанный на использовании специальных молекулярных прекурсоров, включающих атомы металла в координации с макроциклическими лигандами. Методом ИК-спектроскопии было подтверждено наличие характерных для фуллеренола $Fe@C_{60}(OH)_x$ химических связей. Полученные физико-химические и рентгеновские дифракционные данные позволили идентифицировать эндоэдральный тип структуры синтезированного железо-углеродного соединения $Fe@C_{60}(OH)_{30}$ и наличие вокруг углеродного кейджа гидроксильной оболочки, обеспечивающей высокую растворимость фуллеренола в воде, что открывает большие перспективы для биомедицинских применений.

1. Heath J.R., O'Brien S.C., Zhang Q., Liu Y., Curl R.F., Tittel F.K., Smalley R. E. Lanthanum Complexes of Spheroidal Carbon Shells // J. Am. Chem. Soc. 1985. V. 107. P. 7779–7780.
2. Pradeep T., Kulkarni G.U., Kannan K. R., Guru Row T.N., Rao C.N.R. A Novel Iron Fullerene (FeC_{60}) Adduct in the Solid State // J. Am. Chem. Soc. 1992. V. 114. No 6. P. 2272–2273.

3. Zhang G.L., du Machie van Voorthuysen E.H., Szymansky K., Boom G., Verwerft M.G.M., Jonkman H.T., Niesen L. Iron Nanoparticles Grown in a Carbon Arc Discharge. *IL Nuovo Cimento*. 1996. V. 18D. No 2, 3. P. 281–285.
4. Piotrovsky L., Erokin M., Erokina E. et al. Medicinal Chemistry and Pharmacological Potential of Fullerenes and Carbon Nanotubes. Cataldo F., T. da Ros (eds.). Springer. 2008. P. 139–155.
5. Yin J.J., Lao F., Fu P.P., Wamer W.G., Zhao Y.L., Wang P.C., Qiu Y., Sun B.Y., Xing G.M., Dong J.Q., Liang X.J., Chen C.Y. The Scavenging of Reactive Oxygen Species and the Potential for Cell Protection by Functionalized Fullerene Materials // *Biomaterials*. 2009. V. 30(4). P. 611–621.
6. Krokosz A., Grebowski J., Rodacka A., Pasternak B., Puchala M. The Effect of Fullerenol C₆₀(OH) ~ 30 on the Alcohol Dehydrogenase Activity Irradiated with X-Rays // *Radiation Physics and Chemistry*. 2014. V. 97. P. 102–106.

Определение радиационной стойкости металлоуглеродных кластеров при нейтронном облучении

М. В. Суюсова, В. С. Козлов, В. А. Шилин

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

Развитие высоких технологий в значительной мере связано с открытием и исследованием различных углеродных наноструктур: фуллеренов, углеродных нанотрубок и графенов, для которых очевидны разнообразные области потенциального применения в науке и технике, молекулярной биологии и медицине.

Особое значение имеют перспективы внедрения фуллеренов и радиоактивных металлофуллеренов в медицину для терапевтических и диагностических целей (изотопные метки, ЯМР контрастирующие вещества). Преимущество радиометаллофуллеренов заключается в их низкой токсичности вследствие защищенности радиоактивного изотопа углеродной оболочкой от химического (и биологического) воздействия в живом организме.

Наиболее продуктивный метод получения радиометаллофуллеренов заключается в активации стабильных кластеров тепловыми нейтронами, однако сопутствующие им быстрые нейтроны приводят к частичному разрушению исходного материала. В этой связи важно изучение радиационной устойчивости таких объектов.

Приготовлены образцы индивидуально выделенных фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{84} , $Gd@C_{82}$ и смеси состава $Gd@C_{2n}$ методом электродугового испарения композитного электрода, с последующей экстракцией фуллереновой сажи и хроматографическим разделением экстракта на высокоэффективном жидкостном хроматографе Shimadzu. Облучение производилось в вертикальном канале реактора ВВР-М ПИЯФ в пределах $t = 0,5 \div 32$ ч.

Проведено исследование радиационной стойкости (выживаемости) углеродных нанообъектов, включающее учет химической активности $Gd@C_{82}$ в аэробных условиях, вклад быстрых нейтронов в разрушение пустого кейджа C_{82} , вклад реакции Сцилларда – Чалмерса и влияние размера кластера.

Определена зависимость выживаемости фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{84} и $Gd@C_{82}$ при их облучении быстрыми и тепловыми нейтронами в реакторе ВВР-М от суммарного флюенса (до $10^{19} \text{ n} \cdot \text{см}^{-2}$). Обсуждаются и сравниваются результаты по радиационной устойчивости пустых углеродных кластеров C_{60} , C_{70} , C_{84} , C_{2n} и эндометаллофуллерена $Gd@C_{82}$.

Исследование противораковых препаратов оптическими методами

Г. А. Хашибашев, А. А. Гуда, А. П. Будник, О. Е. Положенцев

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В данной работе проводится исследование противораковых комплексов платины, таких как карбоплатин и оксалиплатин, на основе анализа ИК-спектров пропускания данных комплексов в различных растворах и смесях.

Инфракрасная спектроскопия является ценным аналитическим методом и служит для исследования строения молекул. Анализируя ИК-спектр можно понять полную молекулярную структуру вещества. Измерения проводились на ИК фурье-спектрометре ФСМ 1202 с использованием метода многократного нарушенного полного внутреннего отражения (МНПВО). Этот метод подходит для измерения водных растворов.

Исследовали взаимодействие платиновых препаратов с тиосульфатом натрия и альбумином. Тиосульфат натрия – соль, которую используют при терапии платиновым препаратом, чтобы уменьшить его токсичность, а альбумин – транспортный белок, который необходим, чтобы доставить препарат к раковым клеткам. Эксперименты проводили при терапевтической температуре 37 °С.

Анализируя спектры, сделали выводы о механизмах взаимодействия платиновых препаратов с молекулами тиосульфата натрия и активными центрами альбумина.

Колебательная теплоемкость углеродных нанотрубок при низких и сверхнизких температурах

М. В. Авраменко

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

С момента открытия [1] углеродные нанотрубки постоянно привлекают внимание исследователей в силу своего высокого потенциала для различных технологических применений [2], обусловленного уникальными физическими свойствами. Одним из таких уникальных физических свойств является низкотемпературная теплоемкость, закон роста которой с температурой продолжает оставаться предметом дискуссий.

В нашей работе мы используем недавно предложенный подход [3] к описанию низкочастотной динамики двумерной мембраны. В противоположность традиционным методам данная модель рассматривала одностенную углеродную нанотрубку (ОУНТ) как объект, образованный монослоем графена и не имеющий макроскопической толщины. При этом прогибная энергия деформации мембраны оказывалась связанной не с ее толщиной, а исключительно с изменением кривизны ее поверхности, что позволило получить новые, физически обоснованные уравнения ее движения. Развивая данный подход, мы разработали теорию теплоемкости ОУНТ при низких и сверхнизких температурах [4]. Отметим, что важной особенностью предложенной модели является учет взаимодействия нанотрубок с окружающей средой, что впервые позволило теоретически объяснить известные экспериментальные значения теплоемкости в сверхнизкотемпературной области ($T < 2$ К), которые примерно на порядок меньше теоретических величин теплоемкости, предсказываемых в рамках всех предшествующих подходов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-02-12085 офи_м).

1. *S. Iijima*. Helical Microtubules of Graphitic Carbon // Nature 354, 56–58 (1991).
2. *M. V. Avramenko, I. Yu. Golushko, A. E. Myasnikova, S. B. Rochal*. Vibrational Heat Capacity of Carbon Nanotubes at Low and Ultra-Low Temperatures // Physica E 68, 133 (2015).
3. *Jorio A*. Carbon Nanotubes: Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications / A. Jorio, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus // Top. Appl. Phys. 111, 1–750 (2008).
4. *S. B. Rochal, V. L. Lorman and Yu. I. Yuzyuk*. Two-dimensional Elasticity Determines the Low-Frequency Dynamics of Single- and Double-Walled Carbon Nanotubes // Phys. Rev. B 88, 235435 (2013).

Oscillating Magneto- and Electrocaloric Effects in Graphene Layers

Z. Z. Alisultanov^{1,2}

¹ *Amirkhanov Institute of Physics DSC RAS, Makhachkala, Russia*

² *Dagestan State University DSC RAS, Makhachkala, Russia*

Magnetocaloric effect (MCE) is a thermal response of magnetic materials to a magnetic field change B . The effect may be observed through an entropy change S (from an isothermal process), where the material exchanges heat with a thermal reservoir or through a temperature change T (from an adiabatic process). Thus, the effect is characterized by the quantities S and T . The main application for the MCE is in magnetic refrigeration, first suggested in the late 1920s with a process known as adiabatic demagnetization.

MCE is stronger in materials that present some magnetic order, particularly in the vicinity of a phase transition. Therefore, research of materials is specially focused on ferromagnets [1], antiferromagnets [2] and multiferroics [3]. Nevertheless, MCE in diamagnetic materials have been studied recently [4–7]. For these materials, both quantities S and T present an oscillating character as a function of the applied magnetic field and present a maximum value at a given temperature even though there is no critical temperature. The oscillatory behavior is related to the crossing of the Landau levels through the Fermi energy, analogously to the well known de Haas-van Alphen effect. The oscillating MCE was studied in 3D systems [4, 8] (standard bulk diamagnets), and in systems of lower dimensionality, 2D [5, 6, 9] and 1D [7] diamagnets. It should be noted that the MCE in diamagnetic materials is much weaker than the effect observed in magnetically ordered materials. However, due to the oscillations, diamagnetic materials could work as highly sensitive magnetic field sensors [4, 8, 9].

The present effort thus goes further and analysis the OMCE of multilayer graphene under an electric and magnetic field. General expressions for the thermodynamic potentials are derived and then the entropy change and adiabatic temperature change are investigated.

1. *L. Li, K. Nishimura, W. D. Hutchison, and K. Mori.* J. Phys. D: Appl. Phys. 41, 175002 (2008).
2. *J. Shen, Z.-Y. Xu, H. Zhang, X.-Q. Zheng, J.-F. Wu, F.-X. Hu, J.-R. Sun, and B. gen Shen.* J. Magn. Magn. Mater. 323, 2949 (2011).
3. *M. M. Vopson.* J. Phys. D: Appl. Phys. 46, 345304 (2013).
4. *M. S. Reis.* Appl. Phys. Lett. 99, 052511 (2011).
5. *M. S. Reis.* J. Appl. Phys. 113, 243901 (2013).
6. *M. S. Reis.* Appl. Phys. Lett. 101, 222405 (2012).
7. *Z. Z. Alisultanov, R. P. Meilanov, L. S. Paixao, and M. S. Reis.* Physica E 65, 44 (2015).
8. *M. S. Reis.* Solid State Commun. 152, 921 (2012).
9. *L. S. Paixao, Z. Z. Alisultanov, and M. S. Reis.* J. Magn. Magn. Mater. 368, 374 (2014).

Спиновые волны в кристаллах типа MnO при учете дипольного взаимодействия

Л. А. Баталов

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

Магнитоупорядоченные кристаллы, такие как MnO, CoO, EuTe, EuSe, имеют гранецентрированную решетку, магнитное взаимодействие в которой описывается двумя обменными константами. При этом наблюдается очень интересное упорядочение спинов в этих кристаллах: они группируются в (1, 1, 1)-плоскости, и в пределах плоскости имеется ферромагнитный порядок. В соседних же плоскостях спины направлены противоположным образом, что говорит об антиферромагнитном порядке между плоскостями. Эти факты подтверждаются данными по нейтронному рассеянию [1]. Предполагается дать теоретическое объяснение такой структуре путем включения в эффективный гамильтониан дипольного взаимодействия, вычислив при этом константу анизотропии и щель в спектре.

1. *M. Kohgi, Y. Ishikawa, Y. Endoh. Solid State Communications, 11, 2 (1972).*

Моделирование методом Монте-Карло магнитной структуры аморфных сплавов редкоземельных металлов

А. В. Бондарев, И. Л. Батаронов, Ю. В. Бармин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Известно, что аморфные сплавы переходных и редкоземельных металлов при низких температурах обладают свойствами спинового стекла. Однако состояние спинового стекла в аморфных сплавах на основе редкоземельных металлов до сих пор недостаточно изучено, что вызывает необходимость изучения спиновых стекол на микроскопическом уровне методами компьютерного моделирования.

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфных сплавов Re-Tb в широком диапазоне составов, а также чистого аморфного Tb. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга были исследованы магнитные свойства построенных моделей.

Важной характеристикой спин-стекольного состояния является корреляционная функция спинов $G(r)$. Для модели аморфного Tb были построены функции $G(r)$ для различных значений отношения константы анизотропии к среднему значению интеграла обменного взаимодействия D/J_0 . При всех значениях D/J_0 функции $G(r)$ экспоненциально убывают с расстоянием, что характерно для спиновых стекол с большой случайной анизотропией.

Рассчитана зависимость длины корреляции от величины D/J_0 для аморфного Tb при $T = 1$ К. При $D/J_0 > 4$ эта зависимость является экспоненциально убывающей. В состоянии спинового стекла (при $D/J_0 > 8$) корреляции в расположении магнитных моментов атомов Tb распространяются всего на 2–3 межатомных расстояния.

Во всех моделях AC $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ при $x > 10$ атм. % при понижении температуры наблюдается переход из парамагнитного состояния в состояние спинового стекла. Сплавы с содержанием Tb $x = 5$ и 10 атм. % при всех температурах вплоть до $T = 1$ К остаются в парамагнитной фазе. Спиновые корреляционные функции для AC Re-Tb при $x > 10$ атм. % Tb экспоненциально убывают с расстоянием. В парамагнитном состоянии (при $x = 5$ и 10 атм. % Tb) функции $G(r)$ осциллируют вокруг нуля при всех значениях r .

Зависимость длины корреляции от концентрации атомов Tb линейная, что обусловлено линейным ростом константы анизотропии с увеличением концентрации атомов Tb.

Влияние граничных условий на неустойчивости и фазовые переходы формы в трубчатых липидных мембранах

И. Ю. Голушко¹, С. Б. Рошаль¹, А. Пармеджани², В. Л. Лорман²

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

² CNRS – Университет Монпелье 2, Лаборатория им. Шарля Кулона, Монпелье, Франция

В работе исследуются фазовые превращения в трубчатой липидной мембране (ТЛМ), связанные с появлением неустойчивости ее формы относительно критических термических флуктуаций при изменении внешних параметров системы. ТЛМ описывается свободной энергией [1]:

$$\Phi = \frac{k}{2} \int \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^2 dS + \sigma \int dS - \Delta P \int dV - FL,$$

где k – изгибная жесткость мембраны; R_1 и R_2 – главные радиусы кривизны флуктуирующей мембраны; σ – поверхностная энергия на единицу площади границы раздела; ΔP – разность внешнего и внутреннего давлений; L – длина ТЛМ; F – приложенная вдоль оси ТЛМ сила, а dV и dS – дифференциалы внутреннего объема и площади мембраны соответственно. Данная модель описывает поведение ТЛМ, вытягиваемой из везикулы и характеризуемой изменением внутреннего объема и ненулевой разностью давлений.

Предложенное исследование фазовых превращений в ТЛМ основано на результатах феноменологической теории фазовых переходов второго рода, в которой потенциал Ландау строится как полиномиальная функция от критических параметров порядка. Для расчета формы мембраны в слабозакритических областях предполагается, что основной вклад в изменение формы ТЛМ дают критические флуктуации, амплитуда которых расходится при приближении внешних параметров системы к границам устойчивости цилиндрической фазы, что существенно упрощает теорию.

В работе показано, что граничные условия сильно сказываются на критическом и слабозакритическом поведении рассматриваемой модели цилиндрической мембраны. В частности, ТЛМ с закрепленными концами имеет бóльшую область устойчивости, чем ТЛМ, рассматриваемая в приближении периодических граничных условий. Установлены условия, при которых ТЛМ приобретает хиральную спиралеобразную форму, ранее не обсуждавшуюся в литературе. Также обсуждаются три других обнаруженных варианта фазовых превращений в ТЛМ.

В. Л. выражает благодарность Labex NUMEV за финансовую поддержку. И. Г. и С. Р. признательны РФФИ за поддержку в виде гранта офи_м 13-02-12085.

1. S. Monnier, S. B. Rochal, A. Parmeggiani et al. Phys. Rev. Lett. V. 105, No. 2, 028102, 2010.

О динамическом торможении коротковолновых колебаний винтовой дислокации произвольной частоты

И. Л. Батаронов, В. В. Дежин

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Используя результаты работ [1, 2], получено выражение для мнимой части обратной обобщенной восприимчивости винтовой дислокации в диссипативном кристалле:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\mu b_s^2}{2\pi} \omega \int_{|k_z|}^{k_m} k dk \left\{ \frac{\gamma_t}{c_t^2 k^2} + \frac{1}{(c_t^2 k^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2 \gamma_t^2} \left(\frac{\omega^4 \gamma_t}{c_t^2 k^2} + 3k_z^2 c_t^2 \gamma_t - \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{4k_z^4 c_t^2 \gamma_t}{k^2} + \frac{12k_z^2 \omega^2 \gamma_t^3}{c_t^2 k^4} - \frac{16k_z^4 \omega^2 \gamma_t^3}{c_t^2 k^6} - \frac{6k_z^2 \omega^2 \gamma_t}{k^2} + \frac{8k_z^4 \omega^2 \gamma_t}{k^4} \right) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{(c_l^2 k^2 - \omega^2)^2 + 4\omega^2 \gamma_l^2} \left(4k_z^2 c_l^2 \gamma_l - \frac{4k_z^4 c_l^2 \gamma_l}{k^2} - \frac{16k_z^2 \omega^2 \gamma_l^2 \gamma_l}{c_l^2 k^4} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{16k_z^4 \omega^2 \gamma_l^2 \gamma_l}{c_l^2 k^6} - 8k_z^2 c_l^2 \gamma_l + \frac{8k_z^2 \omega^2 \gamma_t}{k^2} + \frac{8k_z^4 c_l^2 \gamma_t}{k^2} - \frac{8k_z^4 \omega^2 \gamma_t}{k^4} \right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Здесь μ – модуль сдвига кристалла, b_s – винтовая компонента вектора Бюргера дислокации, k – волновое число, k_z – компонента волнового вектора вдоль линии дислокации, k_m – максимальное волновое число, $\gamma_t(k)$ и $\gamma_l(k)$ – коэффициенты затухания поперечных и продольных звуковых волн, c_t и c_l – скорости поперечных и продольных звуковых волн в бездиссипативном кристалле, ω – частота. Проведен анализ этого выражения для случая электронного торможения, учитывая, что в коротковолновом пределе коэффициенты затухания пропорциональны k [3]. Найден вклад изгибных колебаний в динамическое торможение винтовой дислокации, который оказался сравним с основным вкладом от торможения прямолинейной дислокации.

1. *И.Л. Батаронов, В.В. Дежин, А.М. Рошупкин*. Изв. РАН. Сер. физическая. Т. 57. № 11. С. 97 (1993).
2. *А.М. Рошупкин, И.Л. Батаронов, В.В. Дежин*. Изв. РАН. Сер. физическая. Т. 59. № 10. С. 12 (1995).
3. *А.А. Абрикосов*. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987. 520 с.

Моделирование фазовых переходов в двухосных нематических жидких кристаллах с топологическими дефектами

Л. В. Ельникова

*Институт теоретической и экспериментальной физики
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Двухосные нематические жидкие кристаллы (НЖК) Nb находят широкое практическое применение в чувствительных элементах биомедицинских, химических, оптических датчиков и пр. благодаря их способности, сохраняя или изменяя структурную симметрию, менять ориентацию молекул в зависимости от слабых внешних термодинамических, электромагнитных и поверхностных механических воздействий, что приводит к изменению оптической анизотропии и др. физических свойств [1]. Для исследования образования и модификации структуры фаз в НЖК применяются методы поляризационной и флюоресцентной конфокальной оптической микроскопии, малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, механической спектроскопии, ЯМР и др. Примерами НЖК, образующими двухосную фазу, являются $DT_6Ru_6E_6$, коллоидные фазы органо-силоксановых соединений, 5CB, C7, C12, A131, литропный ЖК «лаурат калия / 1-деканол / вода» и пр.

Наблюдается, что фазовый переход из Nb в изотропную I и /или одноосную Nu фазы в таких системах сопровождается понижением размерности и трансформацией топологических дефектов [2]. Теория фазовых переходов в ЖК базируется на теории Ландау – де Жена (ЛдЖ) и Озеена – Франка, включающих модули упругости K_{ii} (поперечного изгиба, кручения, продольного изгиба, поверхностного сцепления). На основе этих представлений ряд задач с топологическими дефектами имеет аналитическое и численное решение, но из-за синтеза новых соединений с неизвестной дефектной структурой и различной симметрией он постоянно пополняется новыми.

В настоящей работе исследуется эволюция линейных и точечных дефектов дисклинаций и бужумов (рассматриваемых в виде струн и монополей квантовой теории поля) в коллоидных фазах Nb, образующихся при переходах в фазы последовательности Nu, I. Применяется метод решеточного Монте-Карло для гамильтониана на дифференциальных формах, полученного из действия $SO(3)$ функционала ЛдЖ, что позволяет классифицировать переходы $Nb \rightarrow Nu \rightarrow I$ и определять их критические параметры [3].

1. Y.-K. Kim, B. Senyuk, S.-T. Shin, A. Kohlmeier, G.H. Mehl, O.D. Lavrentovich. *Soft Matter* 10, 500 (2014).
2. M. Kleman and O.D. Lavrentovich. *Philosophical Magazine* 86, 4117 (2006).
3. L.V. Elnikova. *Solid State Phenomena* (2015) in press.

Абсолютный параллелизм и новая картина мира

И. Л. Жогин

Научно-производственное предприятие «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

Нынешняя картина мира включает теорию гравитации (ОТО) и Стандартную модель, описывающую негравитационные взаимодействия в рамках СТО. Картина далека от единства и нуждается в замене, и главной задачей считают квантование гравитации.

Фундаментальная теория (и содержательные феноменологии) должна быть нелинейной, чтобы включать взаимодействия. Но это ведет к проблемам: расходимости и бесконечностям в решениях.

Рост симметрий в квантовых теориях (до суперсимметрии) убирает расходимости в сколько-то-петлевом приближении, но не дальше. Переход к струнам меняет топологию диаграмм Фейнмана (нет особых точек взаимодействий), но за названием «теория струн» все еще (30 лет после 2-й струнной революции) скрывается лишь «программа», а не готовая теория.

Эйнштейн рассматривал также теорию абсолютного параллелизма (АП), где симметрия уравнений включает симметрии СТО и ОТО [1].

Единственное поле АП, поле матриц с одним латинским (СТО) и одним греческим (ОТО) индексом, выглядит невзрачно, но среди совместных уравнений второго порядка этого поля находится единственное, при единственном D , равном пяти ($D=4$ запрещено), в решениях которого сингулярности не возникают [2]. Эта теория готова и красива – из-за симметрии и отсутствия произвольных параметров. (Длина Планка появляется как составной параметр космологической части решения, связанный с размером по дополнительному измерению O_4 -симметричной продольной волны, бегущей по радиусу.)

Предлагать фундаментальную теорию с произвольным параметром(и) – это даже слегка неприлично, и экспериментаторам не стоило бы принимать такие теории! Пусть теоретики уточнят.

Анализируя логику этой теории, ее решений, приходим к картине мира, где частицы – это «топологическая надстройка» (нелинейные конфигурации поля переносят топологические (квази)заряды), с развитой комбинаторикой и ясным смыслом волновой функции (принципа суперпозиции) [3]. А новая гравитация (где нет темной материи/энергии) иначе, чем ОТО, описывает излучение гравитационных волн.

1. A. Einstein and W. Mayer. Systematische Untersuchung über kompatible Feldgleichungen, welche in einem Riemannschen Raume mit Fernparallelismus gesetzt werden können. Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., phys.-math. Kl, 1931, 257–265. (Einstein's Full Collection. 2, 353–365. Rus.)
2. I.L. Zhogin. Absolute parallelism, modified gravity, and suppression of gravitational 'short' waves. Proc. of PIRT-2011. Moscow, 2012. 337–346; arXiv: 1109.179.
3. I.L. Zhogin. Absolute parallelism and New Worldview, <http://vixra.org/abs/1412.0278>

Модель намагничения спинового полярона

С. В. Демишев^{1, 2}, Т. В. Ищенко¹

¹ Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия

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

Экспериментальные указания на существование спиновых поляронов (СП) в MnSi, которые представляет собой квазисвязанные состояния зонных электронов в окрестности ионов марганца, причем магнитные моменты Mn и локализованных электронов ориентированы антипараллельно, были получены в [1, 2]. Такая конструкция позволяет интерпретировать малую величину магнитного момента насыщения с учетом локализованного характера магнитного момента ионов Mn в MnSi, следующего из LDA-расчетов [3] и ЭПР-экспериментов [1, 2]. Анализ полевых зависимостей намагниченности $M(B)$ в парамагнитной фазе MnSi показывает, что кривые $M(B)$ характеризуются моментом насыщения $\sim 0,3$ мВ/Mn и эффективным магнитным моментом $\mu m^* \sim 5$ мВ [2] (последний параметр описывает «скорость» выхода зависимости $M(B)$ на насыщение). При этом значение μm^* существенно превышает величину локализованного магнитного момента (ЛММ) Mn, составляющую $\sim 1,2$ мВ [2, 3]. Для объяснения такого поведения предложена модель, в которой СП описывается двумя векторами намагниченности M_1 и M_2 , отвечающими локализованным электронам и ЛММ Mn. Предполагается, что для любого внешнего поля взаимодействия внутри спинового полярона обеспечивают параллельность M_1 и M_2 соответствующим локальным полям и нулевую проекцию суммы $M_1 + M_2$ на направление, перпендикулярное внешнему магнитному полю. Показано, что такая простая спиновая конфигурация, составленная из элементарных ЛММ \sim мВ, может одновременно обладать как малой величиной момента насыщения, так и большой величиной m^* , причем количественные оценки для MnSi находятся в хорошем согласии с экспериментом. Развитый подход открывает возможность последовательной интерпретации данных намагниченности у MnSi, не прибегая к представлениям зонной теории магнетизма [4].

Работа поддержана проектом РФФИ 13-02-00160 и программами РАН «Электронные корреляции в системах с сильным взаимодействием» и «Электронный спиновый резонанс, спин-зависимые электронные эффекты и спиновые технологии».

1. С.В.Демишев, и др. Письма в ЖЭТФ, т.93, в.4, стр.231–237 (2011).
2. S.V. Demishev, et al. Physical Review B 85, 045131 (2012).
3. M. Corti, et al. Physical Review B 75, 115111 (2007).
4. T. Moriya. Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, Springer-Verlag, 1985.

Сверхтекучий переход в $U(N)$ -ферми-системе

Г. А. Калагов, М. В. Компаниец, М. Ю. Налимов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследуется $U(N)$ -система фермионов со слабым межчастичным притяжением при конечных температурах методами ренормализационной группы. Ренормгрупповые функции вычислены в пятипетлевом приближении в рамках размерной регуляризации. Анализ показывает существование фазового перехода 1-го рода в системе при $N > 2$. Для оценки критической температуры, которая в данном случае не является универсальной, проведен РГ-анализ составных операторов в трехпетлевом приближении. Показано, что температура $U(N > 2)$ перехода 1-го рода превосходит температуру непрерывного перехода в $U(2)$ -системе. Результаты могут быть использованы для дальнейших исследований в области физики ультрахолодных фермиевских газов.

1. Г. А. Калагов, М. Ю. Налимов, М. В. Компаниец. ТМФ. 2014. Т. 181. № 2. С. 374.
2. М. В. Комарова, М. Ю. Налимов, Ю. Хонконен. ТМФ. 2013. Т. 176. № 1. С. 89.

Two-Electron Impurity in the Parabolic Quantum Dot: Uncertainty Relation and Perturbation Approach

H. Ts. Ghaltaghchyan

Russian – Armenian (Slavonic) University, Yerevan, Armenia

The study of hydrogenic impurity states in semiconductor nanostructures has been initiated in recent years through the pioneering work of Bastard [1]. A number of theoretical investigations of hydrogenic impurity states in low dimensional semiconductors has been published [2, 3]. In the paper [4] the binding energy of hydrogenic impurity states in spherical QD has been studied using the variational method. Later, the same author calculated the binding energies of the hydrogenic impurity states in spherical QDs with parabolic confinement by using the perturbation method [5]. The impurity effect in a two-electron quantum dot with parabolic confinement in the framework of diagonalization method has been discussed in [6]. Also, the impurity effects on auto-ionizing two-electron resonances in spherical QD have been studied in [7]. The ground state energies of the hydrogen-like impurity in a lens-shaped QD have been calculated using the variational method in [8]. The two-electron bunching in transport through a QD associated with Kondo correlations has been investigated [9].

The investigation was dedicated to two-electron impurity states in parabolic confinement. We have estimated the ground-state energy value, using the Heisenberg uncertainty relation. Using variational methods the ground state energy and wave function of the single-electron impurity problem have been achieved. The dependence of ground-state energy and Coulomb electron-electron interaction energy correction on the QD size is studied. We show that the total energy of the system can be both positive and negative. The dependence of the state exchange time on the QD radius has been calculated in the Russell–Saunders approximation. It has been shown that the presence of the impurity leads to the appearance negative values of the energy of the system on the one hand, and to the saturating character of the state exchange time.

1. *G. Bastard*. Phys. Rev. B, 59, pp. 4714 (1981).
2. *V. Nguyen, M. Nguyen*. J. Phys.: Condens. Matter, 13, pp. 2563 (2001).
3. *N. Raigoza, A.L. Morales, A. Montes, N. Porrás-Montenegro, C.A. Duque*. Phys. Rev. B, 69 (2004) 045323.
4. *C. Bose*. Journal of Applied Physics 83, pp. 3089–3091 (1998).
5. *C. Bose*. Physica E 4 p 180–184 (1999).
6. *W. Xie*. Physica B: Physics of Condensed Matter, 334, p. 317–322 (2013).
7. *M. Genkin, E. Lindroth*. Physical Reviews B, 81 (2010).
8. *X. Zeng, J.Chang, P. Zhou*. International Journal of Modern Physics B, 18, pp. 2529–2533 (2004).
9. *O. Zarchin, M. Zaalon, M. Heiblum, D. Mahalu, V. Umansky*. Physical Review B, 77 (2008).

Формирование додекагональных квазикристаллических структур на сферических подложках

О. В. Коневцова¹, С. Б. Рошаль¹, В. Л. Лорман²

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

² Университет Монпелье 2, Монпелье, Франция

Мы предлагаем способ получения сферических наноструктур и метаматериалов с локальным додекагональным квазикристаллическим порядком и развиваем теорию, позволяющую определить их возможную структурную организацию. Наш подход связан, с одной стороны, с физикой сферических коллоидных кристаллов и коллоидосом, а с другой стороны, с принципами расположения белков в капсидах сферических вирусов с икосаэдрической симметрией. Мы рассматриваем процесс формирования квазикристаллических сферических структур как гладкое покрытие сферической подложки тонкой квазикристаллической пленкой. Исследуется, как можно незначительно перестроить реальные плоские додекагональные структуры, интерпретируемые в рамках известных додекагональных укладок так, чтобы они стали совместимыми со сферической геометрией. Установлена аналогия между процессами формирования коллоидных сферических кристаллов и самосборкой случайных структур с локальным додекагональным порядком на сферической подложке. Также рассматриваются формирования наиболее кристаллографически совершенных структур с локальным додекагональным порядком. Минимизация дополнительной энергии, необходимой для гладкого покрытия сферической подложки исходно плоским порядком, определяет количество и порядок расположения дисклинаций в этих структурах. Показано, что расположение 24 эквивалентных тридцатиградусных дисклинаций в вершинах курносого куба является наиболее энергетически выгодным.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-02-12085офи_м).

В. Л. благодарит за поддержку Laboratory of Excellence NUMEV.

***Ab initio* расчеты оптических характеристик в параэлектрической и сегнетоэлектрической фазах $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$**

А. А. Лаврентьев, Б. В. Габрельян, В. Т. Ву, П. Н. Шкумат

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

Ab initio проведен квантово-механический расчет электронно-энергетической структуры (ЭЭС) в фосфорсодержащем сульфиде $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. Парциальные плотности электронных состояний, рассчитанные с помощью программного пакета WIEN2k [1], хорошо соответствуют своим экспериментальным аналогам, полученным ранее: рентгеновским K - и $L_{2,3}$ -спектрам серы и фосфора. В программном пакете WIEN2k расчеты ЭЭС проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) модифицированным методом присоединенных плоских волн (APW + LO). Использовался полный потенциал, зависящий от орбитального момента не только внутри, но и вне атомных сфер. В расчете использовался модифицированный потенциал Беке – Джонсона (mBJ) [2], который позволил получить хорошее согласие расчетной оптической запрещенной полосы 2,054 эВ для парафазы $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, 2,189 эВ для сегнетофазы с экспериментальным значением $E_g = 2,2$ эВ [3].

На основе рассчитанной ЭЭС для $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ были вычислены комбинированная плотность состояний (JDOS) и матричные элементы вероятности перехода электрона между валентной зоной и зоной проводимости, что дало возможность рассчитать диагональные компоненты $\epsilon^{xx}(\omega)$, $\epsilon^{yy}(\omega)$ и $\epsilon^{zz}(\omega)$ мнимой части диэлектрического тензора второго ранга вдоль кристаллографических осей \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} . Расчеты проводились как для параэлектрической, так и для сегнетоэлектрической фаз соединения $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$.

Действительная часть диэлектрической функции $\epsilon_1(\omega)$ была получена из мнимой части $\epsilon_2(\omega)$ с помощью соотношения Крамерса – Кронига. Все другие оптические характеристики, такие как коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$, показатель преломления $n(\omega)$, коэффициент экстинкции $k(\omega)$, оптический коэффициент отражения $R(\omega)$ и спектр энергетических потерь $L(\omega)$, были выведены из $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$. Оптические характеристики в парафазе и сегнетофазе $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ получились весьма близкими.

1. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J. WIEN2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. – Karlheinz Schwarz, Austria, Techn. Universität Wien (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
2. Koller D., Tran F., Blaha P. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. 155109.
3. Гурзан М.И., Бутурлакин А.П., Герасименко В.С., Корда Н.Ф., Сливка В.Ю. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 10. С. 3068–3070.

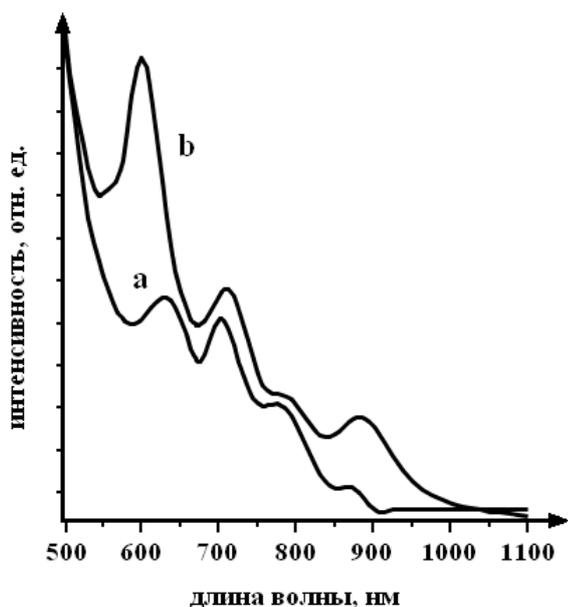
Энергетический спектр и спектры оптического поглощения изомеров фуллерена C₈₂

Б. В. Лобанов, А. И. Мурзашев

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

Известно [1], что атомы углерода в составе фуллеренов находятся в sp^2 -гибридизированном состоянии. В то время как три гибридные орбитали формируют жесткие связи между соседними атомами, четвертая, негибридная, орбиталь образует так называемые блуждающие π -связи. Электроны этих связей могут перескакивать на соседние узлы; два электрона, оказавшись одновременно на одном узле, испытывают кулоновское отталкивание. Исследование [2] показало, что локальное кулоновское взаимодействие в углеродных системах может быть велико (порядка 10 эВ). Поэтому для описания π -электронов в фуллеренах с учетом перескоков и кулоновского взаимодействия уместно применять модель Хаббарда.

В рамках модели Хаббарда, рассматриваемой в приближении статических флуктуаций, можно получить энергетический спектр π -электронной подсистемы, из которого нетрудно рассчитать спектр оптического поглощения. Такой подход позволил ранее объяснить спектры оптического поглощения ряда фуллеренов [3–5]. В настоящей работе рассчитаны энергетические спектры девяти изомеров фуллерена C₈₂, удовлетворяющих правилу изолированных пятиугольников. Для некоторых изомеров, которые были получены и охарактеризованы экспериментально [6], проведено сравнение расчетных спектров поглощения с экспериментальными данными. Например, для эндоэдрального комплекса Er₂C₂@C₈₂ на основе изомера № 9 (рис.) обнаруживается качественное согласие теории и эксперимента.



Спектр оптического поглощения
эндоэдрального соединения Er₂C₂@C₈₂:
а – экспериментальный спектр [6];
б – спектр поглощения, рассчитанный
теоретически

1. Л.Н. Сидоров, М.А. Юровская, А.Я. Борщевский, И.В. Трушков, И.Н. Иоффе. Фуллерены: Учебное пособие. М.: Экзамен, 2005. 688 с.
2. T.O. Wehling, E. Şaşioğlu, C. Friedrich, A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, S. Blügel. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite // Phys. Rev. Lett. 2011. No 23 (106). P. 236805.
3. Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. Энергетический спектр фуллерена C₆₀ // Физика твердого тела. 2011. № 11 (53). С. 2273–2277.
4. А.И. Мурзашев. Энергетический спектр и оптические переходы в фуллерене C₇₀ // Известия ВУЗов. Физика. 2012. № 5 (55). С. 49–55.
5. Б.В. Лобанов, А.И. Мурзашев. Энергетический спектр и оптические переходы в изомерах фуллерена C₈₀ // Физика твердого тела. 2013. № 4 (55). С. 797–805.
6. Y. Ito, T. Okazaki, S. Okubo, M. Akachi, Y. Ohno, T. Mizutani, T. Nakamura, R. Kitaura, T. Sugai, H. Shinohara. Enhanced 1 520 nm Photoluminescence from Er³⁺ Ions in Di-Erbium-Carbide Metallofullerenes (Er₂C₂)@C₈₂ (Isomers I, II, and III) // ACS Nano. 2007. No 5 (1). P. 456–462.

Корреляционные эффекты в многократном малоугловом рассеянии нейтронов на поверхностных слоях неоднородностей

Д. В. Львов^{1,2}, Е. В. Грубова³, Ф. С. Джепаров^{1,2}

¹ *Институт экспериментальной и теоретической физики*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия

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

³ *Опытное конструкторское бюро «Гидропресс», Подольск, Россия*

Метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) относится к числу основных неразрушающих методов исследования конденсированных сред. При работе с твердотельными материалами часто невозможно изготовить достаточно тонкие образцы при необходимости сохранения их целостности. В таком случае используют толстые образцы, и рассеяние является многократным. На практике часто реализуется ситуация, когда концентрация рассеивателей невелика и вклад интерференции незначителен. При этом для обработки результатов используется теория Мольер [1]. Однако, как было показано в работах [2, 3], при немалой концентрации неоднородностей корреляции в их пространственном положении оказывают существенное влияние на угловое распределение при многократном малоугловом рассеянии нейтронов (ММУРН). С другой стороны, важно учитывать, что поверхностные слои неоднородностей могут иметь другой состав, чем неоднородность в целом. В работе [3, 4] в рамках теории Мольер, верной при малой концентрации рассеивающих центров, было проведено исследование ММУРН на поверхностных слоях неоднородностей. Было показано, что поведение ММУРН на тонких поверхностных слоях существенно отличается от ММУРН на гранулах.

В данной работе мы применили теорию [4], учитывающую межчастичную интерференцию в ММУРН, к рассеянию на поверхностных слоях неоднородностей. Учитывая, что многократное рассеяние обычно реализуется на достаточно крупных неоднородностях, которые изучаются с помощью двухкристального дифрактометра, проведен расчет интенсивности ММУРН с учетом инструментальной линии этого прибора. Проанализированы результаты моделирования для двух толщин слоев для кратностей рассеяния 5 и 10. Сделаны выводы о влиянии корреляций на линию ММУРН.

1. С.В. Малеев, Б.П. Топерверг. ЖЭТФ. **78**, 315 (1980).

2. Ю.Г. Абов, Ф.С. Джепаров, Н.О. Елютин и др. Письма в ЖЭТФ. **78**, 1011 (2003).

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

4. Д.В. Львов, Е.В. Ракиун. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 8, 51 (2008).

Матричный метод расчета дифференциальных операторов физических величин при замене переменных

М. Д. Матасов

Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия

Рассмотрим частицы, находящиеся в поле кулоновского потенциала, сферически симметричных сил, зависящих только от расстояния между частицами, волновая функция системы зависит от шести независимых переменных, т. е. от координат частиц:

$$\Psi = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \Psi(x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23}), \quad (1)$$

Уравнение Шредингера на собственные значения [1, 2], описывающее поведение волновой функции (1) системы, состоящей из двух частиц, имеет вид

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_1} (\nabla_{D_1} \nabla_{D_1}) + \frac{-\hbar^2}{2m_2} (\nabla_{D_2} \nabla_{D_2}) + U(\rho) \right\} \Psi = E\Psi,$$

где $\rho = |\bar{r}_2 - \bar{r}_1|$ – расстояние между частицами, $U(\rho)$ – потенциальная энергия $(\nabla_{D_1} \nabla_{D_1}) = \Delta_1$, $(\nabla_{D_2} \nabla_{D_2}) = \Delta_2$.

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left\{ \frac{1}{m_1} \Delta_1 + \frac{1}{m_2} \Delta_2 \right\} \Psi + U(\rho)\Psi = E\Psi,$$

$$\bar{\rho} = \bar{r}_2 - \bar{r}_1, \quad (2)$$

$$\bar{R} = \frac{m_1 \bar{r}_1 + m_2 \bar{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (3)$$

В скалярной форме замена переменных (2), (3) выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \rho_1(x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23}) = x_{21} - x_{11} \\ \rho_2(x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23}) = x_{22} - x_{12} \\ \rho_3(x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23}) = x_{23} - x_{13} \end{cases}$$

$$\begin{cases} R_1 = \frac{m_1 x_{11} + m_2 x_{21}}{m_1 + m_2} \\ R_2 = \frac{m_1 x_{12} + m_2 x_{22}}{m_1 + m_2} \\ R_3 = \frac{m_1 x_{13} + m_2 x_{23}}{m_1 + m_2} \end{cases}$$

Основной трудностью при переходе в систему отсчета, связанную с центром инерции, является преобразование операторов Лапласа по координатам первой и второй частицы. Используя формулу

$$(\nabla_{e_i} \nabla_{e_i}) = \left[\frac{D(\varphi_1, \dots, \varphi_k, \dots, \varphi_{3N})}{D(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})} \frac{D(\quad)}{D(\varphi_1, \dots, \varphi_k, \dots, \varphi_{3N})} \right]^T \left(\frac{D(\varphi_1, \dots, \varphi_k, \dots, \varphi_{3N})}{D(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})} \frac{D(\quad)}{D(\varphi_1, \dots, \varphi_k, \dots, \varphi_{3N})} \right),$$

преобразуем выражение $\left\{ \frac{1}{m_1} \Delta_1 + \frac{1}{m_2} \Delta_2 \right\} \Psi(x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23})$.

Запишем матрицу производных по координатам первой частицы

$$\frac{D(\rho_1, \rho_2, \rho_3, R_1, R_2, R_3)}{D(x_{11}, x_{12}, x_{13})} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & \frac{m_1}{m_1 + m_2} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{m_1}{m_1 + m_2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{m_1}{m_1 + m_2} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

матрицу производных по координатам второй частицы:

$$\frac{D(\rho_1, \rho_2, \rho_3, R_1, R_2, R_3)}{D(x_{21}, x_{22}, x_{23})} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Матрицы производных по координатам частиц, приведенные в (4), (5), не зависят от переменных $(\rho_1, \rho_2, \rho_3, R_1, R_2, R_3)$. Оператор Лапласа станет

$$\Delta_i = \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right)^T \left(\frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})} \frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})} \right) \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right). \quad (6)$$

Произведение матриц в центре выражения (6) обозначим за отдельную матрицу L и назовем ее L -матрицей.

Основываясь на выражении (6), преобразуем операторы Лапласа для первой и второй частиц:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_1} \Delta_1 + \frac{1}{m_2} \Delta_2 &= \frac{1}{m_1} \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right)^T L_1 \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right) + \\ &+ \frac{1}{m_2} \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right)^T L_2 \left(\frac{D(\cdot)}{D(\rho_1, \dots, R_3)} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где $L_1 = \frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{11}, x_{12}, x_{13})} \frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{11}, x_{12}, x_{13})}$, $L_2 = \frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{21}, x_{22}, x_{23})} \frac{D(\rho_1, \dots, R_3)}{D(x_{21}, x_{22}, x_{23})}$.

Выполнив произведения соответствующих матриц производных по координатам (4), (5), получим:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{-m_1}{m_1 + m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{-m_1}{m_1 + m_2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{-m_1}{m_1 + m_2} \\ \frac{-m_1}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-m_1}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-m_1}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \end{pmatrix},$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} \\ \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & 0 & 0 & \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \end{pmatrix}.$$

Подставим матрицы L_1, L_2 в (7) и проведем преобразования. В процессе вычисления Δ_1, Δ_2 получаем произведение матриц.

Выполнив матричные умножения и приведя подобные, мы получим окончательный ответ:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_1} \Delta_1 + \frac{1}{m_2} \Delta_2 &= \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_3^2} \right) + \\ &+ \frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial R_3^2} \right) = \frac{1}{\mu} \Delta_\rho + \frac{1}{M} \Delta_R, \end{aligned}$$

где $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $M = m_1 + m_2$. Применяя разработанную в данной работе теорию, нам удалось успешно и достаточно лаконично преобразовать переменные в операторе Лапласа при переходе в систему координат, связанную с центром инерции.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 14-12-00275) и Саратовского государственного университета им. Н. Г. Чернышевского.

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: учеб. пособие для студентов вузов : В10 т. Т. 2. Теория поля / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. 8-е изд., стереот. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 536 с.
2. Усанов Д.А. Многочастичные квантовые эффекты в физике твердого (экситон, квантовые эффекты Холла, сверхпроводимость): учеб. пособие для студентов / Д. А. Усанов, С.Г. Сучков. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2007. 116 с.

Стабильность скирмиона и взаимодействие магнонов

Д. Н. Аристов^{1,2}, П. Г. Матвеева^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

В настоящее время активно исследуются топологические дефекты в магнетиках. Вопросы поведения во внешних полях, стабильности и других физических свойств дефектов играют важную роль при разработке и создании новых видов памяти [1]. Примерами дефектов могут служить различного рода доменные стенки, спиновые спирали, а также вихревые образования – скирмионы, представляющие собой кольцевидную структуру с противоположными направлениями спинов на границе и в центре [2].

Ранее в работе [3] нами был исследован спектр магнонов в ферромагнетике со скирмионом. Центральным результатом работы является гамильтониан для магнонов, записанный в рамках представления Дайсона – Малеева:

$$\hat{H} = -\nabla^2 - \frac{4}{r^2 + r_0^2} L_z + 4 \frac{r^2 - r_0^2}{(r^2 + r_0^2)},$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_z^2}{r^2}, L_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Это уравнение характеризуется тремя нулевыми (голдстоуновскими) модами, показывающими нарушение дополнительных симметрий системы, по сравнению с изотропным ферромагнетиком. На этом уровне рассмотрения скирмион формально стабилен.

Однако известно, что скирмион в отсутствие внешних полей и других взаимодействий является метастабильным образованием. В связи с этим возникает задача о возможности распада скирмиона по причине взаимодействия магнонов. В частности, стоит вопрос о величине и значимости поправок к собственно-энергетической части магнонной функции Грина, происходящих от части гамильтониана с взаимодействием (невыписанной выше).

Следует отметить, что сходный анализ был проведен ранее [4] без учета взаимодействия магнонов.

1. A. Fert, V. Cros and J. Sampaio. Nature Nanotechnology, 8, 152 (2013).
2. N. Nagaosa and Y. Tokura. Nature Nanotechnology, 8, 899 (2013).
3. D.N. Aristov, S.S. Kravchenko and A.O. Sorokin. arXiv:1411.2452.
4. C. Schütte and M. Garst. Phys. Rev. B 90, 094423 (2014).

Влияние постоянных электрического и магнитного полей на диэлектрические характеристики керамики $\text{Bi}_{0,6}\text{La}_{0,4}\text{MnO}_3$

А. В. Махиборода¹, А. В. Павленко^{1,2}, А. В. Турик¹, Л. А. Резниченко¹

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

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

Целью настоящей работы являлось установление закономерностей формирования при температуре $T = 80$ К под влиянием постоянных электрического и магнитного полей диэлектрических характеристик керамики $\text{Bi}_{0,6}\text{La}_{0,4}\text{MnO}_3$ (BLM-60), обладающей максимальным значением температуры ферромагнитного перехода по сравнению с другими твердыми растворами системы $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$.

Анализ частотных зависимостей действительной части $\varepsilon'/\varepsilon_0(f)$ комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*/\varepsilon_0 = \varepsilon'/\varepsilon_0 - i\varepsilon''/\varepsilon_0$ (ε_0 – электрическая постоянная, $\varepsilon''/\varepsilon_0$ – мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости) и тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg } \delta(f)$ керамики BLM-60, полученных в диапазоне $f = (10^2 \div 10^6)$ Гц в отсутствии магнитного и электрического полей, показал, что в материале наблюдается суперпозиция вкладов нескольких релаксационных процессов, каждый из которых приоритетен в своей области частот. Приложение к образцу постоянного магнитного поля с индукцией $B = 0,86$ Тл приводило к увеличению $\varepsilon'/\varepsilon_0$ во всем диапазоне частот, при этом $\text{tg } \delta$ при $f < 4 \cdot 10^3$ Гц уменьшался, а при $f > 4 \cdot 10^3$ Гц – возрастал. Приложение к образцу постоянного электрического поля с напряжением $U = 40$ В приводило к росту $\varepsilon'/\varepsilon_0$ и снижению $\text{tg } \delta$ при $f < 5 \cdot 10^2$ Гц, тогда как в остальной области частот изменений не наблюдалось. Одновременное приложение к образцу электрического и магнитного полей приводило к медленному росту величины $\varepsilon'/\varepsilon_0$, резкому скачку $\text{tg } \delta$ при $f < 5 \cdot 10^2$ Гц и полному совпадению вышеуказанных зависимостей в остальной области частот с кривыми $\varepsilon'/\varepsilon_0(f)$ и $\text{tg } \delta(f)$, полученными при $B = 0,86$ Тл.

В работе обсуждаются возможные причины наблюдаемых эффектов с позиций одновременного проявления эффектов максвелл-вагнеровской поляризации и магнетосопротивления, присутствия в структуре катионов Mn^{3+} и Mn^{4+} и специфики реальной (дефектной) структуры объектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая и проектная части гос. задания: проект № 1927, тема № 213.01-2014/012-ВГ, 3.1246.2014/К) и ФЦП (соглашение № 14.575.21.0007).

Ренормгрупповой анализ туннельного контакта квантовых проволок с взаимодействием: геликальные состояния и неопределенность

Д. Н. Аристов, Р. А. Ниязов

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

Долгое время одномерные системы со взаимодействующими фермионами были игрушечной моделью для физиков-теоретиков. Но в последние 20 лет существенные успехи в технологиях привели к использованию этих моделей для описания экспериментальной физики на наномасштабах. Такие квазиодномерные объекты включают в себя углеродные нанотрубки, цепочки металлических атомов и одномерные краевые состояния в топологических изоляторах. Можно ожидать, что одномерные проводники и их контакты будут необходимым слагаемым любого будущего электронного прибора. Поэтому изучение прозрачности (кондактанса) стыка таких нитей является сегодня важной теоретической задачей.

Для этого нами был разработан фермионный подход [1] с использованием S -матрицы, и было показано, что он имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционным подходом бозонизации. Из-за сложности вычислений фермионный подход был использован для изучения стыка двух и трех полунитей. Переход к стыку четырех полунитей позволяет включить в описание фермионов спин для случая контакта двух полунитей. В этом случае, кроме того, возникает качественно новое явление – неопределенность в ренормгрупповых потоках [2]. Еще одна интересная система, в которой реализуется такой стык, – это точечный контакт геликальных краевых состояний двух топологических изоляторов. Рассмотрение этого случая с учетом старших порядков теории возмущений ранее не проводилось.

1. *D.N. Aristov, P. Wölfle. Phys. Rev. B 80, 045109 (2009).*
2. *D.N. Aristov, R.A. Niyazov. Submitted to Theor. Math. Phys.*

Циклотронный резонанс в графене

А. Ю. Озерин

Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия

Электронный спектр графена в магнитном поле является неэквидистантным. Благодаря этому при некоторых условиях возможно наблюдение множественного (multi-mode) внутризонного циклотронного резонанса.

В работе исследуется динамическая проводимость графена при разных соотношениях температуры, столкновительного уширения уровней и магнитного поля.

Приведены характерные особенности квазиклассического случая, когда переходы неразличимы.

1. *M. Orlita et al.* New J. Phys. V. 14. P. 095008 (2012).
2. *Л.А. Фальковский.* УФН Т. 182. С. 1223–1228 (2012).
3. *А.Ю. Озерин.* Письма в ЖЭТФ. Т. 98. Вып. 12. С. 943–946 (2013).

Применение молекул-тестов для определения структуры комплексов на поверхности твердого тела при адсорбции

С. Н. Петров, А. А. Цыганенко

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Одной из ключевых характеристик поверхности твердого тела является распределение на ней поверхностных центров: атомов, групп и т. п. Положение полос в ИК-спектрах адсорбированных молекул-тестов (таких как СО и N₂) не всегда дает прямую информацию о том, какие существуют центры на поверхности твердого тела. Выводы о том, какая полоса соответствует взаимодействию адсорбированной молекулы с тем или иным атомом, основывались на температурном поведении полос. Вместе с тем данные о геометрии поверхностного комплекса можно получить, используя изменение частот при изотопном замещении. Этот метод позволяет найти композицию и геометрию поверхностных комплексов адсорбированных молекул СО [1, 2] или озона [3]. Так, для молекулы СО, адсорбированной на цеолитах [4], две полосы валентных колебаний были отнесены к С- и О-связанным формам. Для адсорбированной HCN могут существовать две изомерные формы для координационно связанной молекулы и иона CN⁻, возникающие как результат диссоциации HCN.

Известно, что цеолиты типа Zn-Y, Cs-X и другие, полученные методом катионного обмена из Na-X, обладают набором центров, характеризующих адсорбцию на катионах натрия, цинка или цезия. Идентифицировать то, в какой степени произошло замещение, может рентгеноструктурная дифрактограмма. Но более точным методом является ИК-спектроскопия. В данной работе были получены цеолиты Zn-Y и Cs-X из порошка Na-X. Определение положения полос, адсорбированной молекулы-зонда СО дало возможность понять, какие катионы присутствуют на поверхности и в какой конфигурации с ними находится СО.

1. A. A. Tsyganenko, E. Escalona Platero, C. Otero Arean, E. Garrone and A. Zecchina. *Catalysis Letters*, 61, 187–192 (1999).
2. A. A. Tsyganenko, A. M. Chizhik and A. I. Chizhik. *PCCP* 12, 6387–6395 (2010).
3. J. Sunhee Kim, D. C. Sorescu, and J. T. Yates, Jr. *J. Phys. Chem. C*, 111, 5416–5425 (2007).
4. A. A. Tsyganenko, P. Yu. Storozhev, and C. Otero Areán. *Kinetics and Catalysis*, Vol. 45, No. 4, 530–540 (2004).

Квантово-химическое моделирование точечных и парных радиационных дефектов в корунде

А. В. Платоненко, С. Н. Пискунов, Ю. Ф. Жуковский, Е. А. Котомин

Институт физики твердого тела Латвийского университета, Рига, Латвия

Корунд ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) является важным радиационно-стойким материалом, перспективным для применения его в компонентах диагностики, размножителях и в качестве покрытия в будущих реакторах термоядерного синтеза [1]. Изменения оптических и структурных свойств корунда под воздействием радиации связаны, главным образом, с образованием кислородных вакансий V_{O} и мигрирующих в решетке $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ атомов кислорода, выбитых из регулярной O -подрешетки, а также комплементарных пар Френкеля ($\text{O}_i + V_{\text{O}}$) [2] и H -центра ($\text{O}_i + \text{O}_{\text{reg}}$) [3].

Для моделирования дефектной структуры кристалла корунда использовались квантово-химические расчеты из первых принципов методом Линейной комбинации атомных орбиталей в рамках программы CRYSTAL14 [4]. Для проведения расчетов был выбран обменно-корреляционный потенциал ВЗРВ [5] и оптимизированы базисные функции атомов. В итоге были получены результаты, качественно согласующиеся с экспериментальными данными.

Проведено моделирование первоначально нейтральных точечных дефектов (междоузельного атома и вакансии), а также френкелевой пары ($d_{\text{O}_i - V_{\text{O}}} = 4,4 \text{ \AA}$) и H -центра ($d_{\text{O}_i - \text{O}_{\text{reg}}} = 1,4 \text{ \AA}$). Для моделирования нами была выбрана $2 \times 2 \times 1$ суперячейка кристалла, состоящая из 120 атомов. Были оценены энергии образования дефектов, 4,2 эВ и 7,6 эВ для междоузельного атома и вакансии соответственно, изменения электронной плотности и возмущение, вносимое дефектами в кристаллическую структуру корунда. Было обнаружено, что междоузельный атом кислорода стремится образовывать гантельную пару (O) с регулярным атомом кислорода. Подобное поведение атома кислорода наблюдалось также в MgO [3]. Суммарный заряд H -центра равен $1,1 e$. Полученные результаты будут использованы для последующих расчетов диффузии дефектов и кинетической модели.

Работа частично поддержана проектом EUROfusion.

1. *F. Mota, C.J. Ortiz, R. Vila, N. Casal, A. Garcia, and A. Ibarra.* J. Nucl. (2013).
2. *P.W.M. Jacobs and E.A. Kotomin.* J Amer Ceram Soc 77, 2505 (1994).
3. *T. Brudevoll, E.A. Kotomin, and N.E. Christensen.* Phys Rev B 53, 7731 (1996).
4. *R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C.M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell, M. Causá, and Y. Noël.* CRYSTAL14 User's Manual (University of Torino), 2014.
5. *A.D. Becke.* J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993).

Разменные эффекты при формировании электронной структуры наноматериалов на основе Ag, PbS и ZnO

А. Ю. Рашковский^{1,2}, А. И. Ковалев¹, Д. Л. Вайнштейн¹

¹ *Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И. П. Бардина, Москва, Россия*

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

Методами электронной спектроскопии установлено и систематически исследовано физическое явление «размерный сдвиг электронных уровней» – увеличение энергии связи электронов в атомах металлов (Ag, Pb, Zn) и их соединений (PbS, ZnO) при уменьшении размеров структурного элемента. На основании экспериментальных данных о «размерном сдвиге» для нанокристаллов PbS и тонких пленок ZnO и Ag установлены зависимости «размерного сдвига» внутренних электронных уровней от величины дисперсности наноструктуры в широком диапазоне характерных размеров (от 5 нм до 400 нм). Математическим анализом полученной эмпирической зависимости установлено, что трансформация электронной структуры серебра и соединений PbS и ZnO в различных морфологических состояниях определяется минимальным размером структурного элемента: для нанопроволок ZnO это диаметр проволоки, для пленок ZnO и покрытий с Ag слоями в многослойном покрытии TiAlN/Ag – толщина слоя, для полиэдрических нанокристаллов PbS – диаметр кристалла в матрице либо размер 2D наноагломератов более дисперсных наночастиц.

Определены пороговые значения $D_0(\text{PbS}) \approx 270\text{--}430$ нм; $D_0(\text{ZnO}) \approx 106$ нм; $D_0(\text{Ag}) \approx 150$ нм и $D_q(\text{PbS}) \approx 156$ нм; $D_q(\text{ZnO}) \approx 21$ нм; $D_q(\text{Ag}) \approx 23,5$ нм дисперсности исследованных материалов в виде нанокристаллов, нанонитей, нанопленок и тонких прослоек, при которых зарождается эффект «размерного сдвига» (D_0) и происходит смена механизма трансформации электронной структуры с «классического» на «квантово-размерный» (D_q). Установлено и показано соответствие между параметром D_q и проявлением аномальных физических свойств для нанослоев Ag и тонких пленок ZnO: теплопроводности и фотолюминесценции соответственно.

Симметричный анализ линейных дифференциальных уравнений в частных производных

В. Н. Робук

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Содержание лекций по существу сводится к рассмотрению с практической точки зрения двух вопросов.

1. Как вычислить операторы симметрии для линейного дифференциального уравнения в частных производных и для систем таких уравнений?
2. Как вычислять аналитические решения этих уравнений и систем уравнений с помощью соответствующих операторов симметрий.

В частности, для линейных уравнений и систем линейных уравнений эволюционного типа симметричный анализ рассмотрен в контексте задачи Коши. Приведен ряд аналитических решений нового типа.

Конкуренция атомных масштабов как механизм стеклования и квазикристаллизации

Р. Е. Рыльцев¹, Н. М. Щелкачев², Б. А. Клумов³, В. Н. Рыжов⁴

¹ *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва, Россия*

³ *Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

⁴ *Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Москва, Россия*

В последние годы было обнаружено, что многие сложные эффекты в конденсированных системах могут быть качественно объяснены наличием двух характерных масштабов в потенциале межчастичного взаимодействия. Потенциалы, обладающие таким свойством, возникают при построении эффективных взаимодействий в металлических сплавах, жидкостях с направленными связями, коллоидных системах. Было показано, что конкуренция между масштабами может приводить к полиморфизму, водоподобным аномалиям и стекольной динамике [1]. Известно, что многие эффекты в плотных конденсированных системах обусловлены отталкивающей частью межчастичного потенциала. Более того, многие системы (например, коллоидные частицы, стабилизированные полимерами) имеют чисто отталкивающее эффективное взаимодействие. В этой связи является интересным исследование конкуренции между масштабами на процессы структурообразования и динамические свойства в системе с отталкивающим потенциалом.

Методом молекулярной динамики мы показываем, что, в зависимости от соотношения между характерными межчастичными расстояниями и их эффективной концентрации, однокомпонентная система с двухмасштабным отталкивающим потенциалом может демонстрировать различные динамические и структурные свойства при квазиравновесном охлаждении. В некоторых случаях фрустрации, обусловленные конкуренцией масштабов, подавляют кристаллизацию, и наблюдается стекольное поведение, сопровождаемое экстремально большими отклонениями температурных зависимостей транспортных свойств от закона Аррениуса [1]. В других случаях наличие второго масштаба стабилизирует локальный икосаэдрический порядок, что приводит к переходу из жидкости в фазу декагонального квазикристалла [2]. Возможно также образование разнообразных кристаллических структур с нетривиальной для простых однокомпонентных систем симметрией.

Работа поддержана РФФ (грант № 14-13-00676).

1. R. Ryltsev, N. Chtchelkatchev, V. Ryzhov. Phys. Rev. Lett. 110, 025701 (2013).

2. R. Ryltsev, B. Klumov, and N. Chtchelkatchev. <http://arxiv.org/abs/1410.7294> (2014).

Кожа человека как фильтр нижних частот для тепловых волн

*А. А. Сагайдачный, А. В. Скрипаль, Д. А. Усанов,
И. Ю. Волков, А. В. Фомин*

Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия

Кожа человека, как объект с относительно высокой теплоемкостью, проявляет инерционные свойства при нагреве и охлаждении. При воздействии внешнего источника, периодически нагревающего кожу, наблюдается запаздывание колебаний температуры кожи относительно колебаний мощности нагревателя. Периодический нагрев поверхности кожи может рассматриваться как процесс, порождающий распространение тепловых волн в объеме кожи.

В данной работе развивается подход, в соответствии с которым квазипериодическое изменение сосудистого просвета и наполнения горячей кровью подкожной ткани приводит к генерации тепловых волн, распространяющихся из глубины к поверхности кожи (рис. 1).

Тепловые волны, распространяющиеся в коже, испытывают затухание и дисперсию. При повышении частоты волны затухание возрастает, запаздывание уменьшается. Применяя аналогию тепловых и электрических явлений, затухание можно охарактеризовать амплитудно-частотной характеристикой фильтра нижних частот, а дисперсию – фазочастотной. В этом случае электро-тепловая модель кожи может иметь вид (рис. 2) [2].

Таким образом, в рамках используемой модели взаимосвязь температура – кровоток может записываться в следующем виде:

$$BF(t) \approx C_5 \frac{dT(t)}{dt} + C_3,$$
 где $BF(t)$ – колебания кровотока; $T(t)$ – колебания температуры; t – время; C_3, C_5 – тепловые коэффициенты.

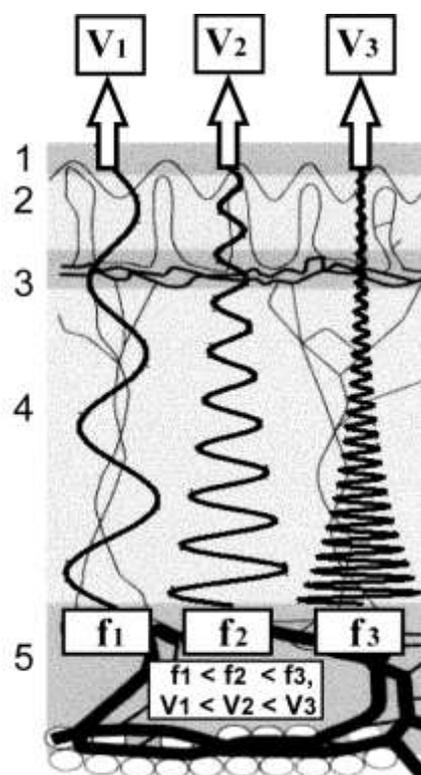


Рис. 1. Схема распространения температурных волн в коже: V_1-V_3 – фазовые скорости волн; f_1-f_3 – частоты волн; 1–5 – слои кожи [1]

а

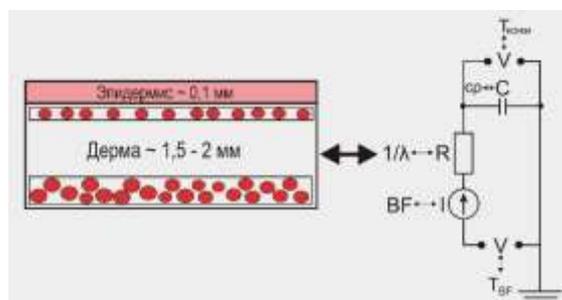


Рис. 2. Аналогия электрических свойств RC-фильтра и тепловых свойств кожи

Установление закономерностей распространения температурных волн в коже открывает возможность определения колебаний кровотока по результатам температурных измерений. В работе демонстрируются примеры визуализации колебаний кровотока в конечностях восстановленных по результатам обработки динамических термограмм с применением электротепловой аналогии.

1. *Sagaidachnyi A.A., Skripal A.V., Fomin A.V. and Usanov D.A.* Determination of the Amplitude and Phase Relationships Between Oscillations in Skin Temperature and Photoplethysmography – Measured Blood Flow in Fingertips // *Physiological Measurement*. 2014. V. 35. No 2. P. 153–166.
2. *Сагайдачный А.А., Усанов Д.А., Скрипаль А.В., Фомин А.В.* Электротепловая аналогия свойств кожи и фильтра низких частот: взаимосвязь колебаний температуры и кожного кровотока в области конечностей // *Математическая биология и биоинформатика*. 2014. Т. 9. № 2. С. 309–318.

Индекс Фишера изинговских и гейзенберговских ферромагнетиков и псевдо- ϵ -разложение

М. А. Никитина, А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В докладе вычисляется критический индекс Фишера трехмерных систем с n -векторным параметром порядка с помощью техники псевдо- ϵ -разложения. На основе семипетлевых ренормгрупповых (РГ) рядов, найденных Мюрреем и Никелом для $n = 0, 1, 2, 3$, получены псевдо- ϵ -разложения индекса η в седьмом порядке по параметру разложения. Обработка псевдо- ϵ -разложений с помощью аппроксимант Паде, а также их прямое суммирование дали численные значения индекса Фишера [1], очень близкие к тем, которые были найдены ранее альтернативными теоретико-полевыми методами и с помощью расчетов на решетках.

Установлено, что псевдо- ϵ -разложения индекса η обладают специфической структурой, которая делает их очень удобными с вычислительной точки зрения. В частности, использование метода псевдо- ϵ -разложения эффективно сглаживает осцилляции коэффициентов РГ-рядов и радикально уменьшает темп их расходимости. В докладе обсуждается природа этой особенности, и показано, что она отражает как общие свойства техники псевдо- ϵ -разложения, так и специфику РГ-разложений индекса Фишера.

1. *A. I. Sokolov and M. A. Nikitina. Phys. Rev. E 90, 012102 (2014).*

Нелинейные восприимчивости легкоосного ферромагнетика вблизи точки Кюри и пятипетлевые псевдо- ε -разложения

М. А. Никитина, Д. М. Васильева, А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В критической области нелинейные восприимчивости ферромагнетиков аномально велики и степенным образом зависят от $|T - T_c|$. Соответствующие амплитуды определяются асимптотическими значениями ренормированных констант связи g_{2k} , чьи отношения $R_{2k} = g_{2k} / g_4^{k-1}$ универсальны. Эти отношения входят в разложение свободной энергии по степеням намагниченности и в критическое уравнение состояния [1, 2].

В докладе вычисляются псевдо- ε -разложения R_6 , R_8 и R_{10} для одноосных ферромагнетиков и находятся численные значения этих отношений. За основу взяты пятипетлевые ренормгрупповые (РГ) ряды для высших констант связи [3] и псевдо- ε -разложение координаты вильсоновской фиксированной точки g_4 [4]. Псевдо- ε -разложение R_6 имеет вид

$$R_6 = 2t (1 - 0,244\,17\,t + 0,120\,06\,t^2 - 0,107\,51\,t^3 + 0,128\,98\,t^4).$$

Остальные псевдо- ε -разложения также имеют коэффициенты, значительно меньшие, чем у исходных РГ-разложений, однако они не убывают с номером члена ряда. Обработывая разложение R_6 с помощью аппроксимант Паде, мы получили $R_6 = 1,650\,2$, а использование техники Паде – Бореля – Леруа привело к $R_6 = 1,648\,8$. Последнее число отлично согласуется с результатом недавних расчетов на решетках $R_6 = 1,649(2)$ [5]. В случае R_8 суммирование псевдо- ε -разложения методами Паде и Паде – Бореля – Леруа дало соответственно $R_8 = 0,879$ и $R_8 = 0,891$. Эти оценки также находятся в хорошем согласии с данными решеточных расчетов $R_8 = 0,871(14)$ [5]. В то же время псевдо- ε -разложение R_{10} оказалось практически непригодным для получения численных результатов. Ситуацию здесь не улучшило даже применение техники «конформ-Борель», учитывающей поведение членов высоких порядков (липатовскую асимптотику). При этом для других отношений данная техника оказалась весьма эффективной и дала оценки $R_6 = 1,649$; $R_8 = 0,863$, очень близкие к приведенным выше.

1. *А. И. Соколов*. ФТТ, 40, 1284 (1998).
2. *A. I. Sokolov, E. V. Orlov, V. A. Ul'kov et al.* Phys. Rev. E 60, 1344 (1999).
3. *R. Guida, J. Zinn-Justin.* Nucl. Phys. B 489, 626 (1997).
4. *A. I. Sokolov, M. A. Nikitina.* Phys. Rev. E 89, 052127 (2014).
5. *P. Butera, M. Pernici.* Phys. Rev. B 83, 054433 (2011).

Анизотропия кубических ферромагнетиков в критической области и псевдо- ϵ -разложение

А. Я. Кудлис, А. И. Соколов

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Сразу же после открытия эффектов флуктуационной изотропизации и флуктуационной неустойчивости фазовых переходов II рода встал вопрос о том, какой режим критического поведения реализуется в кубических ферромагнетиках. Как показал детальный ренормгрупповой (РГ) анализ, вблизи точек Кюри магнитные подсистемы этих кристаллов остаются анизотропными, но их критические индексы (КИ) практически совпадают с КИ гейзенберговских ферромагнетиков. Позже было установлено, что обнаружить анизотропное критическое поведение все же можно, но для этого надо измерять не КИ, а нелинейные восприимчивости кристалла [1]. Естественной мерой магнитной анизотропии кубического ферромагнетика служит параметр $D = 1 - S_d / S_c$, где S_c и S_d – нелинейные восприимчивости четвертого порядка, измеренные вдоль направлений (100) и (111).

Доклад посвящен вычислению универсального критического значения D методом псевдо- ϵ -разложения. За основу взяты РГ-ряды для функций Гелл-Манна – Лоу трехмерной кубической модели [2, 3]. Итерируя систему уравнений для координат особых точек, мы получили псевдо- ϵ -разложения координат кубической фиксированной точки u и v , а затем нашли аналогичный ряд для параметра анизотропии D . Вычисление суммы этого ряда дает $D = 0,0573$ (пятипетлевое приближение). Это число хорошо согласуется с оценкой $D = 0,054 \pm 0,012$ [1], полученной с использованием значений u и v , найденных путем борелевского суммирования исходных РГ-разложений [3]. Альтернативный расчет D с помощью прямого суммирования пятипетлевых псевдо- ϵ -разложений для u и v ведет к значению $D = 0,0622$, которое также лежит в пределах диапазона, даваемого РГ-анализом. Это подтверждает вывод о том, что техника псевдо- ϵ -разложения представляет собой своеобразный метод пересуммирования, превращающий расходящиеся ряды в разложения, очень удобные для практических применений [4–6].

1. *D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov. Phys. Rev. B 64, 094407 (2001).*
2. *D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov. Phys. Rev. B 61, 15130 (2000).*
3. *J. M. Carmona, A. Pelissetto, and E. Vicari. Phys. Rev. B 61, 15136 (2000).*
4. *M. A. Nikitina and A. I. Sokolov. Phys. Rev. E 89, 042146 (2014).*
5. *A. I. Sokolov and M. A. Nikitina. Phys. Rev. E 89, 052127 (2014).*
6. *A. I. Sokolov and M. A. Nikitina. Phys. Rev. E 90, 012102 (2014).*

Дальний порядок во фрустрированной модели Изинга на ОЦК-решетке

А. О. Сорокин^{1,2}, В. А. Шурыгина³

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

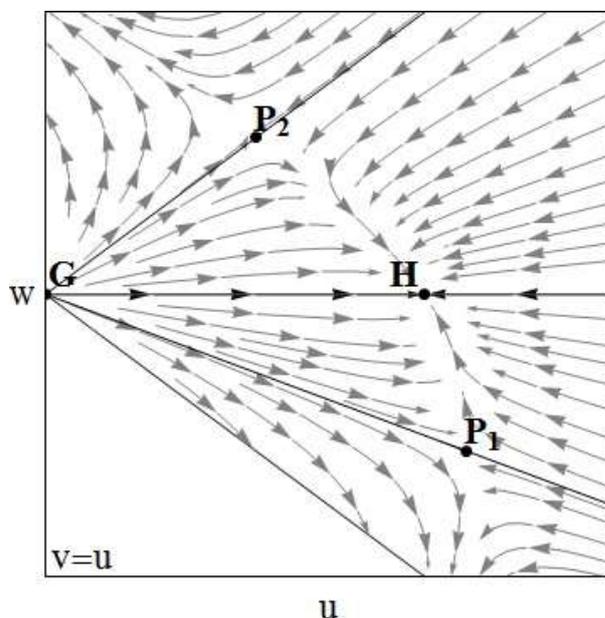
² *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Самарский государственный технический университет, Самара, Россия*

Антиферромагнетик с изинговскими спинами на решетках с геометрической фрустрацией является важной моделью, описывающей такие магнитные фазы, как спиновое стекло и спиновый лед. В зависимости от геометрии решетки и конкуренции обменных взаимодействий в этой модели может возникать также и дальней магнитное упорядочение, отвечающее не только изинговскому параметру порядка, но и дополнительным параметрам. Так, в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменами между спинами первых двух порядков дальности возникает дальний порядок, описываемый благодаря явлению «порядок из беспорядка» двумя изинговскими параметрами.

Мы рассмотрели критическое поведение в этой системе, а также в модели антиферромагнетика на простой кубической решетке с дополнительным обменом внутри слоев решетки. С помощью численного моделирования для обеих моделей было найдено, что переходы по обоим параметрам происходят при одной температуре в виде перехода первого рода. Данный переход слабого первого рода и кроссоверные показатели близки к соответствующим значениям трикритической точки.

Рассматриваемые модели эквивалентны двум взаимодействующим моделям Изинга, а значит, и модели Ашкина – Теллера с переходом из так называемой фазы Бакстера (упорядоченной по обоим параметрам) в парамагнитную фазу. Мы рассмотрели также одновременный переход по обоим параметрам с помощью ренормгруппы и $4-\epsilon$ -разложения. По РГ-диаграмме, изображенной на рисунке, видно, что лишь часть траекторий, стартующих из области, отвечающей фазе с двумя изинговскими параметрами ($w=2u$), притягиваются неподвижной точкой H , соответствующей $O(2)$ -модели. Поэтому данный переход может быть либо первого рода, либо трикритическим, либо второго рода из класса универсальности $O(2)$ -модели.



Исследование когерентной спиновой динамики двумерных электронов в квантовой яме GaAs

Э. Х. Степанец-Хуссейн

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

Особый интерес к спиновым явлениям в полупроводниках и низкоразмерных полупроводниковых наноструктурах в значительной степени связан с надеждами на то, что управление электронными спинами поможет реализовать идею квантового компьютера и в конечном счете создать новые устройства спинтроники. Ключевым параметром спинтронных устройств является время жизни (релаксации) спина.

Целью работы было исследование спиновой динамики электронов в режиме квантового эффекта Холла при нечетных факторах заполнения, когда заполнен только нижний спиновый подуровень (холловский ферромагнетик).

В настоящей работе изучалась высококачественная полупроводниковая наноструктура на основе GaAs/AlGaAs с 17-нанометровой квантовой ямой GaAs, содержащая высокоподвижный ($\mu_e \sim 5 \cdot 10^6 \text{ см}^2 / (\text{В} \cdot \text{с})$) квазидвумерный электронный газ с темновой концентрацией $n_s = 2,4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Исследование спиновой динамики двумерных электронов проводилось с помощью методики времяразрешенного эффекта Керра. Источником импульсов накачки и зондирования служил фемтосекундный титан-сапфировый лазер (Tsunami, Spectra Physics). Образец находился в оптическом криостате с расщепленным соленоидом, позволявшим создавать магнитное поле до 6 Тл, при температуре 2 К. В эксперименте использовалась геометрия Фойгта – Фарадея, когда угол между нормалью к поверхности образца и внешним магнитным полем составлял 45° .

Была исследована спиновая дефазировка двумерных электронов вблизи фактора заполнения $\nu = 3$ в спектральных позициях, соответствующих верхнему и нижнему спиновым подуровням Ландау. Было показано, что время спиновой дефазировки электронов на верхнем спиновом подуровне Ландау существенно короче, чем на нижнем спиновом подуровне Ландау. Также было установлено, что время спиновой дефазировки электронов на верхнем спиновом подуровне Ландау нечувствительно к фактору заполнения.

Переход «геликоидальная структура – ферромагнетик» в соединениях В20: роль кубической анизотропии

А. С. Суханов^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}, С. В. Малеев²

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

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

Модель Бака – Йенсена [1] предсказывает появление геликоидальной (гомокиральной) структуры с волновым вектором $k_s = D/J$ в магнитных системах, в которых имеет место иерархия взаимодействий: большее ферромагнитное обменное взаимодействие J , антисимметричное взаимодействие Дзялошинского – Мория D . Разница в энергии между коллинеарным ферромагнитным и геликоидальным состояниями может быть определена экспериментально путем измерения критического магнитного поля H_{c2} , необходимого для перехода гелимагнетика в индуцированный полем ферромагнетик. Недавние эксперименты выявили преобразование геликоидальной структуры в ферромагнитную при $x \rightarrow x_c$ в твердых растворах $Fe_{1-x}Co_xGe$ и $Mn_{1-x}Fe_xGe$. Было сделано заключение, что переход обусловлен разными знаками спиновой киральности для соединений с $x > x_c$ и $x < x_c$.

В настоящей работе показано, что механизм перехода реализуется посредством конкуренции между кубической анизотропией и взаимодействиям Дзялошинского – Мория, уменьшающемся при x_c . Кубическая анизотропия приводит, во-первых, к возникновению условий, ограничивающих стабильность геликоидальной фазы в диапазоне сравнительно малых k_s , и, во-вторых, к появлению собственного вклада в значение критического поля H_{c2} .

1. P. Bak, M. H. Jensen // J. Phys. C13, L881 (1980).

Фазовая диаграмма мультиферроика MnI_2

В. Е. Тимофеев^{1, 2}, А. В. Сыромятников^{1, 2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

Из-за своего весьма необычного поведения большой интерес как экспериментаторов, так и теоретиков в последнее время вызывают мультиферроики. В статье [1] рассматривается соединение MnI_2 , относящееся к этому классу веществ, а в статье [2] впервые наблюдались три фазовых перехода в этом соединении при температурах $T_{N1} = 3,95$ К, $T_{N2} = 3,8$ К и $T_{N3} = 3,45$ К. Ниже точки T_{N1} проявлялись различные несоразмерные спиральные состояния, а при температуре ниже T_{N3} вектор магнитной структуры останавливался на значении $q \sim (0,181; 0; 0,439)$. Также интересным является тот факт, что плоскость вращения спинов при температуре ниже T_{N3} перпендикулярна вектору магнитной структуры.

Ранее авторами работы [3] при помощи DFT-вычислений была разработана теория, использующая шесть различных обменных параметров, которая не в полной мере описывала рассматриваемое явление. В данной же работе сделана попытка анализа этого явления с учетом магнитного дипольного взаимодействия и последующего объяснения фазовой диаграммы при помощи теории фазовых переходов Ландау.

1. T. Kurumaji, S. Seki, S. Ishiwata, H. Murakawa, Y. Tokunaga, Y. Kaneko, and Y. Tokura. PRL 106, 167206 (2011).
2. T. Sato, H. Kadowaki, K. Iio. Physica B 213&214 (1995) 224–226.
3. Xianxin Wu, Yingxiang Cai, Qing Xie, Hongming Weng, Heng Fan, and Jiangping Hu. Phys. Rev. B 86, 134413 (2012).

О влиянии дефектов на низкотемпературные свойства спиральных магнетиков

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

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

В последнее время значительный интерес вызывают магнетики без центра инверсии, в которых за счет наличия взаимодействия Дзялошинского – Мории (DMI) при низких температурах основным состоянием спиновой системы является спиральное упорядочение. В частности, структуры типа B20, к которым относится, например, широко изученный материал MnSi. Недавно в работе [1] были экспериментально исследованы свойства твердых растворов $Mn_{1-x}Fe_xGe$ во всем диапазоне концентраций x и обнаружено явление изменения магнитной киральности на противоположную при переходе через некоторое значение x_c . Также была получена зависимость вектора спирали от x .

Нашей целью было теоретическое описание влияние дефектов на упорядочение спинов в магнитных системах с DMI. В качестве модельных систем для исследования были выбраны кубический магнетик с ферромагнитным обменом между ближайшими соседями и DMI между соседями вдоль одной из осей и система типа B20, с взаимодействиями из работы [2]. Считалось, что микроскопически дефекты изменяют параметры взаимодействия между ближайшими узлами решетки, т. е. константу обменного взаимодействия и DMI.

Нами было получено, что величина дополнительного поворота спинов в системе из-за одиночного дефекта описывается уравнением, аналогичным уравнению для поля диполя из электростатики. В связи с этим при конечных (но малых) концентрациях примесей мы имеем «однородно поляризованную среду», что эквивалентно линейному вдоль оси спирали дополнительному повороту спинов, что приводит к линейному по концентрации примесей изменению вектора спирали. Также были получены выражения для энергии и затухания элементарных возбуждений при наличии дефектов.

1. *S.V. Grigoriev et al. Phys. Rev. Lett. 110, 207201 (2013).*

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

Фазовая диаграмма в стохастической химической системе

Т. М. Фам

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

Изучается стохастическая модель бинарной автокаталитической химической реакции на основе уравнений химической кинетики со стохастически возмущенными параметрами. Возмущение описывается обобщенным случайным процессом белого шума. Исследуется стационарная плотность маргинального распределения первого порядка случайного процесса, описывающего эволюцию концентрации одного из компонентов реакции. В отличие от исследований этой модели, выполненных ранее, изучение имеющегося в ней фазового перехода, индуцированного шумом, проведено в трехпараметрическом пространстве термодинамических параметров состояния смеси компонентов.

Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы: Теория и применение в физике, химии и биологии / Пер. с англ. / М.: Мир, 1987.

Спектр магнонов в ферромагнетике со скирмионной решеткой

А. В. Цыпильников^{1,2}, Д. Н. Аристов²

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

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

В недавнее время было экспериментально установлено, что в тонких пленках магнетиков при определенных условиях могут образовываться вихревые структуры, называемые скирмионами. Свойства таких структур активно исследуются в связи с возможностью создания на их основе новых видов памяти или других устройств [1].

В работе [2] был проведен анализ спектра магнонов при наличии скирмиона. Для вычисления квантового спектра в системе со скирмионным основным состоянием был использован метод квазиклассического квантования. Суть метода заключается в том, что равновесная конфигурация намагниченности (скирмион), возникающая при анализе локального минимума действия, считается классическим вакуумом. Квантование действия над таким вакуумом приводит к понятию спектра возбуждений. В случае однородной намагниченности этот подход ведет к понятию магнонов. Однако в работе [2] рассматривалось только обменное взаимодействие спинов, когда скирмионная конфигурация является метастабильной.

Аналогичный подход можно использовать при учете взаимодействия Дзялошинского – Мория (ДМ) и внешнего поля, стабилизирующих скирмионное состояние. Включение этих взаимодействий ведет к появлению параметра длины, который можно трактовать как радиус скирмиона. Возникающие в данном подходе уравнения на спектр возбуждений не имеют аналитического решения, поэтому следует использовать численные методы. Следует отметить, что сходный анализ был проведен ранее [3] для одиночного скирмиона. Мы планируем исследовать случай гексагональной скирмионной решетки, дополнительно минимизируя энергию по периоду возникающей сверхструктуры.

1. *A. Fert, V. Cros and J. Sampaio.* Nature Nanotechnology, 8, 152 (2013).

2. *D.N. Aristov, S.S. Kravchenko and A.O. Sorokin.* arXiv:1411.2452.

3. *C. Schütte and M. Garst.* Phys. Rev. B 90, 094423 (2014).

К динамической теории пространственно-временной дифракции нейтронов на деформированных кристаллах

Т. Чен

*Московский государственный университет тонких химических технологий
им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия*

Представлена динамическая теория пространственно-временной дифракции тепловых нейтронов на деформированных кристаллах, подвергнутых различным видам упругого изгиба кристалла (механический изгиб, температурный градиент). Показана возможность управления параметрами нейтронного пучка с помощью деформированного кристалла. Теоретически рассмотрен эффект пространственно-временного сжатия нейтронного пучка.

Квантовый размерный эффект для электронов, дифрагирующих от тонкой кристаллической пленки

С. М. Шкорняков

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

В работе [1] теоретически предсказан и рассчитан квантовый размерный эффект для электронов с энергией порядка десятков кэВ, падающих на тонкую монокристаллическую пленку под малым углом скольжения. Выведены аналитические формулы, описывающие зависимость коэффициента отражения электронов от нормальной составляющей их кинетической энергии. Кристаллический потенциал пленки представлен в виде одномерной потенциальной «гребенки», состоящей из N δ -функций. Благодаря простоте физической модели процесса удалось получить компактные аналитические выражения для этого эффекта.

В настоящем сообщении рассматривается более реалистичная модель электрического потенциала пленки. В частности, учитываются скачки потенциала на ограничивающих поверхностях пленки. В случае, когда скачок потенциала равен нулю, полученные в настоящей работе выражения переходят в предыдущие формулы [1].

1. Шкорняков С.М. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, № 2, с. 99–107.

Теоретическое описание спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов на фрактальных объектах

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

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

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

Спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов – новый метод исследования частиц мезо- и наномасштаба. В этом методе измеряется корреляционная функция частицы $G(z)$, которая есть интеграл от закона рассеяния по пространству переданных импульсов $\vec{Q} = (Q_y, Q_z)$ с весовой функцией $\cos(zQ_z)$ (z – спин-эхо длина) [1]. Для фракталов закон рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) = A/(1 + (Q\xi)^2)^{D/2}$, где A – константа, Q – модуль вектора переданного импульса, ξ – корреляционная длина частицы, а степень D характеризует фрактальную размерность частицы. Для объемных фракталов $1 < D < 3$ и фрактальная размерность $D_m = D$. Для рассеяния на трехмерных объектах, имеющих фрактальную поверхность, $3 < D = 6 - D_s < 4$, где D_s – фрактальная размерность поверхности [2].

В работе предложено теоретическое описание корреляционной функции $G(z)$, наблюдаемой при рассеянии на фрактальных объектах в методе спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов:

$$G(z) = \frac{2\pi A}{\sigma k_0^2 \Gamma\left(\frac{D}{2}\right)} \left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(\frac{z}{\xi}\right),$$

где σ – полное сечение рассеяния, k_0 – величина волнового вектора падающего пучка, $\Gamma(x)$ – гамма-функция, $K_n(x)$ – функция Макдональда порядка n . Для анализа вида корреляционных функций $G(z)$ как для поверхностных, так и для объемных фракталов мы аппроксимировали (1) функцией вида

$$\tilde{G} = \left(1 + \frac{z}{\xi_1}\right)^\delta \exp\left(-\frac{z}{\xi_2}\right),$$

где ξ_1 – толщина поверхностного слоя (для поверхностного фрактала) или размер единичного элемента самоподобия (для объемного фрактала), ξ_2 – размер всей фрактальной частицы, и, наконец, параметр δ характеризует фрактальную степень объекта. Для поверхностного фрактала $\delta > 0$, а для объемного – $\delta < 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 14-22-01073 офи_м).

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

2. Teixeira J. J. Appl. Cryst. 21, 781–785 (1988).

3. Grigoriev S. V., Rekveldt Th. M., Krouglov T. V., Kraan W. H., Bouwman W. G. J. Appl. Cryst., 39, 252–258 (2006).

Влияние термического отжига на транспорт электронов в тонких пленках твердого раствора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}$

Х. В. Алигулиева

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

Соединения группы $\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_3^{\text{VI}}$ продолжают оставаться в центре внимания исследователей уже длительное время. Этот интерес обусловлен, с одной стороны, тем, что материалы этой группы характеризуются относительно высокими значениями термоэлектрической добротности, а с другой стороны, тем, что в последнее время они позиционируются как топологические изоляторы.

Нами разработана технология получения поликристаллических тонких пленок твердого раствора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2,7}\text{Se}_{0,3}$ термовакuumным напылением методом «горячей стенки». Выявлено, что термический отжиг пленок в вакууме при температуре 200°C в течении 1 ч приводит к увеличению размеров кристаллитов и качества полученных пленок. Это подтверждается данными рентгеновской дифракции и комбинационного рассеяния света. Исследован транспорт электронов в широкой области температур $1,4\text{--}300\text{ K}$ (рис. 1) и магнитных полей вплоть до 8 Тл (рис. 2). Предполагается, что наблюдаемая слабая антилокализация обусловлена доминирующим вкладом поверхностных состояний топологического изолятора. Оценена длина сбоя фазы L_φ .

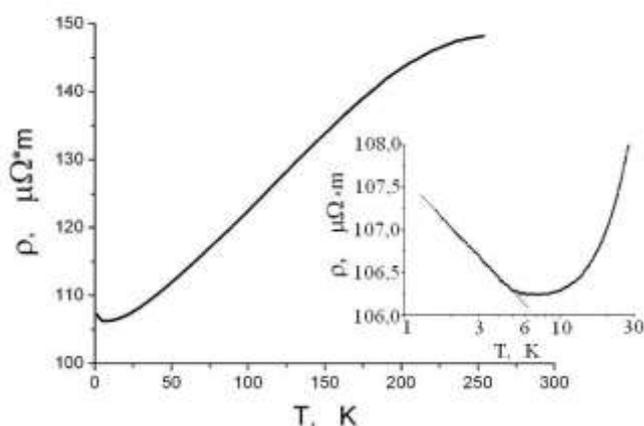


Рис. 1. График транспорта электронов в области температур $1,4\text{--}300\text{ K}$

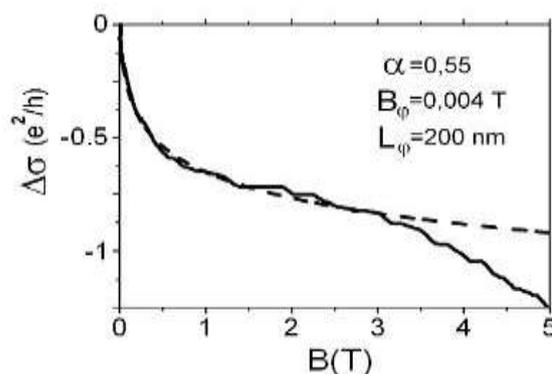


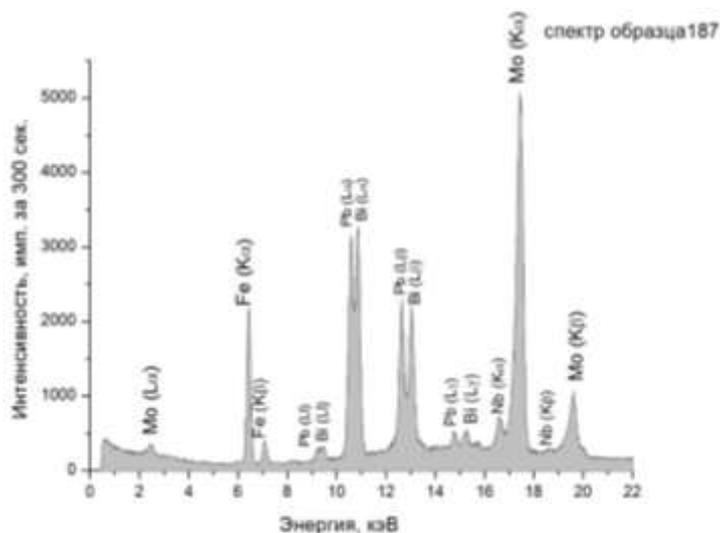
Рис. 2. График транспорта электронов в области магнитных полей до 8 Тл

Исследование стехиометрического состава твердых растворов феррита висмута и феррониобата свинца методом рентгеновского флуоресцентного анализа

А. С. Голофастова, Н. М. Новиковский, А. В. Махиборода

*Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону, Россия*

Авторами была разработана методика рентгеновского флуоресцентного анализа (РФА) мелкодисперсных порошков твердых растворов (ТР) $(1-x)\text{BiFeO}_3$ и $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ [1], на спектрометре РФС-001 [2] с полным внешним отражением (ПВО) рентгеновского излучения, для определения стехиометрического коэффициента x . Результатом разработки методики РФА мелкодисперсных порошков твердых растворов $(1-x)\text{BiFeO}_3$ и $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ является формула для определения стехиометрического коэффициента x . Проведенные исследования показали, что для определения стехиометрического коэффициента твердых растворов $(1-x)\text{BiFeO}_3$ $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ достаточно получить экспериментальное значение отношения интегральных интенсивностей L -серии рентгеновской флуоресценции Bi и Pb (рис.). Полученные экспериментально значения коэффициента x посредством РФА исследуемых твердых растворов на спектрометре РФС-001 с ПВО хорошо согласуются со значениями x , закладываемыми при изготовлении твердых растворов, что позволяет сделать вывод в пользу точности применяемой методики синтеза твердых растворов. Отклонения полученных экспериментально значений стехиометрического коэффициента x от значений, закладываемых при синтезе, менее 5 %, что не превышает значения погрешности проведения РФА на спектрометре РФС-001 с ПВО.



Спектр рентгеновской флуоресценции
 $(1-x)\text{BiFeO}_3$ $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$

1. Павленко А.В. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к. ф.-м. н., Нальчик. 2012. С. 23.
2. Разномазов В.М., Новиковский Н.М., Пономаренко В.О, Ковтун А.П., Ведринский Р.В., Величко Ю.И. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2010. Т. 76, № 2. С. 33–38.

Микромагнитное моделирование распределения намагниченности в инвертированных опалоподобных структурах на основе кобальта и никеля

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

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

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

Искусственные спиновые льды являются удобными объектами для исследования геометрической фрустрации [1]. Возможность варьирования размера единичных элементов, вида упорядочивания и материала, из которого состоят данные структуры, позволяет создавать наиболее подходящие для изучения фрустрации модельные системы. Все исследовавшиеся до настоящего времени объекты представляли собой либо двумерные массивы наночастиц, либо сплошные пленки с периодически расположенными пустотами.

В работе [2] была высказана гипотеза о принадлежности инвертированных опалоподобных структур (ИОПС) на основе кобальта к семейству искусственных спиновых льдов. ИОПС могут быть получены из коллоидных кристаллов, составленных из расположенных в узлах ГЦК-решетки микросфер, посредством заполнения пустот между микросферами ферромагнитным металлом с последующим удалением самих сфер. В результате образуется периодическая ферромагнитная сеть наноузлов, связанных между собой ножками-перемычками.

В данной работе было проведено микромагнитное моделирование распределения намагниченности в элементарной ячейке ИОПС. Уравнение Ландау – Лифшица – Гильберта было решено с помощью FEM/ВЕМ метода [3], реализованного в пакете Nmag [4]. Были вычислены кривые гистерезиса элементарной ячейки при приложении внешнего магнитного поля вдоль кристаллографических направлений [111] и [121]. Определены пределы применимости правила спинового льда в ИОПС. Кроме того, установлено наличие компоненты намагниченности, перпендикулярной внешнему полю при приложении его вдоль направления [121]. Данный эффект, предсказанный в [2], является следствием выполнения правила спинового льда и может быть проверен экспериментально.

Таким образом, результаты численного моделирования свидетельствуют о принадлежности ИОПС на основе никеля и кобальта к классу искусственных спиновых льдов.

1. *Nisoli C., Moessner R., Schiffer P. (2013). Reviews of Modern Physics, 85(4), 1473.*
2. *Mistonov A. A., Grigoryeva N. A., Chumakova A. V., Eckerlebe H., Sapoletova N. A., Napolskii K. S., Grigoriev S. V. (2013). Physical Review B, 87(22), 220408.*
3. *Fredkin D. R., Koehler T. R. (1990). Magnetism, IEEE Transactions on, 26(2), 415–417.*
4. *Fischbacher T., Franchin M., Bordignon G., Fangohr H. (2007). Magnetism, IEEE Transactions on, 43(6), 2896–2898.*

Двухэнергетическая рентгеноабсорбциометрия и добыча алмазов

И. Л. Жогин, Е. В. Бубырь, Е. Н. Владимиров, Т. Е. Романовская

Научно-производственное предприятие «Буревестник», Санкт-Петербург, Россия

Извлечение алмазов из руды – это сложный многостадийный процесс [1]. На фабриках в основном применяются люминесцентные сепараторы, использующие свойство алмазов люминесцировать под действием рентгена. Однако здесь есть ограничения.

Алмазы очень различаются по характеристикам их рентгенолюминесценции [2] – выделяют алмазы первого и второго типа (безазотные), слабосветящиеся. С другой стороны, в породе встречаются другие рентгенолюминесцирующие минералы: кальциты, цирконы, галиты. Поэтому увеличение чувствительности регистрации, для обнаружения слабосветящихся алмазов, приводит к росту количества ложных отсечек и снижению кондиции алмазного концентрата.

Доля нелюминесцирующих алмазов зависит от месторождения (видимо, важен состав мантийных газов [3], сформировавших алмазную трубку) и может быть заметной, 2–10 %.

Среди альтернативных подходов к задаче обнаружения алмазов (в том числе предлагается использовать нейтронное излучение) выделяется метод двухэнергетической рентгеновской абсорбциометрии (ДРА) [4, 5].

Определение коэффициентов пропускания в области центров зерен для двух рентгеновских источников, с различным спектром, позволяет различать алмазы и зерна породы, так как коэффициенты ослабления алмаза и породы и их зависимость от энергии рентгеновского излучения различны. Алмазы отвечают номеру таблицы Менделеева $Z = 6$, их плотность $3,53 \text{ г/см}^3$. Средний атомный номер породы (кимберлитов) заметно больше, $Z_{\text{ср.}} \sim 12$. Разрешающая способность метода ДРА зависит от энергий (спектров излучения, а также спектральных характеристик двух детекторов), используемых для получения двух теневых изображений. Оптимальна область энергий 20–45 кэВ, где для углерода уже доминирует комптоновское рассеяние, а для породы доминирующим остается вклад фотопоглощения.

В сообщении обсуждаются особенности метода ДРА, а также его реализация в рентгенографических сепараторах НПП «Буревестник».

1. *J. Danoczi, A. Koursaris, J. South. Afr. Inst. of Mining and Metal.* 108, 89 (2008).
2. *Е.В. Соболев.* Тверже алмаза (очерки). Новосибирск: Наука. 1989. с.192.
3. *А.М. Портнов.* Алмазы – сажа из труб преисподней. Наука и жизнь. № 10. 80 (1999).
4. *M. Firsching, F. Nachtrab et al.* Advanced Materials. 23, 2655 (2011).
5. *V. Rebuffel, J.-M. Dinten.* Insight: Non-Destructive Testing & Cond. Monit. 49, 589 (2007).

Анализ функции разрешения дифрактометра с двумерным детектором на источнике синхротронного излучения

О. А. Звягинцев

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Двумерные детекторы для регистрации синхротронного излучения были разработаны для монокристаллической дифракции. В наши дни они часто используются и в порошковых синхротронных экспериментах. Однако многие методические вопросы такого использования оказались слабо проработанными.

Данная работа посвящена одному из таких аспектов, а именно, функции разрешения двумерного детектора для порошкового дифракционного эксперимента.

В работе представлен анализ экспериментальных порошковых дифрактограмм стандарта LaB₆, полученных при различных положениях двумерного детектора. В результате исследования ширин брэгговских линий получены функции разрешения для различных геометрий эксперимента. Проведено сравнение функций разрешения с описанными в литературе, сделано заключение, что формула Кальотти (Cagliotti) имеет ограниченную область применения. Планируется дальнейшее исследование функции разрешения с целью выработки полезных рекомендаций по оптимальному использованию двумерных детекторов в порошковой моде.

Детектор ультрахолодных нейтронов для спектрометра по измерению времени жизни нейтрона

Д. С. Ильин^{1, 2}, В. А. Андреев¹, А. В. Васильев¹, Е. А. Иванов¹,
А. Г. Кривишч¹, А. П. Серебров¹, А. Г. Харитонов¹

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

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

Для спектрометра по измерению времени жизни нейтрона методом хранения ультрахолодных нейтронов (УХН) в большой гравитационной ловушке (источник УХН PF2/MAM, ILL, Grenoble) был разработан и построен газоразрядный детектор. Прибор предназначен для счета числа УХН в циклах измерений [1].

Детектор представляет собой сборку из пропорциональных счетчиков с единым газовым объемом. Счетчики имеют форму параллелепипедов сечением 48×48 мм, и длиной (по порядку): 1-й и 6-й – 160 мм, 2-й и 5-й – 250 мм, 3-й и 4-й – 284 мм. Пропорциональные счетчики объединены по 3 (по схеме 1, 3, 5-й и 2, 4, 6-й) в 2 счетных независимых канала, что необходимо для увеличения надежности детектора и контроля работы каждого канала в отдельности.

Круглое входное окно детектора имеет диаметр 290 мм и изготовлено из тонкой ~ 100 мкм алюминиевой фольги для обеспечения минимальных потерь нейтронов. Детектор размещается на вакуумируемом нейтроноводе, а давление рабочего газа внутри детектора составляет 1 атм абс., поэтому для поддержки фольги используется решетка (со стороны вакуума) с ребрами жесткости.

Для тестовых испытаний была выбрана газовая смесь 30 мбар ^3He + + 1 030 мбар CF_4 . Состав смеси был оптимизирован с точки зрения минимизации вклада «стеночного» эффекта в амплитудные спектры [2] и обеспечения максимальной эффективности регистрации УХН.

Детектор успешно прошел испытания на Pu-Be источнике нейтронов в лабораторных условиях, а также в составе спектрометра.

1. *Серебров А.П., Фомин А.К., Харитонов А.Г., Варламов В.Е., Чечкин А.В. // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. Вып. 11. С. 136–141.*
2. *Batchelor R., Aves R., Skyrme T.H.R. // Rev. Sci. Instrum. 1955. V. 26. P. 1037.*

Реконструкция SANS-3 на реакторе ПИК

П. И. Коник^{1,2}, К. А. Павлов^{1,2}, Е. В. Москвин^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}

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

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

В рамках совместного проекта “PIK-GGBase” из GKSS (Геестхахт, Германия) в ПИЯФ НИЦ КИ были перевезены 7 нейтронных приборов. В их число входит рефлектометр поляризованных нейтронов PNR, который мы предлагаем реконструировать в малоугловой дифрактометр SANS-3.

Такое решение обусловлено целым рядом соображений, среди которых наиболее важным является то, что мы ожидаем очень высокой загрузки других малоугловых инструментов на ПИК, и дополнительный инструмент позволит снизить ее. По этой причине SANS-3 будет обладать значительной гибкостью. Предполагается использовать монохроматическую и времяпролетную моды, а также поляризованные нейтроны и анализ поляризации.

Прибор будет размещен в нейтронноводном зале на большом расстоянии от реактора в практически бесфоновых условиях. С помощью программного пакета McStas, реализующего метод Монте-Карло для нейтронного рассеяния, была создана полная модель прибора – от источника до детектора. Был оптимизирован нейтронновод, обеспечивающий двойной уход с прямой видимости и доставку максимума интенсивности на всех рабочих длинах волн.

Для реализации времяпролетной методики нами проанализированы две возможных конфигурации: с одним или двумя дисковыми прерывателями. Методом Монте-Карло было оптимизировано зеркало, обеспечивающее фильтрацию длинноволновых нейтронов, что позволит избежать рецикличности.

В докладе представлена концепция прибора, основные результаты оптимизации нейтронновода, а также дизайн времяпролетной моды.

Анализ локальной атомной структуры металлических стекол $\text{Fe}_{63}\text{Er}_2\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6$ и $\text{Fe}_{75}\text{Y}_5\text{B}_{20}$ методом обратного Монте-Карло в комбинации с анализом Вороного

С. А. Маношин, А. В. Белушкин, В. Ю. Казимиров

Объединенный институт ядерных исследований, ЛНФ, Дубна, Россия

Метод обратного Монте-Карло (RMC) позволяет восстанавливать структуры аморфных тел и стекол из экспериментальных данных нейтронного (и др.) рассеяния [1–3]. В рамках данной работы выполнен анализ дифракционных данных с целью определения локальной атомной структуры металлических стекол. Он основан на методе обратного Монте-Карло (RMC) в комбинации с анализом Вороного. Разработана специальная оригинальная процедура для анализа методом Вороного структуры, полученной методом обратного Монте-Карло. Результатом являются полные и частичные координационные числа. Структура стекла $\text{Fe}_{63}\text{Er}_2\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6$ сравнивается с данными, полученными ранее другими методами (молекулярная динамика MD и метод кристаллиновых аппроксимантов [4, 5]). Получено хорошее согласие для полных координационных чисел. Структура стекла $\text{Fe}_{75}\text{Y}_5\text{B}_{20}$ получена впервые. Проанализированы общие особенности структур металлических стекол на основе бора. В нашем случае мы подтвердили результаты, полученные в [4, 5] на большем числе систем и другим методом.

1. *R.L. McGreevy, L. Pusztai*: Reverse Monte Carlo Simulation: A New Technique for the Determination of Disordered Structures. *Mol. Simulation*. 1 359–367 (1988).
2. *R.L. McGreevy*: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 354 1 (1995).
3. *A.V. Belushkin, D.P. Kozlenko, R.L. McGreevy, B.N. Savenko, P. Zetterstrom*: *Physica B* 269, 297 (1999).
4. *V.Yu. Kazimirov, D. Louca, M. Widom et al.*: *Phys. Rev. B* 78, 054112 (2008).
5. *V.Yu. Kazimirov, D. Louca, V. Ponnambalam et al.*: *Phys. Rev. B* 72, 054207 (2005).

Моделирование ультрамалоуглового дифрактометра DCD методом Монте-Карло

А. В. Мокану¹, Е. В. Москвин^{1,2}

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

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

При создании современных дорогостоящих нейтронных установок необходимо предварительно тщательно рассчитать все их параметры, чтобы не допустить ошибок при проектировании. Программный пакет McStas [1] создан для подобных расчетов. В нем используется метод Монте-Карло. С помощью пакета McStas проведено моделирование ультрамалоуглового дифрактометра на совершенных кристаллах DCD. Дифрактометр DCD был передан в рамках соглашения между ПИЯФ (Гатчина, Россия) и HZG (Геестхафт, Германия) российской стороне вместе с другими нейтронными установками, принадлежащими HZG, для размещения на строящемся высокопоточном реакторе ПИК. Поскольку условия эксплуатации дифрактометра значительно меняются, необходимо провести моделирование его работы в условиях возросшего потока, а также оптимизировать его параметры.

Дифрактометр DCD покрывает диапазон по переданному импульсу $10^{-5} < 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$, дополняя стандартный диапазон малоугловых (SANS) дифрактометров в сторону меньших значений Q . Спектр исследований на данном диапазоне широк и востребован. Разрешение таких дифрактометров практически не зависит от сечения и расходимости пучка. Основными недостатками являются относительно низкая интенсивность на образце и высокий фон. Для снижения фона быстрых и тепловых нейтронов и фона диффузного рассеяния используется премонохроматор. При упругой деформации совершенных кристаллов интенсивность многократно вырастет, а соотношение сигнал/шум не ухудшится. На основе этих соображений можно произвести оптимизацию работы прибора, чтобы увеличить поток нейтронов на образце и выходящую интенсивность.

В программной среде McStas была построена предварительная модель, которая достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные, полученные на приборе. Это дает основание судить о достоверности модели и опираться на нее при оптимизации дифрактометра. С использованием полученной модели была произведена оптимизация премонохроматора. Однако модель требует доработки, и работы в этом направлении будут продолжены.

1. <http://www.mcstas.org/>

Применение пьезоэлектрических кристаллов в ускорителях заряженных частиц

А. Н. Олейник¹, О. О. Иващук¹, А. С. Кубанкин¹, А. В. Щагин^{1,2}

¹ *Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

² *Харьковский физико-технический институт, Харьков, Украина*

Пьезоэлектрические кристаллы, например ниобат лития (LiNbO₃), с размером порядка 1 см могут создавать электрические поля с напряженностью порядка 100 кВ/см при изменении их температуры в вакууме. Такие кристаллы применяются в так называемых пьезоэлектрических ускорителях для ускорения электронов и ионов до энергий сотни кэВ, а также для генерации рентгеновского излучения [1–3] и нейтронов [4].

В докладе сообщается об исследованиях по применению пьезоэлектриков в ускорительной физике. Впервые исследуется генерация рентгеновского излучения в пьезоэлектрическом ускорителе в направлении назад [5], а также впервые предложен и осуществлен в эксперименте поворот внешнего пучка электронов в электрическом поле, которое создается пьезоэлектрическими кристаллами при их нагреве в вакууме [6]. В настоящее время готовятся публикации результатов исследований в научных журналах.

1. *J.D. Brownridge. Pyroelectric X-Ray Generator. Nature. 358 (1992) 287.*
2. *J.A. Geuther, Y. Danon. Appl. Phys. Lett. 90 (2007) 174103.*
3. *В.И. Нагайченко, В.В. Сотников, Б.И. Иванов, А.М. Егоров, А.В. Щагин. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 3 (2007) 81–89.*
4. *B. Naranjo, J. K. Gimzewski, S. Putterman. Nature. 434 (2005) 1115.*
5. *А.Н. Олейник, И.А. Кищин, А.С. Кубанкин, Р.М. Назмудинов, А.В. Щагин. Наблюдение рентгеновского излучения от пьезоэлектрического источника в различных геометриях. Доклад на XLIV Международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, 27–29 мая 2014.*
6. *A.S. Kubankin, R.M. Nazhmudinov, A.N. Oleinik, A.V. Shchagin, K.A. Vokhmyanina. Turning of Electron Beam by Pyroelectric Crystals. Report at Intern. Conf.: Charged and Neutral Particles Channeling Phenomena. Italy, Capri, October 5–10, 2014.*

Моделирование малоуглового дифрактометра SANS-2 для реактора ПИК

К. А. Павлов^{1,2}, П. И. Коник^{1,2}, Е. В. Москвин^{1,2}, С. В. Григорьев^{1,2}

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова*

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

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

В рамках совместного проекта “PIK-GGBase” из GKSS (Геестхафт, Германия) в ПИЯФ НИЦ КИ были перевезены 7 нейтронных приборов. В их число входит малоугловой дифрактометр SANS-2.

Прибор сконструирован в классической щелевой геометрии на селекторе скоростей и имеет коллимационную и детекторную базы около 18 метров. Имеются также оборудование для проведения экспериментов на поляризованных нейтронах, пара дисковых прерывателей для измерений по времени пролета и система окружения образца, включающая в себя криостат и магнит. На реакторе ПИК дифрактометр будет размещен в нейтронноводном зале на большом расстоянии от источника, практически в бесфоновых условиях. Такое устройство и расположение прибора позволяют с наибольшей эффективностью реализовать его в качестве малоугловой установки широкого диапазона.

С помощью программного пакета McStas, реализующего метод Монте-Карло для нейтронного рассеяния, была создана полная модель прибора от источника до детектора. Был оптимизирован нейтронновод, обеспечивающий двойной уход с прямой видимости и доставку максимума интенсивности на всех рабочих длинах волн. Рассмотрена времяпролетная опция в сравнении с реализацией той же системы на малоугловом дифрактометре SANS-3, предложенном в качестве дублера SANS-2 в средней области покрытия по переданному импульсу. Предложена модель поляризатора, работающего на пропускание.

В данном докладе мы представляем концепцию прибора, основные результаты оптимизации нейтронновода и предложения по оптимизации отдельных узлов установки, таких как поляризатор и чопперная система.

Применение синхротронного излучения для анализа цементированных слоев железа

В. В. Волков, А. В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Недостаточная глубина проникновения рентгеновского излучения (РИ) традиционных рентгеновских методов контроля вызывает трудности, к примеру, при анализе науглероженных слоев железа, полученных в процессе цементации. Применение более жесткого РИ не позволяет в полной мере решить эту задачу, так как приводит к уменьшению величины брэгговских углов отражения и, как следствие – к уменьшению чувствительности и точности метода. Решение подобных задач, а также верификация рентгеновских методов при анализе более глубоких слоев, может быть достигнуто с применением синхротронного излучения (СИ).

В данной работе, с целью увеличения точности, глубины анализа и оценки возможностей применения СИ для неразрушающего контроля цементации стали, выполнено численное моделирование профиля дифракционной линии СИ от науглероженного железа. Основы алгоритма моделирования изложены в [1]. При использовании СИ, благодаря высокой степени монохроматизации излучения, достигается необходимая точность в измерении дифракционного уширения профиля линии, связанного с диффузией углерода. При моделировании учитывали длину волны, полуширину инструментальной линии, величину поглощения и экспериментальные данные по диффузии углерода в альфа-железе. Результаты моделирования показывают, что глубина анализируемого слоя может составлять 50 мкм и позволяют определять параметры концентрационного распределения углерода. Таким образом, применение СИ в диапазоне длин волн 0,1–0,7 Å, позволяет повысить точность оценки глубины цементированного слоя и параметров диффузии углерода.

1. *В.В. Волков, А.В. Покоев. Физико-математическое моделирование систем: Материалы IX Международного семинара 30 ноября – 1 декабря 2012 г. Воронеж: ВГТУ, 2012. Часть 1. С. 29–36.*

Высокоустойчивая алмазная оптика для сверхъярких лазероподобных рентгеновских источников

*М. Поликарпов¹, И. Снигирева², J. Morse², В. Юнкин³,
С. Кузнецов³, А. Снигирев²*

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

² European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

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

Интенсивное развитие преломляющей рентгеновской оптики породило создание преломляющих рентгеновских линз [1], которые зарекомендовали себя как надежные, компактные, легкие в установке и сохраняющие когерентные свойства пучка оптические устройства для микро- и нанофокусировки на источниках синхротронного излучения третьего поколения. Ввиду общемировой тенденции к переходу на СИ 4-го поколения возникает потребность в рентгенооптических элементах повышенной радиационной и тепловой стойкости. Алмаз полностью удовлетворяет данным требованиям и подходит для производства линз при наличии соответствующей технологии.

В ходе наших исследований [2] впервые были изготовлены планарные преломляющие линзы методом лазерной резки пластин монокристалла алмаза с толщинами до 1,2 мм, выращенных методами CVD и HPHT. Различные линейные линзы с апертурами до 1 мм и радиусами кривизны в вершине параболы до 500 мкм были произведены и протестированы на станции ID06 в ESRF. Однородное распределение интенсивности в фокусе линз показало высокое качество боковых стенок линз и профиля, позволяя добиться желаемых размеров фокусировки, в соответствии с линейным увеличением линзы.

Данная работа демонстрирует прямой подход к производству преломляющих линз большой апертуры из монокристалла алмаза. Планарные алмазные линзы способны выдерживать тепловые и радиационные нагрузки ввиду большой величины теплопроводности алмаза, низкого коэффициента линейного расширения, высокой температурной стабильности, что делает их многообещающими для применения

в рентгеновских лазерах на свободных электронах и синхротронных источниках 4-го поколения.

1. *Snigirev, A. et al.* A compound Refractive Lens for Focusing High-Energy X-Rays. *Nature*, 1996. 384(6604): p. 49–51.

2. *Polikarpov M. et al.* Large-Acceptance Diamond Planar Refractive Lenses Manufactured by Laser Cutting. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2015. 22(1).

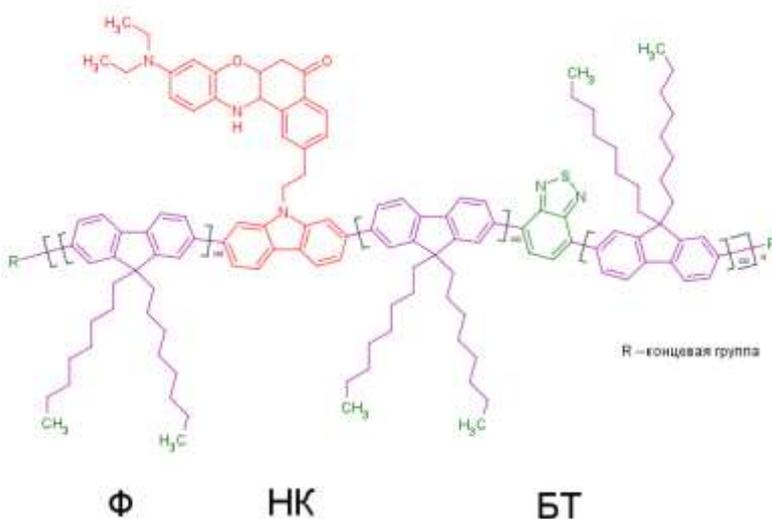


Перенос энергии в сополимерах флуорена с бензтиадиазолом и нильским красным в растворе и пленке

*Р. Ю. Смыслов, Г. И. Носова, Е. Ф. Жукова,
И. В. Березин, Т. Н. Некрасова, А. В. Якиманский*

Институт высокомолекулярных соединений РАН, ФАНО, Санкт-Петербург, Россия

Создание устройств, преобразующих химические, либо химико-биологические воздействия в электрические и оптические сигналы, а также электричество в свет, – важная научно-техническая проблема. Области применения – экологическая защита и техника безопасности, лабораторные исследования и экспресс-анализ, создание анализаторов для робототехники, электролюминесцирующих устройств, транзисторов. Флуоресцирующие сопряженные полифлуорены можно использовать для получения подобных материалов. Один из подходов – синтез сополимеров [1], содержащих: 1) функциональные группы, придающие материалу проводимость – электронную, дырочную; 2) люминесцентные свойства в широком диапазоне видимого света – синюю, зеленую и красную составляющие; 3) растворимость в разных растворителях, включая воду, спирты и другую органику. Возникают фотофизические задачи исследования взаимодействия света и полимеров, переноса энергии электронного возбуждения (ЭЭВ) за счет внутри- и межмакромолекулярного взаимодействия в конденсированном веществе – растворе и блоке. В работе методами люминесцентной спектроскопии и спектроскопии УФ- и видимого света показан перенос ЭЭВ для сополимеров флуорена (Ф) с 2,1,3-бензтиадиазол-4,7-ильными сомономерными звеньями (БТ) и звеньями карбазол-3,6-ила, содержащими производное нильского красного в боковой цепи (НК) макромолекулы (рис.). В спектре испускания при фото- и электровозбуждении Ф дает синий, БТ – зеленый, НК – красный вклад. Установлена роль внутри- и межмакромолекулярных взаимодействий в процессах переноса ЭЭВ при переходе от раствора к пленке. Исследован сольватохромный эффект в сополимерах [Ф-НК-БТ], влияющий на координаты цветности изученных растворов. Полученные данные имеют фундаментальный характер и могут быть использованы при создании био- и хемосенсоров, а также электролюминесцирующих устройств.



Работа по программе Президиума РАН № 8 по

направлению «Полифункциональные материалы для молекулярной электроники». Руководитель направления – акад. С. М. Алдошин.

1. *Nosova G. I.* Synthesis and Photo- and Electroluminescent Properties of Copolyfluorenes with Nile Red Fragments in Side Chains / G. I. Nosova, D. A. Lypenko, R. Yu. Smyslov, I. A. Berezin, E. V. Zhukova, E. I. Mal'tsev, A. V. Dmitriev, L. S. Litvinova, N. A. Solovskaya, O. V. Dobrokhotov, I. G. Abramov, A. V. Yakimanskii // *Polymer Science, Ser. B.* – 2014. – V. 56, No 1. – P. 59–76. – DOI: 10.1134/S1560090414010072.

Высокоуниверсальный дифрактометр для реактора ПИК

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

¹ *Институт теоретической и экспериментальной физики
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия*

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

В концепции наполнения приборного парка реактора ПИК планируются достаточно специализированные установки [1, 2].

Однако на фоне большого числа плюсов такого подхода его очевидным минусом будет невозможность обрабатывать новые методы, новые схемы экспериментов. Таким образом, возникает необходимость создания высокоуниверсального прибора, позволяющего реализовать большой набор схем экспериментов – с различным числом кристаллов, разными длинами волн, рефлексами, диапазонами углов (за счет кристаллов разного совершенства). Такой прибор может использоваться как в пользовательском режиме, так и для тестирования и оптимизации экспериментальных схем при принятии решения о создании новых установок реакторного комплекса.

Основой проекта предлагается взять универсальный нейтронный дифрактометр ИТЭФ – МИФИ [3] с учетом его модернизации. Дифрактометр должен содержать в своей конструкции четырехкристальный блок монохроматизации, два гониометра, детектирующую систему, узел образца, вибро- и термозащиту. Необходима коллекция кристаллов, достаточная для организации широкого круга спектрометрических схем, дополнительное оборудование для варьирования условий на образце.

Такой прибор может быть установлен как на горизонтальном, так и на наклонном канале реактора ПИК [4].

1. Курбаков А. И., Балагуров А. М., Голосовский И. В., Зобкало И. А., Рыбаков В. Б., Черненко Ю. П., Эм В. Т. Совещание и Молодежная конференция по использованию рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в конденсированных средах РНСИ-КС–2014, СПб, Гатчина – 2014, 50 (2014).
2. Москвин Е. В., Григорьев С. В. Там же, 53 (2014).
3. Абов Ю. Г., Елютин Н. О., Денисов Д. С., Матвеев С. К., Эйдлин А. О. ПТЭ, № 6, 67 (1994).
4. Елютин Н. О., Львов Д. В., Тюлюсов А. Н. Cryst. Rep., 57, 1200 (2011).

Разработка детектора-монитора синхротронных источников 4-го поколения

*С. В. Гаврилов¹, Ю. Г. Нарышкин¹, Н. Ю. Швецова¹,
В. Е. Чернов², Д. Л. Дорофеев², С. В. Елфимов², В. А. Зон²*

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

² *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Основной целью работы является разработка детектора-монитора на основе сцинтилляционной технологии для непрерывного и неразрушающего диагностирования пучков лазеров на свободных электронах (FEL) в малоисследованной области энергий фотонов свыше 10 кэВ. Эксперименты, проведение которых в ближайшие годы планируется на синхротронных источниках 4-го поколения, нуждаются в точном измерении таких ключевых параметров, как интенсивность каждого импульса фотонов, положение пучка и его поляризация.

Предлагается поместить внутри вакуумного тракта FEL детектор на базе ионизационной камеры с разреженной газовой средой из благородного газа. Положительный электрод детектора представляет собой кристалл неорганического сцинтиллятора с напылением из алюминия, расположенный вдоль оси пучка. Быстрая фотоэлектронная компонента продуктов взаимодействия фотонов с атомами газа конвертируется при помощи сцинтилляционного кристалла в световой сигнал. Собранный в сцинтилляторе свет через кварцевый световод выводится за пределы вакуумного объема и регистрируется фотоумножителем. При этом, благодаря малому времени высвечивания в сцинтилляторе (20–40 нс), большому коэффициенту конверсии фотоэлектронов в оптические фотоны (10–30 фотонов на 1 кэВ поглощенной энергии) и быстродействию фотоумножителя (до 5 нс) обеспечивается с точностью до 1% измерение интенсивности в каждом импульсе пучка. Традиционные методы контроля параметров пучка при помощи измерения в ионизационных камерах суммарного заряда фотоэлектронов ячейками Фарадея не эффективны для жестких рентгеновских фотонов. Это обусловлено значительным падением сечения фотон-атомного взаимодействия. Поэтому предлагаемое в работе решение проблемы открывает возможности для широкого круга фундаментальных и прикладных исследований на пучках FEL с энергией в новом для исследований диапазоне 10–30 кэВ.

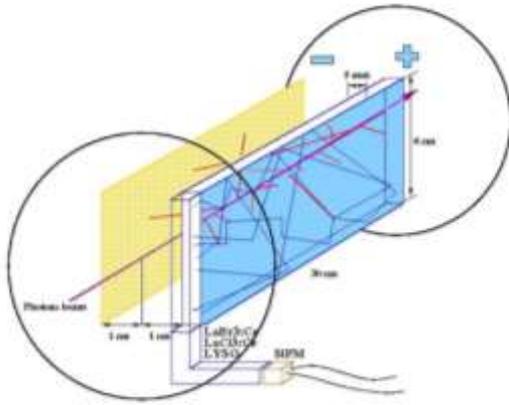
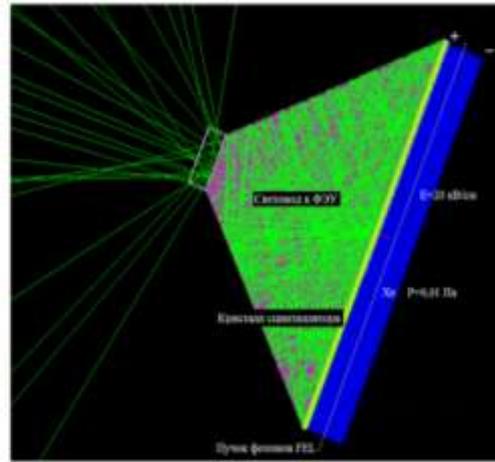


Схема установки сцинтиллятора в вакуумной трубе



Монте-Карло симуляция поглощения фотоэлектрона (≥ 10 кеВ) в материале сцинтиллятора

1. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, S. V. Elfimov, B. A. Zon. Voronezh State University; G. E. Gavrillov and Yu. G. Naryshkin. Petersburg Nuclear Physics Institute (PNPI). Pseudopotential Calculations of Photoionization of Atoms in the X-Ray Photon Energy Range and FEL Beam Monitor Development. *Laser Phys. Lett.* 12 (2015) 036002 (6pp).
2. Sorokin A. A., Bobashev S. V., Feldhaus J., Gerth C., Gottwald A., Hahn U., Kroth U., Richter M., Shmaenok L. A., Steeg B., Tiedtke K. and Treusch R. 2004 AIP Conf. Proc. 705 557–560.
3. Tiedtke K., Feldhaus J., Hahn U., Jastrow U., Nunez T., Tschentscher T., Bobashev S. V., Sorokin A. A., Hastings J. B., Moller S., Cibik L., Gottwald A., Hoehl A., Kroth U., Krumrey M., Schöppe H., Ulm G. and Richter M. 2008 J. Appl. Phys. 103 094511.
4. Saito N., Juranić P. N., Kato M., Richter M., Sorokin A. A., Tiedtke K., Jastrow U., Kroth U., Schöppe H., Nagasono M., Yabashi M., Tono K., Togashi T., Kimura H., Ohashi H. and Ishikawa T. 2010 Metrologia 47 21–23.
5. Richter M., Gottwald A., Kroth U., Sorokin A. A., Bobashev S. V., Shmaenok L. A., Feldhaus J., Gerth C., Steeg B., Tiedtke K. and Treusch R. 2003 Appl. Phys. Lett. 83.

Список участников

ФИО	Организация	E-mail	Стр.
Francois de Bergevin	ESRF	bergevin@esrf.fr	
Neubert Reinhard	Martin Luther University	reinhard.neubert@pharmazie.uni-halle.de	
Sabrina Disch	University of Köln	sdisch@uni-koeln.de	
Schreyer Andreas	Helmholtz-Zentrum Geesthacht	elusive_sky@rocketmail.com	
Абасзаде Рашад Габил	НАН Азербайджана	Abaszade@rambler.ru	
Абубакаров Абу Геланиевич	Южный федеральный университет	abubakarov12@mail.ru	57
Аветисов Владик Аванесович	Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН	vladik.avetisov@gmail.com	5
Авраменко Марина Владиславовна	Южный федеральный университет	avramenko.marina@gmail.com	144
Адельсон Вероника Яковлевна	СПбГУ	adelson_v@outlook.com	58
Азимов Яков Исаакович	ПИАФ НИЦ КИ	azimov@thd.pnpi.spb.ru	11
Акинцов Николай Сергеевич	КубГУ	akintsov777@mail.ru	
Аксенов Виктор Лазаревич	ПИАФ НИЦ КИ	dir@pnpi.spb.ru	
Актерский Андрей Юрьевич	ПИАФ НИЦ КИ	aktersky@gmail.com	
Алексеева Ольга Александровна	СПбПУ	blackhole2010@yandex.ru	15
Алигулиева Хаяла Вагиф	НАН Азербайджан	xayala-firuza@mail.ru	186
Алисултанов Заур Замирович	Институт физики им. Х. И. Амирханова ДНЦ РАН	zaur0102@gmail.com	145

Алтынбаев Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgeniy.alt@lns.pnpi.spb.ru	
Алыев Юсиф Имрайыл	БИПКиППК	yusifali@box.az	59
Амиров Абдулкарим Абдулнатипович	Институт физики ДНЦ РАН	amiroff_a@mail.ru	60
Андреев Всеволод Владимирович	ЧГУ	andreev_vsevolod@mail.ru	61
Андроникова Дарья Александровна	СПбПУ, ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	andronikova.daria@gmail.com	
Аникина Ирина Николаевна	ФГБУК «Политехнический музей»	my-loft@yandex.ru	
Антипов Евгений Викторович	МГУ	evgeny.antipov@gmail.com	9
Антонов Николай Евгеньевич	ИФНИТ СПбПУ	zergiummail@mail.ru	
Антропов Николай Олегович	ИФМ УрО РАН	nikolayantropovekb@gmail.com	
Арефьев Михаил Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	arefievm@mail.ru	
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ НИЦ КИ	dmitri.aristov@gmail.com	
Артикульный Александр Петрович	ОИЯИ	Artikulnyy@ukr.net	
Аскеров Эльмар Багир Оглы	ЦНЯИ Азербайджана	elmar.asgerov@gmail.com	62
Бабинцев Илья Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	il2b@rambler.ru	
Балагуров Анатолий Михайлович	ОИЯИ	bala@nf.jinr.ru	8
Балуян Тигран Григорьевич	МГУ	tarinax@yandex.ru	130

Баталов Лев Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	zlokor88@gmail.com	146
Баталова Анастасия Александровна	СПбГУ	batalova.phys@gmail.com	
Белозерова Надежда Махмудовна	ОИЯИ	NMBelozerova@mail.ru	17
Бережная Диана Максимовна	СПбПУ	magicdivan@gmail.com	
Блатов Алексей Александрович	НИТУ «МИСиС»	al-blatov@yandex.ru	63
Бойцова Ольга Владимировна	ФНМ МГУ	boytsova@gmail.com	64
Боков Александр Владимирович	НИЯУ МИФИ	av.bokov@yandex.ru	
Болдырев Никита Анатольевич	НИИ физики ЮФУ	huckwrench@gmail.com	65
Бондарев Алексей Владимирович	ВГТУ	bondarev_a_v@mail.ru	147
Боржова Кристина Ивановна	ПетрГУ	Borzhova_Kristina@mail.ru	66
Борисов Сергей Аркадьевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	sborisov@pnpi.spb.ru	
Борисова Полина Алексеевна	НИЦ КИ	borisovapa@mail.ru	18
Боркунов Родион Юрьевич	БФУ им. И. Канта	rborkunov@mail.ru	
Босак Алексей Алексеевич	ESRF	bossak@esrfr.fr	
Бронвальд Юрий Алексеевич	СПбПУ	yuramel@gmail.com	40
Бушуев Владимир Алексеевич	МГУ	vabushuev@yandex.ru	7

Быков Виктор Анатольевич	Имет УрО РАН	wildrobert@gmail.com	67
Быков Эдуард Олегович	СПбГУ	mcgector@yandex.ru	
Быков Алексей	ПИЯФ НИЦ КИ	redi87@bk.ru	19
Валеев Ришат Галеевич	ФТИ УрО РАН	rishatvaleev@mail.ru	41, 68
Валяирова Аделя Ринатовна	СПбГУ	adel_chik92@mail.ru	
Вальковский Глеб Андреевич	СПбГУ	Valkovsky_Gleb@mail.ru	69
Ванина Полина Юрьевна	СПбПУ	p.yu.vanina@gmail.com	20
Васильев Андрей Иванович	ПетрГУ	aivasilev92@mail.ru	70
Васильева Дарья Михайловна	СПбГУ	summerdacha64@rambler.ru	
Вахрушев Сергей Борисович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	s.vakhrushev@mail.ioffe.ru	
Вашченко Виктор Эдуардович	СПбГУ	vikvas@mail.ioffe.ru	131
Величко Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	evgen.velichko@lns.pnpi.spb.ru	
Вергентьев Тихон Юрьевич	СПбПУ	tikhon.v@gmail.com	42
Волков Василий Владимирович	СамГУ	volvvv@mail.ru	
Волкова Ольга Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	volkova@pnpi.spb.ru	
Воробьев Алексей Александрович	Университет Уппсала, Швеция	avorobiev@ill.fr	
Выговский Эдуард Сергеевич	БФУ им. И. Канта	edik540@yandex.ru	
Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	gavrilov@pnpi.spb.ru	
Гайсин Айдар Уралович	СПбГУ	darikgais@gmail.com	
Галимзянов Руслан Равильевич	НИТУ «МИСиС»	gal_ruslan@yahoo.com	

Гапон Игорь Васильевич	ОИЯИ	gapon@jinr.ru	21
Гартвик Андрей Витальевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gartwik@lns.pnpi.spb.ru	
Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ НИЦ КИ	gerashch@pnpi.spb.ru	
Гинзбург Саул Лейбович	ПИЯФ НИЦ КИ	ginzbsl@mail.ru	
Гладских Игорь Аркадьевич	Университет ИТМО	138020@mail.ru	71
Голосовский Игорь Викторович	ПИЯФ НИЦ КИ	golosov@pnpi.spb.ru	
Голофастова Алена Сергеевна	ЮФУ	super-woomen2008@yandex.ru	187
Голушко Иван Юрьевич	ЮФУ	vaniagolushko@yandex.ru	148
Гончарова Анна Сергеевна	ФНМ, МГУ	goncharoAS@gmail.com	73
Горковенко Екатерина Артемовна	ОИЯИ	nireta2009@yandex.ru	43
Горфман Семен Вадимович	University of Siegen, Siegen, Germany	gorfman@physik.uni-siegen.de	10
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ НИЦ КИ	grigor@lns.pnpi.spb.ru	
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Григорькин Алексей Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	Ale-Grig@yandex.ru	
Грос (Grosz) Тамаш (Tamas)	Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences	grtamas@gmail.com	
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ НИЦ КИ	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	
Гуглев Константин Александрович	ЮФУ, НИИ физики	googlev@rambler.ru	
Гусейнов Гусейн Джалил	Институт физики НАН Азербайджана	huseyn-1978@mail.ru	74

Гусейнов Рамиз Эльдор оглу	Институт физики НАН Азербайджана	huseynov_ramiz@mail.ru	76
Дадинова Любовь Александровна	ИК РАН	lubovmsu@mail.ru	132
Дежин Виктор Владимирович	ВГТУ	viktor.dezhin@mail.ru	149
Демишев Сергей Васильевич	ИОФ РАН	demis@lt.gpi.ru	12
Джабаров Сакин Гамид оглы	Университет Байройт	sakin@jinr.ru	22
Дмитриев Алексей Иванович	ИПХФ РАН	alex-dmitriev2005@yandex.ru	
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	ИК РАН	dmitrien@crys.ras.ru	
Дмитричева Елена Вячеславовна	ИК РАН	MsDmitrichEva@yandex.ru	77
Довженко Глеб Денисович	ПИЯФ НИЦ КИ	dovjenko.g@gmail.com	
Долганов Павел Владимирович	ИФТТ РАН	pauldol@issp.ac.ru	
Дорошкевич Александр Сергеевич	ОИЯИ	nelya_dor@mail.ru	23
Дубицкий Илья Семенович	ПИЯФ НИЦ КИ	32167i@mail.ru	188
Дудник Майя Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	mayyag.dudnik@gmail.com	44
Елисеев Артем Анатольевич	МГУ	artem.a.eliseev@gmail.com	78
Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ	eliseev@inorg.chem.msu.ru	
Ельникова Лилия Вячеславовна	ИТЭФ	elnikova@itep.ru	150
Ермаков Роман Павлович	Научный центр волоконной оптики РАН	x-ray_diffraction@mail.ru	79
Ермолович Антон Олегович	БГУИР	anton.yermalovich@gmail.com	80

Жилова Ольга Владимировна	ВГТУ	zhilova105@mail.ru	81
Жогин Иван Львович	НПП «Буревестник»	zhogin_il@bourestnik.spb.ru	151, 189
Зайцева Анастасия Ивановна	ПИЯФ НИЦ КИ	zaytseva@lns.pnpi.spb.ru	
Закгейм Александр Львович	НТЦ микроэлектроники РАН	zakgeim@mail.ioffe.ru	
Звягинцев Олег Анатольевич	СПбГУ	kudriashkin@inbox.ru	190
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	zobkalo@pnpi.spb.ru	
Иванов Дмитрий Андреевич	СПбГУ	d.ivanov@phys.spbu.ru	82
Ивичева Светлана Николаевна	ИМЕТ РАН	ivitcheva@mail.ru	24
Ильин Дмитрий Сергеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	digatchi@list.ru	191
Иоффе Александр Исаакович	Jülich Centre for Neutron Science	a.ioffe@fz-juelich.de	
Ищенко Татьяна Васильевна	ИОФ РАН	t_ischenko@mail.ru	152
Каблукова Наталья Сергеевна	РГПУ им. А. И. Герцена	kablukova.natali@yandex.ry	
Калагов Георгий Алибекович	СПбГУ	ktkp@mail.ru	
Калганов Дмитрий Александрович	ЧелГУ	kalganov@csu.ru	83
Калтахчян Айк Цолакович	Российско-армянский (славянский) университет	haykgh@hotmail.com	154
Камынин Алексей Александрович	ВГТУ	silentcurve@gmail.com	
Канюков Егор Юрьевич	НПЦ НАНБ по материалу-	ka.egpor@mail.ru	84

	ведению		
Капустин Дмитрий Игоревич	ИФТТ РАН	d.i.kapustin@mail.ru	85
Каширин Максим Александрович	ВГТУ	mnitro@yandex.ru	
Кибалин Юрий Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kibalin@pnpi.spb.ru	
Кимель Алексей Вольдемарович	МГТУ МИРЭА	a.kimel@icloud.com	
Киселев Игорь Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kisselev@omrb.pnpi.spb.ru	
Клюева Мария	НИТУ «МИСиС»	23sh82vd@gmail.com	86
Козлова Ольга Александровна	БГУИР	olga.bsuir@gmail.com	87
Козловская Ксения Александровна	МГУ	kozlovskaya@ksurrr.com	45
Кольшкин Николай Александрович	НИЦ КИ	nickelprog@mail.ru	46
Кондулукова Дарья Александровна	СПбПУ	dasha557755@mail.ru	
Коневцова Ольга Викторовна	ЮФУ	khelgla@yandex.ru	155
Коник Петр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	104pet104@gmail.com	192
Кононикина Виктория Витальевна	Институт геофизики УрО РАН	Airotkiw@yandex.ru	25
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	kopitsa@ins.pnpi.spb.ru	
Косолапова Кристина Игоревна	СГУ	feelg8d@yandex.ru	
Кочкина Виктория Константиновна	ЮФУ	kochkina94@list.ru	133

Кравцов Евгений Алексеевич	ИФМ УрО РАН	kravtsov@imp.uran.ru	
Кудлис Андрей	СПбГУ	andrewkudlis@gmail.com	
Куликова Татьяна Владимировна	Институт металлургии УрО РАН	kuliko@gmail.com	88
Кунцевич Андрей Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	kuncevich_andrei@mail.ru	
Курбаков Александр Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	kurbakov@pnpi.spb.ru	
Курьлева Юлия Николаевна	ЧГУ	julieta-k@mail.ru	89
Кучугура Мария Дмитриевна	СПбГУ	mariya_kuchugura@mail.ru	26
Лаврентьев Анатолий Александрович	ДГТУ	alavrentyev@dstu.edu.ru	156
Лазебник Иосиф Моисеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	lazebnik@pnpi.spb.ru	
Лебедев Андрей Александрович	НИТУ МИСиС, ОАО «НПП «Квант»	tovarisch-aal@mail.ru	
Лемзяков Алексей Георгиевич	ИЯФ СО РАН	A.G.Lemzyakov@inp.nsk.su	134
Леонтьев Алексей Павлович	МГУ	leontyevalecsey@mail.ru	90
Леонтьев Артем Андреевич	СПбПУ	temazavr93@mail.ru	
Лихолетова Елена Сергеевна	ПИЯФ НИЦ КИ	likholetova@lns.pnpi.spb.ru	
Лобанов Борис Владимирович	МарГУ	lbv_marsu@mail.ru	157
Лобова Анна Алексеевна	ПетрГУ	annetta_lobova@mail.ru	135
Лупицкая Юлия Александровна	ЧелГУ	lupitskaya@gmail.com	91

Львов Дмитрий Владимирович	ИТЭФ НИЦ КИ	lvov@itep.ru	159
Мададзада Афаг Иса Кызы	Национальный центр ядерных исследований Азербайджана	madadzada@jinr.ru	
Мазуренко Владимир Владимирович	УрФУ	vmazurenko2011@gmail.com	13
Максимова Анна Владимировна	ЮФУ	anyuto4ka2006@rambler.ru	93
Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	maleyevsv@mail.ru	
Маношин Сергей Александрович	ОИЯИ	manoshin@nf.jinr.ru	193
Маркова Юлия Николаевна	ИГХ СО РАН	markova.julia.igc@yandex.ru	95
Матасов Максим	СГУ	pooryork86@gmail.com	160
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	matveev@lns.pnpi.spb.ru	
Матвеева Анна Николаевна	ПетрГУ	anyta_macarova1@mail.ru	96
Матвеева Полина Геннадьевна	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	polina.matveyeva@gmail.com	163
Махиборода Александр Викторович	НИИ физики ЮФУ	avmakhaboroda@gmail.com	164
Мирлин Александр Давидович	KIT Karlsruhe, Germany / ПИЯФ НИЦ КИ	alexander.mirlin2@kit.edu	
Миронов Евгений Павлович	НИЦ КИ	qvantus@mail.ru	137
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	27
Митин Дмитрий Михайлович	СГУ	mitindm@mail.ru	

Мищенко Илья Никитич	ФТИАН РАН	IlyaMischenko@rambler.ru	97
Мокану Алина Васильевна	СПбГУ	sparda_93@mail.ru	194
Морозов Максим Сергеевич	СамГУ	maxymor@mail.ru	98
Москвин Евгений Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	mosqueen@pnpi.spb.ru	
Музыка Оксана Игоревна	ПИЯФ НИЦ КИ	muzyko@lns.pnpi.spb.ru	
Мурзашев Аркадий Ислибаевич	МарГУ	nanotubes59@mail.ru	
Муслимов Арсен Эмирбегович	ИК РАН	amuslimov@mail.ru	
Мухин Валерий Николаевич	Институт экспериментальной медицины	Valery.Mukhin@gmail.com	4
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru	
Нагорный Анатолий Васильевич	ОИЯИ	avnagorny@jinr.ru	28
Нажмудинов Рамазан Магомедшапиевич	НИУ «БелГУ»	fizeg@bk.ru	47
Напольский Кирилл Сергеевич	МГУ	knapolsky@gmail.com	99
Никитина Маргарита Александровна	СПбГУ	margaritnikitina@yandex.ru	
Ниязов Рамиль Асхатович	ПИЯФ НИЦ КИ	ramilniyazov@gmail.com	165
Овсяников Александр Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	ovsyankov_a_k@mail.ru	
Овчинникова Елена Николаевна	МГУ	ovtchin@gmail.com	48
Озерин Алексей Юрьевич	ИФВД	m12sl@yandex.ru	166
Окорокров Алексей Иванович	ПИЯФ НИЦ КИ	okorokov@pnpi.spb.ru	

Олейник Андрей Николаевич	НИУ «БелГУ»	andreyoleynik92@mail.ru	195
Осинская Юлия Владимировна	СамГУ	ojv@samsu.ru	101
Павлов Константин Андреевич	ПИЯФ НИЦ КИ	orbita.pk@lns.pnpi.spb.ru	196
Панкин Илья Андреевич	ЮФУ МИЦ «Интеллектуальные материалы»	ilya-loko399@yandex.ru	102
Панкова Юлия Александровна	СПбГУ	yulika1314@gmail.com	104
Петров Сергей Николаевич	СПбГУ	sergeypspb@mail.ru	167
Письменный Владимир Викторович	БФУ им. И. Канта	Filth-@mail.ru	
Платоненко Александр Викторович	Иститут физики твёрдого тела Латвийского университета	alexander.platonenko@gmail.com	168
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ НИЦ КИ	pnk@pnpi.spb.ru	
Подчезерцев Станислав Юрьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	stpcz@mail.ru	
Покоев Александр Владимирович	СамГУ	pokoev@samsu.ru	197
Поликарпов Максим Валерьевич	БФУ им. И. Канта	polikarpov.maxim@mail.ru	198
Положенцев Олег Евгеньевич	ЮФУ	olegplozhentsev@mail.ru	106, 138
Попюк Татьяна Валерьевна	ОИЯИ	shevchenk2o09@yandex.ru	139
Разумная Анна Григорьевна	ЮФУ	razumnaya2@yandex.ru	
Рашковский Александр Юльевич	ЦНИИчермет им. И. П. Бардина	a_rashkovskiy@sprg.ru	169
Робук Виктор Николаевич	ОИЯИ	robuk@jinr.ru	170

Рогалёв Андрей Леонидович	ESRF	rogalev@esrf.fr	
Росляков Илья Владимирович	МГУ	ilya.roslyakov@gmail.com	49
Рошаль Дарья Сергеевна	ЮФУ	rochal.d@yandex.ru	
Румянцева Екатерина Дмитриевна	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	ska-kotya@mail.ru	107
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	runov@pnpi.spb.ru	
Рунова Маина Константиновна	ПИЯФ НИЦ КИ	runova@pnpi.spb.ru	
Рыжов Владислав Анатольевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru	
Рыльцев Роман Евгеньевич	Институт металлургии УрО РАН	rrylcev@mail.ru	171
Рычагова Маргарита Сергеевна	ЮФУ	rita.ry4agova@yandex.ru	
Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ НИЦ КИ	savitska@inbox.ru	
Сагайдачный Андрей Александрович	СГУ	andsag@yandex.ru	172
Саламатин Денис Александрович	ИФВД РАН	dasalam@gmail.com	29
Сарапин Глеб Владимирович	ПИЯФ НИЦ КИ	sarapin.gleb@gmail.com	
Саунина Светлана Ивановна	ЧелГУ	saunina@csu.ru	108
Сафиулина Ирина Альбертовна	СПбГУ	ira93@inbox.ru	
Семененко Константин Иванович	ВГТУ	konst1990i@yandex.ru	51
Сенкевич Станислав Викторович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	SenkevichSV@mail.ioffe.ru	109

Сергеев Илья Анатольевич	DESY	ilya.sergeev@desy.de	6
Сжогина Алина Александровна	ПИЯФ НИЦ КИ	allin_ok2@mail.ru	140
Сизов Александр Вячеславович	ПИЯФ НИЦ КИ	sizoffav1@mail.ru	
Сиколенко Вадим Витальевич	ЛНФ ОИЯИ	vadim.sikolenko@jinr.ru	
Сметюхова Татьяна Николаевна	НИТУ «МИСиС»	smetyukhova.t.n@yandex.ru	
Смыслов Руслан Юрьевич	ИВС РАН	urs@mail.macro.ru	199
Соколов Роман Александрович	НИТУ «МИСиС»	SokolovRMN@gmail.com	
Соколов Александр Иванович	СПбГУ	ais2002@mail.ru	14, 174, 175,176
Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	aosorokin@gmail.com	177
Степанец-Хуссейн Эльдар Хоршидович	ИФТТ РАН, МГУ	eldar.stepanets@yandex.ru	178
Стрюков Даниил Валерьевич	ЮФУ	strdl@mail.ru	110
Сулейманов Наиль Муратович	КФТИ КНЦ РАН	nail.suleimanov@mail.ru	
Сундеев Роман Вячеславович	ЦНИИЧермет им. И. П. Бардина	sundeev55@yandex.ru	53
Суханов Александр Сергеевич	СПбГУ	alexander.s.sukhanov@gmail.com	179
Сухарина Галина Борисовна	ЮФУ	sukharina@mail.ru	111
Суясова Марина Вадимовна	ПИЯФ НИЦ КИ	marinasuyasova@pnpi.spb.ru	142
Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ НИЦ КИ	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ НИЦ КИ	svg@pnpi.spb.ru	

Сыртанов Максим Сергеевич	НИ ТПУ	maxim-syrтанov@mail.ru	112
Таганцев Александр Кириллович	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	alexander.tagantsev@epfl.ch	
Таланов Михаил Валерьевич	НИИ физики ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	113
Тарнавич Владислав Валерьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	
Таровик Эрнест Григорьевич	ПИЯФ НИЦ КИ	khavronin@pnpi.spb.ru	
Тимофеев Виктор Евгеньевич	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ	timofeeviktor@gmail.com	180
Тимченко Николай Алексеевич	НИ ТПУ	timchenko@tpu.ru	55
Титова Александра Олеговна	МГУ	alextitova93@gmail.com	
Тихонов Юрий Андреевич	ЮФУ	tickhonov.yuri@yandex.ru	
Топерверг Борис Павлович	ПИЯФ НИЦ КИ	Boris.Toperverg@RUB.de	
Траченко Виктор Александрович	НИТУ «МИСиС»	trachenko.v.a@gmail.com	
Турченко Виталий Александрович	ОИЯИ	turchenko@jinr.ru	30, 115
Тюлюсов Антон Николаевич	ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	201
Уклеев Виктор Алексеевич	ПИЯФ НИЦ КИ	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	117
Ульянов Владимир Александрович	ПИЯФ НИЦ КИ	ulyanov@pnpi.spb.ru	
Упоров Сергей Александрович	Институт металлургии УрО РАН	segga@bk.ru	118
Упорова Наталья Сергеевна	Институт металлургии УрО РАН	fominans@rambler.ru	

Утесов Олег Игоревич	ПИЯФ НИЦ КИ	utiosov@gmail.com	181
Файзуллин Рафаэль Ринатович	ЧелГУ	fayzullinrr@gmail.com	119
Фам Минь Туан	БелГУ	physicsidea@gmail.com	182
Федотов Андрей Александрович	СамГУ	andrew.f.box@mail.ru	
Филоненко Елена Михайловна	ЧелГУ	ponochkachan@gmail.com	120
Хаишбашев Геворг Арменакович	ЮФУ	gevorik18@gmail.com	143
Хамова Тамара Владимировна	ИХС РАН	LTPP@rambler.ru	
Царьков Максим Владимирович	БФУ им. И. Канта	max.offreal@gmail.com	
Цвященко Анатолий Васильевич	ИФВД РАН	tsvyash@hppi.troitsk.ru	32
Цыпильников Андрей Васильевич	СПбГУ	grifft92@gmail.com	183
Чакичева Ирина Васильевна	СПбПУ	chakicheva_ira@rambler.ru	33
Чен Тэсик	МИТХТ	chen.tt@mail.ru	184
Черненко Юрий Петрович	ПИЯФ НИЦ КИ	yucher@pnpi.spb.ru	
Чернова Полина Владимировна	Университет ИТМО	4p63@mail.ru	122
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyшов@esrf.fr	
Четвериков Юрий Олегович	ПИЯФ НИЦ КИ	yurka@lns.pnpi.spb.ru	124
Чжо Зо Лин	СПбГУ	kyawzawlinn.49@gmail.com	34

Чубова Надежда Михайловна	ПИЯФ НИЦ КИ	chubova@lms.pnpi.spb.ru	35
Чумаков Андрей	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakov@lms.pnpi.spb.ru	
Чумакова Александра Владимировна	ПИЯФ НИЦ КИ	chumakova@lms.pnpi.spb.ru	37
Шарипов Мирзо Зокирович	БухИТИ	m.z.sharipov@rambler.ru	
Шарко Сергей Александрович	НПЦ НАНБ по материалове- ведению	sharko@physics.by	125
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН	mischar@mail.ioffe.ru	127
Швецова Наталья Юрьевна	ПИЯФ НИЦ КИ	nafanya_9888@mail.ru	202
Шевцова Янина Александровна	СПбГУ	shevtsova_jana@mail.ru	
Шишкин Иван Сергеевич	СПбГУ	shishkin-ivan@list.ru	128
Шкорняков Сергей Михайлович	ИК РАН	shkorniyakov@mail.ru	184
Шмайсер Йоханн	НИЯУ МИФИ	vny007@mail.ru	
Шмаков Иван Георгиевич	ИФМ УрО РАН	shmakov@iqms.ru	
Шурыгина Виктория Александровна	СамГУ	shuryginantf@yandex.ru	
Юлаева Юлия Хайбулловна	БашГУ	Yulayeva@mail.ru	
Юшанхай Виктор Юлиевич	ОИЯИ	yushankh@theor.jinr.ru	
Ягафаров Шакир Шавкатович	ЧелГУ	shakir@csu.ru	
Якушечкина Анастасия Климовна	МГУ	yako.msu@yandex.ru	129
Яшина Екатерина Геннадьевна	СПбГУ	yashina_91@inbox.ru	185

Отпечатано в типографии ФГБУ «ПИАФ» НИЦ «Курчатовский институт»
188300, Гатчина Ленинградской обл., Орлова роща
Зак. 59, тир. 220, уч.-изд. л. 11; 19.02.2015 г.