

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Отчет по
программе фундаментальных исследований
Отделения физических наук РАН

**НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ МАТЕРИИ**

Москва, 2007 год

“СОГЛАСОВАНО”

**Зам. Академика-секретаря
Отделения физических наук РАН
Руководитель секции ядерной физики**

“УТВЕРЖДАЮ”

**Академик-секретарь
Отделения физических наук РАН**

Академик А.Н.Скринский

Академик А.Ф.Андреев

« ____ » _____ 2007 г.

**Отчет
по программе фундаментальных исследований
Отделения физических наук РАН**

**НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ МАТЕРИИ**

Головная организация:
Соисполнители Программы:

ПИЯФ РАН (Гатчина),
ИЯИ РАН (Москва),
ФТИ РАН (Санкт-Петербург)
ФИАН РАН (Москва)
ИФМ УрО РАН
ИЯФ СО РАН *)
ИФ СО РАН *)

*) За счет собственных средств

Отчет по программе фундаментальных исследований Отделения физических наук РАН

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВА И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИИ

Направление 1: Исследование фундаментальных свойств нейтрона

Проект 1.1: Прецизионное измерение времени жизни нейтрона

Подпроект 1.1.1.

Измерение времени жизни методом хранения ультрахолодных нейтронов (УХН) в материальной криогенной ловушке с гравитационным клапаном.

Руководитель проекта: проф. А.П. Серебров

Проведено моделирование эксперимента MAMBOI, выполненного группой ILL в 1989 г., опубликованного в Phys.Rev.Lett.v63,№6 p593.

В эксперименте было использовано покрытие из фомблина при комнатной температуре. Как было выяснено в последствии, на жидком фомблиновом покрытии при комнатной температуре происходит процесс квазиупругого рассеяния. Моделирование этого эксперимента было сделано методом Монте-Карло с использованием 40 узлов компьютерного кластера ПИЯФ.

В результате проведенного моделирования было показано, что учет процесса квазиупругого рассеяния требует ввести поправку 7.3 s к результату времени жизни нейтрона 887.3 ± 3.0 s. Таким образом поправленное значение времени жизни нейтрона составляет 880.3 ± 3.0 s. Корректированное значение находится в разумном согласии с результатом ПИЯФ для времени жизни нейтрона 878.5 ± 0.8 s.

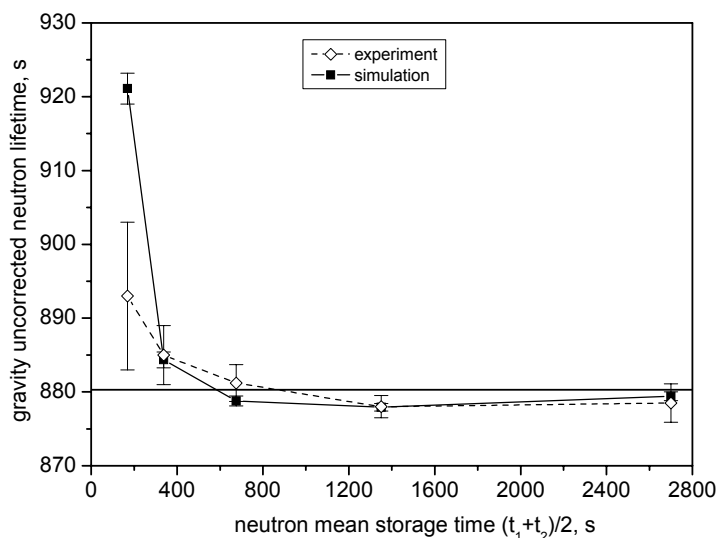


Рис. Зависимость рассчитанного по Монте-Карло и экспериментально измеренного нескорректированного времени жизни нейтрона от его времени хранения. ($\tau_B = 880.3$ s).

Таблица. Экспериментальные данные с новыми поправками и новое значение на время жизни нейтрона.

Storage interval (s)	τ_β uncorrected (s)	$\Delta\tau$ correction (s)	τ_β corrected (s)
112.5-225	893 (10)	-40.81 (2.09)	852.19 (10.21)
225-450	885.0 (4)	-4.05 (1.08)	880.95 (4.14)
450-900	881.2 (2.5)	+1.52 (0.67)	882.72 (2.59)
900-1800	878.0 (1.5)	+2.38 (0.52)	880.38 (1.59)
1800-3600	878.5 (2.6)	+0.90 (0.60)	879.4 (2.67)

$$\tau_n = 880.3(1.2) \text{ s}$$

Подпроект 1.1.2.

Измерение τ_n методом хранения ультрахолодных нейтронов в магнитной ловушке.

Руководитель проекта: к.ф.-м.н. В.Ф.Ежов

Завершен первый этап эксперимента по измерению времени жизни нейтрона в магнитной ловушке, собранной из постоянных магнитов. Впервые для экспериментов, использующих магнитное хранение нейтронов, достигнута точность измерения 1.6 с., которая сравнима с точностью лучших экспериментов по измерению времени жизни нейтрона. Измеренное значение 878.2 ± 1.6 с. отличается от среднемирового и совпадает с предсказанием Стандартной модели. Данный результат имеет принципиальное значение для проверки унитарности матрицы Кобаяши-Маскава и является ключевым параметром при проверке моделей нуклеосинтеза при формировании Вселенной, после Большого взрыва.

Схема эксперимента отличается простотой и обладает рядом преимуществ, позволивших исключить основные систематические эффекты, ограничивающие точность экспериментов по поиску времени жизни нейтрона.

1. Покрытие внутренних поверхностей ловушки фомблином позволяет собирать деполяризованные нейтроны и, тем самым, контролировать основной канал возможных потерь нейтронов непосредственно в процессе их хранения в ловушке.
2. Наполнение ловушки с помощью нейтронного лифта позволяет контролировать количество нейтронов при каждом наполнении ловушки.
3. Имеется возможность предварительной подготовки нейтронного спектра, непосредственно перед наполнением ловушки.
4. Исключен подогрев нейтронов при включении магнитного поля в магнитном затворе.
5. Возможность включения принудительной деполяризации нейтронов позволяет измерять эффективность сбора деполяризованных нейтронов.

Проект 1.2:

Поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона.

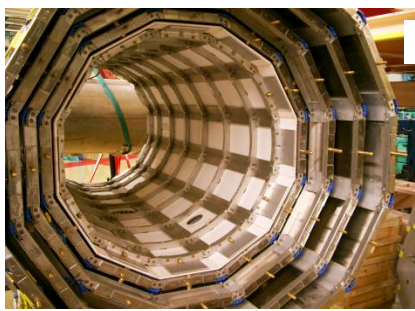
Подпроект 1.2.1.

Поиск ЭДМ нейтрона магнитнорезонансным методом.

Создание мультикамерного ЭДМ-спектрометра

Руководители проекта:
проф. А.П.Серебров (ПИЯФ РАН)
академик РАН Е.Б.Александров (ФТИ РАН)

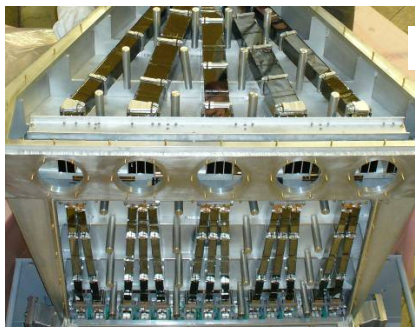
Завершено изготовление мультикамерного ЭДМ спектрометра в ПИЯФ. Спектрометр транспортирован и смонтирован на реакторе института Лауэ-Ланжевена. (Гренобль, Франция). Спектрометр использован в эксперименте по поиску зеркальной темной материи, а именно по поиску переходов нейтрона (n) в зеркальный нейтрон (n'), в гипотетическую стерильную частицу с той же массой. Установлено экспериментальное ограничение на время n - n' переходов $\tau_{osc} \geq 414s$ (90%CL). Результаты опубликованы препринтом A.Serebrov et al, arXiv:0706.300v1[nucl-ex], а также доложены на двух международных конференциях.



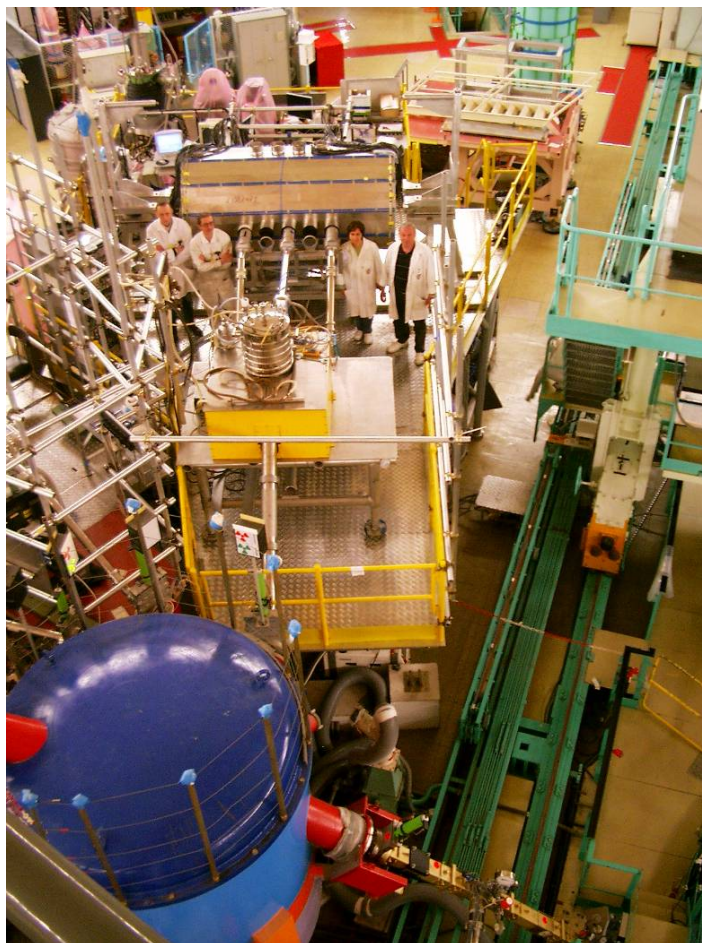
1



2



3



4

Рисунок. 1. Четырехслойный магнитный экран. 2. Мультикамерная система ловушек УХН. 3. Нейтроноводная система мультикамерного ЭДМ спектрометра. 4. Общий вид спектрометра на немагнитной платформе: на переднем плане турбина (источник УХН ILL), далее сверхпроводящий соленоид-поляризатор и магнитный экран.

Модернизация существующего магнито-резонансного ЭДМ-спектрометра ПИЯФ

Руководители проекта:
академик РАН В.М.Лобашев
к.ф.-м.н. А.Н.Пирожков

В 2007 году продолжены работы, направленные на модернизацию экспериментальной установки ПИЯФ для измерения ЭДМ нейтрона магнито-резонансным методом с помощью УХН. Отличительной особенностью предлагаемой схемы эксперимента являются магнитометры «сэндвич»-типа на основе поляризованного ^3He с рабочими ячейками большой площади, между которыми будут располагаться камеры хранения УХН.

Совместно с НИТИОМ (С-Пб) планируется создание плоских оптических ячеек диаметром 550 мм и высотой рабочей области – 30 мм. Материал ячеек – ситалл, обладающий большой прочностью, что важно для работы с внешним избыточным давлением 1 атм. Малое газовыделение ситалла со стенок важно для возможности продолжительной работы с чистым ^3He . В настоящее время разработана технология изготовления и обработки цилиндрических элементов таких ячеек. На образцах $D=137$ мм ведутся исследования по получению герметичных соединений ситалловых элементов с помощью пайки ситаллоцементом. Вакуумные испытания показали, что пока не всегда удается получить требуемую герметичность таких соединений, отработка технологии ситалловой пайки продолжается.

Возможность применения ситалла для рабочих ячеек магнитометра доказана экспериментально: впервые в этом году совместно с группой проф. В.Хайля, (Университет И.Гутенберга, Майнц, Германия) были проведены опыты по хранению поляризованного ^3He в ячейках диаметром 137 мм и высотой 100 мм в полях $\sim 10\text{Э}$. Для ячеек из ситалла различного состава и с разной обработкой внутренних поверхностей получены времена хранения 8 - 16 часов, что на порядок лучше, чем у ячеек из пирекса.

Макет ^3He -магнитометра с внешней ячейкой оптической накачки поляризации гелия и с плоской рабочей ячейкой из стекла диаметром 30 см и высотой 5 см испытывался при давлении гелия-3 ~ 1 мбар в условиях низкого ведущего магнитного поля (около 400 нТл) в Берлинской магнитной комнате (Институт РТВ, Берлин, Германия). Полученные времена продольной и поперечной релаксации гелия-3 (несколько тысяч секунд) доказывают возможность применения магнитометра такого типа в экспериментах по поиску ЭДМ нейтрона. Чувствительность опытного образца - 3.7 фТл за 150 сек измерения.

Проведенные исследования показали, что неоднородности магнитного поля в рабочем объеме ячейки существенным образом влияют на время поперечной релаксации гелия. Для рабочих ячеек диаметром 550 мм требования к однородности магнитных условий в рабочем объеме спектрометра возрастают.

В 2006 г. в PSI (Paul Scherrer Institute, Switzerland) начала формироваться европейская международная коллаборация “nEDM” с целью создания новой высокочувствительной установки для измерения ЭДМ нейтрона и планами постановки этого эксперимента на «спаллейшн»-источнике УХН, пуск которого намечен в PSI на конец 2008 года. Здесь ожидается получить интенсивность УХН, значительно превышающую интенсивность источника УХН в Гренобле. Создание высокоинтенсивного источника УХН возможно в ближайшие годы и в Германии.

В феврале и июле 2007 г. к этой коллаборации присоединились университеты Майнца и Мюнхена, с которыми группа ИСВ ОНИ сотрудничает в течение нескольких лет. В этой ситуации появилась вероятность того, что совместные разработки ПИЯФ и наших немецких коллег, научные предложения ПИЯФ, касающиеся усовершенствования ЭДМ-установки, могут быть использованы международной коллаборацией в PSI без участия ПИЯФ.

ПИЯФ длительное время был лидером в ЭДМ-эксперименте, но если в Швейцарии или Германии появится новый интенсивный источник УХН, то там будет возможен значительный прогресс в эксперименте по поиску ЭДМ нейтрона. Поскольку у нас в настоящее время нет интенсивных источников УХН, Россия безусловно должна участвовать в таком проекте.

В октябре 2007г. в г. Майнц (Германия) состоялось рабочее совещание участников “nEDM”-коллаборации, которая к этому времени уже насчитывала 10 институтов из шести стран Европы. По приглашению немецкой стороны в совещании приняли участие три представителя группы ИСВ ОНИ. Была представлена позиция ПИЯФ по вопросу развития ЭДМ проекта, возможности ПИЯФ и готовность участвовать в общей работе на основе равноправного сотрудничества. В результате обсуждения руководством коллаборации наших предложений, ПИЯФ РАН, представленный группой ИСВ, был принят в члены “nEDM”-коллаборации, и нами было подписано соответствующее Соглашение.

Подпроект 1.2.2. Поиск ЭДМ нейтрона кристалл-дифракционным методом (проект ДЭДМ)

Руководитель проекта: проф. В.В.Федоров

Проведена обработка и анализ результатов тестового эксперимента по поиску электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона кристалл-дифракционным методом,

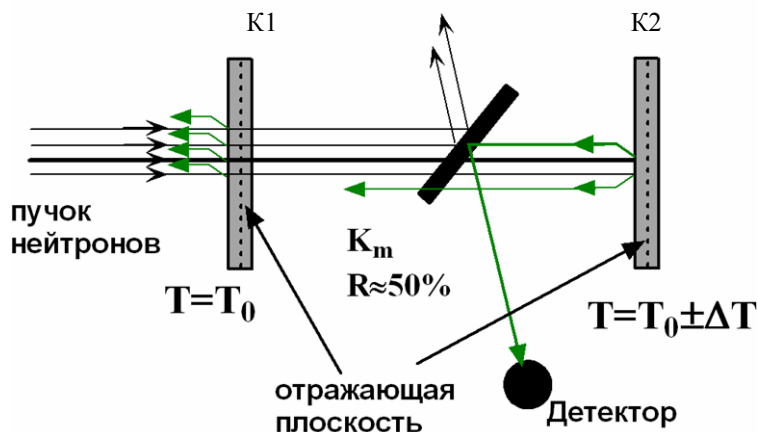


Рис.1. Принципиальная схема эксперимента. Разница в межплоскостных расстояниях двух кристаллов K1 и K2 приводит к возникновению рефлекса от второго кристалла (K2), который и регистрируется детектором.

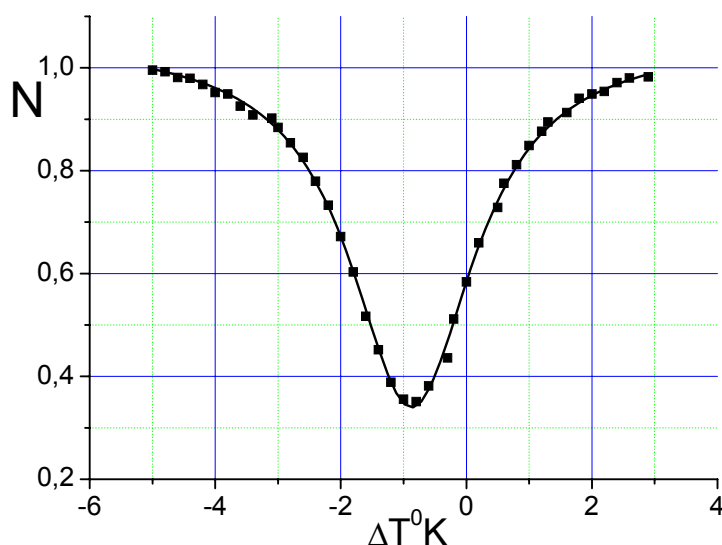


Рис.2. Зависимость интенсивности регистрируемых нейтронов от разницы температур двух кристаллов кварца, см.Рис.1.

проведенного в конце 2006г. Измеренное в данном эксперименте значение ЭДМ нейтрона составило

$$d_n = (2.5 \pm 6.5) 10^{-24} e \cdot cm$$

Показано, что для современных потоков пучков холодных нейтронов и существующих кристаллов кварца чувствительность к ЭДМ нейтрона в полномасштабной установке может достигать $(2-3) \cdot 10^{-25}$ е см в сутки, что соответствует современной точности методов, основанных на использовании ультрахолодных нейтронов.

В рамках данного проекта развита методика анализа степени совершенства идеальных кристаллов, основанная на дифракции под углом $\theta_B=90^\circ$ (см. Рис. 1.). Различие в межплоскостном расстоянии кристаллов K1 и K2 приведет к смещению двухкристальной при изменении межплоскостного расстояния второго кристалла, которое варьировалось за счет теплового расширения, путем изменении его температуры.

Пример экспериментально измеренной зависимости интенсивности от разницы межплоскостного расстояния двух кристаллов показан на Рис.2. Точность определения межплоскостного расстояния в данной схеме эксперимента может составлять $\Delta d / d \sim (10^{-7} - 10^{-8})$.

Начата серия экспериментов по исследованию совершенства реальных кристаллов кварца, показано, что для различных образцов искусственного кварца разброс в величине межплоскостного расстояния может быть меньше чем 10^{-6} , что является достаточным, для применения данных кристаллов в эксперименте по поиску ЭДМ нейтрона.

Проведена закупка партии кристаллов кварца и в данный момент ведутся исследования степени их совершенства с применением данной методики.

[1] V.V. Fedorov, E.G. Lapin, E. Lelievre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, F. Tasset, V.V. Voronin, First Observation of the Neutron Spin Rotation for Laue Diffraction in a Deformed Non-centrosymmetric Crystal, Preprint PNPI-2677, Gatchina, 2006. 16 p.

Проект 1.3:

Измерение асимметрий β -распада нейтрона.

Руководитель проекта: проф. А.П.Серебров

Завершены работы по изготовлению сверхпроводящего соленоида, проведены криогенные испытания с заливкой жидкого гелия. Испаряемость жидкого гелия составила 3л/час, что является приемлемым для криостата такого объема (длина 4.6 м, диаметр 0.8 м).

Разработана Монте-Карло модель эксперимента, проведены расчеты, указывающие на возможность достижения проектной точности.

Из-за недостаточного финансирования не закуплены сверхпроводящие тоководы и источники питания, поэтому магнитные испытания сверхпроводящего соленоида не проведены.





Рисунок. Сверхпроводящий соленоид для измерения асимметрий β -распада нейтрона (различные стадии сборки).

Проект 1.4:

Исследование формфактора нейтрона на пороге реакции $e^+ e^- \rightarrow n \text{ anti } n$

Руководитель проекта:

д.ф.-м.н. С.И. Середняков (ИЯФ СО РАН)

В течение 2007 года продолжались измерения временного разрешения с прототипом анинейтронного детектора с целью разработки такого проекта электроники, который позволял бы иметь временное разрешение не хуже 1 нсек.

Продолжались измерения временного разрешения с прототипом анинейтронного детектора с разными вариантами оцифровывающей электроники и входного формирователя-усилителя. Был создан стенд для временных измерений, в нем используется счетчик NaI(Tl) в виде усеченной пирамиды в алюминиевом корпусе с фототриодом. Сверху и снизу находятся запускаяющие сцинтилляционные счетчики. На рис.1 показан спектр временного разрешения от космических мюонов с энергосигналом в NaI(Tl) около 100 МэВ. Величина разрешения составляет 3 наносекунды. Входной сигнал сначала интегрируется, а затем преобразовывается с инверсией знака. Так сделано, чтобы удовлетворить параметрам существующего канала калориметра. Конечно, результат 3 нсек нельзя назвать слишком хорошим, но нужно иметь в виду, что сигнал с NaI(Tl) снимается не фотоумножителем, а фототриодом, поэтому разрешение в большой степени определяется шумами предусилителя и формирователя. Наша цель – получить временное разрешение не хуже 1 нсек при

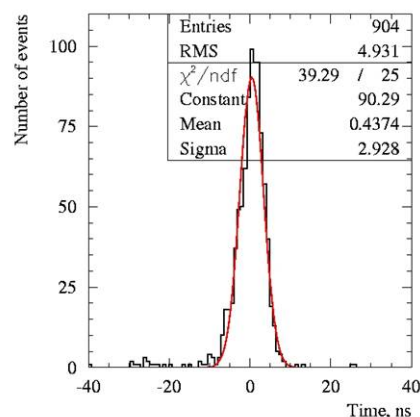


Рис.1 Гистограмма временного разрешения прототипа анинейтронного детектора

энергии 500 МэВ, что сегодня выглядит вполне выполнимой задачей.

Было проведено моделирование взаимодействия антинейтронов в калориметре NaI(Tl). Полученный спектр энерговыделений моделирования GEANT-4 с экспериментом не сравнивался, так как у нас пока нет данных. Важным результатом было то, что в малой части событий энерговыделение заметно превышает энергию аннигиляции $2m_N$ на сотни МэВ, что не находит пока полного понимания. Кроме того, мы провели сравнение экспериментальных данных по аннигиляции остановившихся антипротонов в неоне с моделированием пакетом GEANT-4. И здесь отличие эксперимента и моделирования было очень большим $> 100\%$. Все это в будущем приведет нас к необходимости искать такие критерии выделения нейтронных событий, которые не зависят от точности моделирования, например, время пролета.

По остальным системам СНД, имеющим значение для нейтронного эксперимента, в течение года было заметное продвижение по калориметру, электронике, мюонному детектору, системе сбора данных и системе обработки данных. Конечно, в таком крупном детекторе как СНД, все системы сильно переплетены и рассматривать, например, калориметр без электроники или электронику без системы сбора данных, очень затруднительно. Но основной результат конца 2006 года в том, что сегодня у нас три системы – калориметр, электроника и система сбора данных работают вместе. Мы проводим непрерывные круглосуточные циклы измерений (runs) без выключения всей аппаратуры в течение месяца. Учитывая то, что центральная дрейфовая камера близка к завершению и то, что в коллайдере ВЭПП-2000 уже есть пучки, можно выразить предположение, что в будущем 2007 году начнутся фоновые измерения, важные для нейтронного эксперимента.

В начале этого года в ИЯФ состоялась международная конференция по физике в области энергии 1-3 ГэВ, где был представлен доклад о данном проекте. Единственным другим местом, где потенциально может быть измерен времениподобный формфактор нейтрона, является лаборатория Frascati (Италия). Это будет возможно, если INFN согласится с предложением R.Baldini и др. об увеличении энергии DAFNE до 2.4 ГэВ в с.ц.м. Такое развитие событий представляется не очень вероятным, учитывая наличие другого амбициозного проекта в Италии - супер-В-фабрики.

В заключение приводится слайд из доклада автора на конференции в Новосибирске (рис.2), где показаны существующие данные по формфактору нейтрона вблизи порога – единственная точка с ошибкой 100%, и ожидаемая точность в эксперименте СНД - множество точек. Видно, что в результате успешного проведения нашего эксперимента возможно радикальное улучшение точности формфактора нейтрона во времениподобной области.

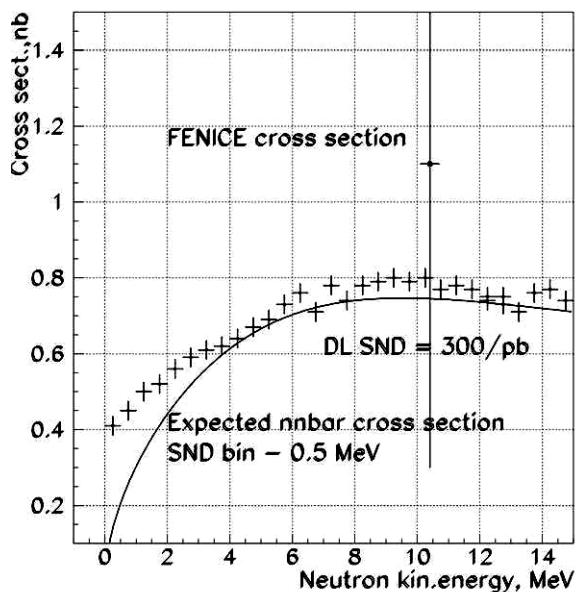


Рис.2 Расчетное сечение процесса $e+e \rightarrow n$ $\bar{n}$ (сплошная кривая), расчетная точность (множество точек с ошибками) и единственный предыдущий результат измерения формфактора нейтрона.

Направление 2:

Поиск эффектов отклонения от Стандартной модели

Проект 2.1.

Поиск и исследование эффектов нарушения четности в реакциях взаимодействия нейтронов с легкими ядрами.

Руководитель проекта: д.ф.-м.н. В.А.Весна

1.Доработка и испытание на стенде новой установки для измерений Р-нечетной асимметрии в частотном диапазоне переключения поляризации нейтронов выше основных частот флуктуаций мощности реактора.

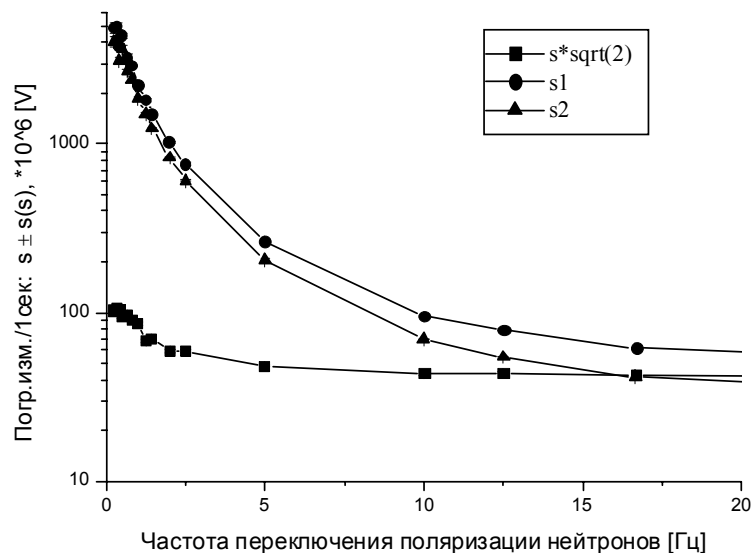
Проведенные в 2001 – 2002 гг. измерения коэффициентов Р-нечетной асимметрии в реакции $^{10}\text{B}(n,\alpha)^7\text{Li}^* \rightarrow \gamma \rightarrow ^7\text{Li}(\text{o.c.})$ показали, что относительная погрешность измерений эффекта за одни сутки составляет $\sigma = 2.6 \cdot 10^{-7}$. Расчетная погрешность при этом была равна $\sigma(\text{расчет}) \sim 1 \cdot 10^{-7}$.

Была выдвинута гипотеза, что, по-видимому, в каждом измерительном канале рассматриваемой системы при наблюдении асимметрии в гамма-квантах присутствует низкочастотный некоррелированный между каналами шум, который не дает возможность при работе с интеграторами скомпенсировать погрешность измерений до значений, соответствующих статистике изучаемой ядерной реакции. Поскольку в случае гамма-детекторов чувствительная площадь фотодиода, регистрирующего свет от кристаллов NaJ(Tl), намного меньше диаметра кристалла, происходит значительная потеря света. В связи с такой потерей приходится сильно увеличивать усиление канала для достижения разумных величин регистрируемых сигналов. Большое усиление приводит к возникновению в канале “микрофонного эффекта” за счет механической вибрации предусилителей, который, естественно, разный для двух измерительных каналов. Его невозможно скомпенсировать обычной процедурой компенсации синхронных шумов, использующей вычитание значений напряжений в каналах измерения.

В работе [1] был впервые реализован принцип регистрации токовых сигналов, используемый для измерения Р-нечетной асимметрии, при частотах переключения поляризации нейтронов выше частот флуктуаций мощности реактора, дающих основной вклад в спектральную плотность мощности шума. Были проведены измерения Р-нечетных эффектов в реакции с хлором при частоте переключения эффектов 0.5 Гц и 10 Гц. Погрешность измерений эффекта при частоте 10 Гц была в 1.5 раза меньше погрешности при частоте 0.5 Гц. Измерение на повышенных частотах переключения спина нейтрона, видимо, “обрезает” низкочастотную некоррелированную составляющую двух сигналов, что уменьшает погрешность измерений.

Для целей уменьшения погрешности измерений была создана новая система регистрации токовых сигналов, работающая в диапазоне частот переключения эффекта 0.01 – 2 Гц.

На рис. представлены погрешности измерений Р-нечетной асимметрии для двух одиночных каналов (s_1 , s_2) и погрешность измерений для разности каналов, в которой были скомпенсированы флуктуации мощности реактора (s), в зависимости от частоты переключения поляризации нейтронов. Измерения проводились на пучке нейтронов PF1В реактора ИЛЛ (Гренобль, Франция). Измерялась Р-нечетная асимметрия гамма-квантов в реакции $^{10}\text{B}(n,\alpha)^7\text{Li}^* \rightarrow \gamma \rightarrow ^7\text{Li}(\text{o.c.})$.



Из рисунка видно, что погрешность измерений для одиночного канала резко уменьшается с увеличением частоты переключения поляризации. Начиная уже с частоты 1 Гц, происходит уменьшение погрешности измерений и для разностного канала. Значение погрешности при нашей рабочей частоте переключения поляризации нейтронов $f = 5$ Гц с применением компенсации флуктуаций мощности реактора составляло величину $\sigma \sim 1.2 \cdot 10^{-7}$ в сутки, что в ~ 2.2 раза меньше, чем при измерениях на частоте переключения поляризации нейтронов $f = 0.5$ Гц.

2. Измерение Р-нечетной асимметрии γ -квантов в реакции $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}^* \rightarrow \gamma \rightarrow ^7\text{Li}(\text{o.c.})$ на реакторе ИЛЛ (Гренобль, Франция) (по предоставлению времени) на новой установке с целью повышения точности измерений.

Проведенные измерения коэффициента Р-нечетной асимметрии в реакции с бором дали значение: $\alpha_{\text{PN}} = + (2.56 \pm 3.83) \cdot 10^{-8}$ (19.5 суток).

Суммарный результат с учетом измерений, проведенных ранее в 2001-2002 гг,

$$\alpha_{\text{PN}} = + (3.84 \pm 2.7) \cdot 10^{-8}$$

На основании измерений можно дать оценку константы нейтрального тока f_{π} , исходя из кластерной модели $\alpha_{\text{PN}}(\text{теор.}) = 0.16 \cdot f_{\pi} - 0.028 \cdot h_p$ для реакции нейтронов с бором и значения для константы заряженного тока $h_p = -11.4 \cdot 10^{-7}$ (“лучшее значение”)

$f_{\pi} = (0.4 \pm 1.7) \cdot 10^{-7}$, что меньше “лучшего значения” для нейтрального тока $f_{\pi} = 4.7 \cdot 10^{-7}$.

[1] В.А. Весна, Е.В. Шульгина, ПТЭ. 1 (2005) 62

Проект 2.1.

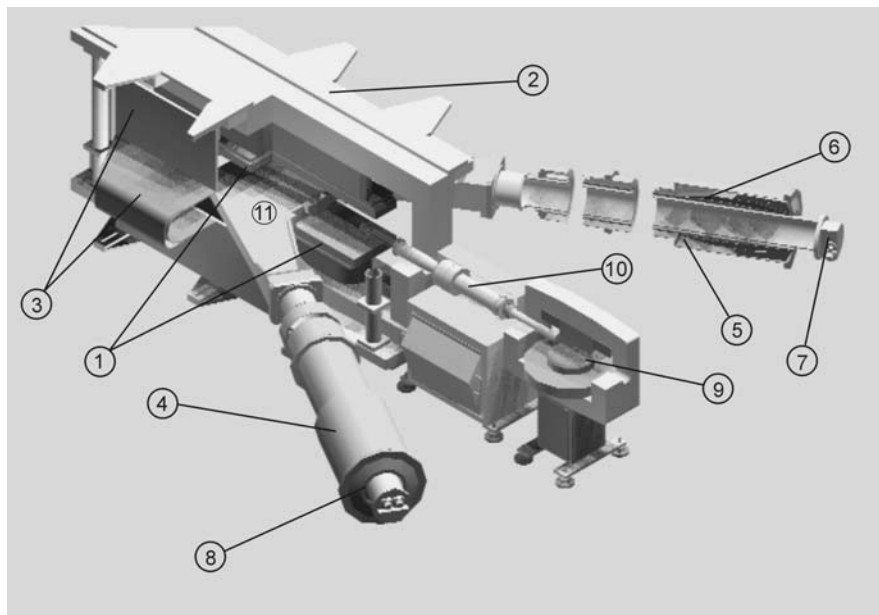
Исследование сверхразрешенных β -переходов и определение констант слабого взаимодействия в области нейтроноизбыточных ядер.

Руководитель проекта: д.ф.-м.н. И.А.Митропольский

Конструирование и подготовка спектрометрического комплекса для прецизионного изучения β -спектров нейтроноизбыточных ядер: продолжение проектирования вакуумной системы, вакуумной камеры и коллиматорной и фокусирующей частей спектрометра, изготовление вакуумной камеры, сборка и юстировка магнитной призмы.

Выполнено в 2007г.:

- 1) Продолжено изготовление вакуумной камеры (11) спектрометра.
- 2) Продолжено проектирование коллиматорной и фокусирующих линз и прилегающих узлов вакуумного тракта (4,5,6), начато изготовление узлов.



Направление 3:

Поиск и исследования фундаментальных явлений, сопровождающих разрыв ядерной материи.

Проект 3.1:

Исследования динамики процесса деления тяжелых ядер при низких энергиях возбуждения

Руководитель проекта: проф. Г.А.Петров

На пучке реактора ВВР-М №7 произведены измерения угловых и энергетических распределений быстрых нейтронов деления ^{235}U монохроматическими нейтронами со средней длиной волны 1.5 Ангстрема. Выполнена обработка полученных данных. Результаты готовятся к публикации Препринтом ПИЯФ РАН.

На радиальном пучке №1 реактора ВВР-М завершены измерения угловой зависимости эмиссии парных нейтронов деления ^{235}U . Результаты направляются в печать.

Проект 3.2:

Экспериментальные исследования тройной Т-нечетной корреляции эмиссии легких заряженных частиц и нейтронов в делении ^{235}U холодными поляризованными нейтронами

Руководитель проекта: проф. Г.А. Петров

На высоко-поточном реакторе Института Лауэ-Ланжевена впервые выполнены детальные исследования зависимости величины сдвига угловых распределений легких заряженных частиц тройного деления ^{235}U холодными поляризованными нейтронами (ROT-эффект) от энергий частиц и осколков при различных массовых отношениях осколков деления. Прделанный анализ полученных данных в рамках имеющихся теоретических гипотез

позволяет утверждать, что впервые наблюдаемый нами физический эффект открывает совершенно новые возможности исследований динамики деления при низких энергиях возбуждения.

Проект 3.3:

Спектрометрия по времени замедления нейтронов в свинце

Руководитель проекта: д.ф.-м.н. Э.А.Коптелов (ИЯИ РАН)

В 2007 году на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце СВЗ-100 ИЯИ РАН совместно с ГНЦ «Физико-энергетический институт» (ФЭИ) выполнялась программа измерения сечений деления младших актинидов. Интерес к ядрам этой группы связан с нерешенными проблемами физики переходных состояний при делении сильно деформированных ядер и практическими вопросами ядерной трансмутации отходов ядерной энергетики. Исследовались высоко α – активные и спонтанно делящиеся изотопы 243 , 244 , ^{246}Cm сверхвысокой чистоты. В качестве детекторов осколков деления использовались быстрые ионизационные камеры с делящимися слоями массой от 4 до 20 мкг. Для мониторингирования потока нейтронов и калибровки временной шкалы нейтронного спектрометра использовались камеры деления с ^{235}U , ^{239}Pu и ^{240}Pu .

В измерениях прошла успешные испытания новая регистрирующая электронная 32-канальная система сбора, накопления и первичной обработки информации на основе оцифровки сигналов детекторов. Система также позволяет осуществлять временную привязку физических измерений к импульсу протонного пучка ММФ и мониторингирование стабильности нейтронного потока. Система разработана и создана сотрудниками ИЯИ РАН.

Сечения деления изотопов 243 , 244 , ^{246}Cm получены с погрешностью (5-10) % в области энергий нейтронов от 1 эВ до 20 кэВ. В проведенном эксперименте для изотопов 244 , ^{246}Cm достигнута лучшая статистика и лучшее разрешение по сравнению с единственно имеющимися данными RPI (США), полученными на спектрометре СВЗ-75 RINS. Для ^{243}Cm данные ниже 20 эВ получены впервые. Выше 20 эВ полученные данные хорошо согласуются с результатами бомбового эксперимента (Лос-Аламос, США). Других экспериментальных данных в рабочей области энергий СВЗ-100 не имеется. Сравнение с рекомендованными данными из библиотеки ENDF/B-VII показывает, что полученные группой ИЯИ-ФЭИ данные позволяют существенно уточнить нейтронные параметры низколежащих резонансов для младших актинидов.

Завершена обработка результатов измерений сечения деления ^{236}U в области энергии нейтронов $E_n = 0.001 - 20$ кэВ. Определены величины резонансного интеграла для резонансов при энергии 5.45 эВ и 1.28 кэВ и оценены их делительные ширины. Подтверждена промежуточная структура в сечении подбарьерного деления $^{236}\text{U}(n, f)$. Проведенный анализ позволил уточнить имеющиеся теоретические оценки параметров связи состояний класса II с компаунд-уровнями делящегося ядра.

Показано, что рекомендованные данные по реакции $^{236}\text{U}(n, f)$ в резонансной области энергий (из библиотеки ENDF/B-VII) являются явно неудовлетворительными и должны быть пересмотрены.

Построена математическая модель спектрометра СВЗ-100, позволяющая рассчитать методом Монте-Карло форму линии спектрометра, статистические моменты распределения по энергии и плотность нейтронов в зависимости от времени замедления, а также временные спектры событий деления. Модель учитывает термализацию нейтронов, влияние технологических каналов СВЗ и наличие примесей водорода и алюминия в свинце. В рамках модели проведены расчеты зависимости функционалов $\langle E \rangle$ и $\langle \sigma \cdot v \rangle$ от времени замедления. Разработанная модель СВЗ-100 позволяет расширить энергетический диапазон спектрометра до эпитепловых энергий.

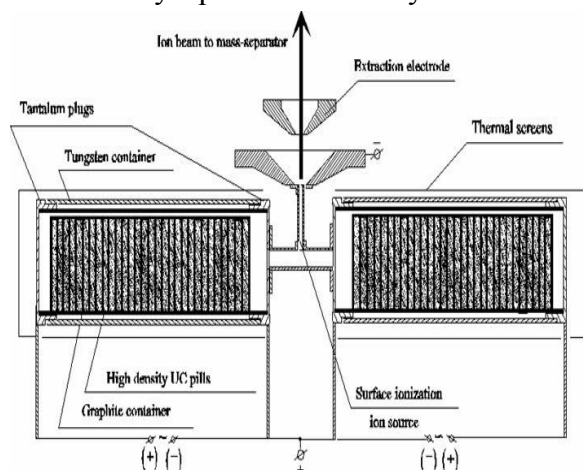
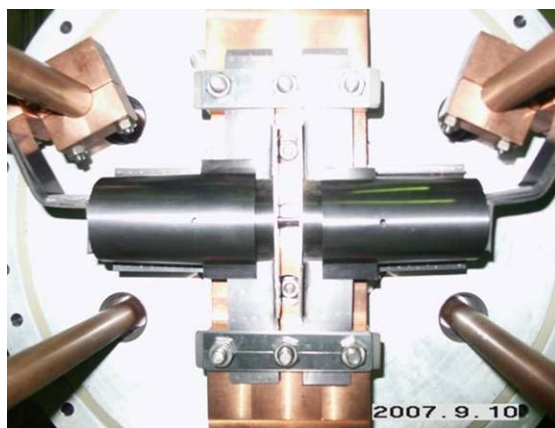
Проект 3.4: Нейтронно-избыточные ядра

Руководитель проекта: к.ф.-м.н. В.Н.Пантелеев

В экспериментальном зале ИРИС осуществлен монтаж и запуск 1-ой очереди универсальной лазерной ионизационной системы (УЛИС) для проведения экспериментов по резонансной ионизации короткоживущих нуклидов вблизи границ нейтронной и протонной устойчивости и в окрестности дважды магического ядра ^{132}Sn .

В ООО «Медицинские стерилизационные системы» (Химки, Москва) в 2007 г. начато изготовление 2-ой очереди УЛИС с лазерами ультрафиолетовой области излучения с изменяемой длиной волны. Использование на установке ИРИС универсальной лазерной ионизационной системы с лазерами накачки на парах меди мощностью до 40 Вт и лазерами на красителях с умножением частоты излучения позволит перейти в область исследований нейтронно-избыточных ядер вблизи границы нейтронной устойчивости и вблизи дважды магического ядра ^{132}Sn .

Для эффективного получения нейтронно-избыточных ядер в 2007 г. были проведены “off-line” тесты прототипа нового мишенного устройства из высокодисперсного карбида урана (размер зерна 5 микрон) с плотностью мишенного вещества 12 г/см^3 и массой урана в качестве мишенного вещества 700 граммов. При нагреве мишенного вещества методом пропускания тока через мишенный контейнер получена температура мишенного вещества 1800°C . Разработанное на ИРИСе мишенное устройство является самым массивным среди мишенных устройств используемых в настоящее время на работающих ISOL установках. На



рисунке приведено схематическое изображение и фотография разработанного мишенно-ионного устройства большой массы. В сотрудничестве с лабораториями ГАНИЛ и ОРСЭ (Франция), а также лабораторией Легнаро (Италия) на установке ИРИС на пучке синхротрона ПИЯФ были проведены четыре “on-line” сеанса по исследованию нового прототипа мишенно-ионного устройства с электронно-плазменной ионизацией с массой мишенного вещества 31 г., а также мишенного устройства из карбида урана высокой (5 микрон) дисперсности. Измерены выходы нейтронно-избыточных изотопов Ni, Pd,

Ag, In, Cd, Sn, Rb Cs, а также нейтронно-дефицитных изотопов Fr.

Результаты проведенных on-line исследований показали, что выходы короткоживущих изотопов щелочных металлов Rb, Cs и Fr не зависят от дисперсности мишенного материала UC при изменении размера зерна мишенного материала от 5 до 20 микрон. Предварительные результаты по измерению выходов изотопов труднолетучих элементов Ni, Pd и Sn, указывают на уменьшение выходов короткоживущих изотопов этих элементов с уменьшением размера зерна мишенного материала. Полученные результаты имеют большое значение для разработки и использования новых мишенных веществ на ISOL установках следующего поколения.

Направление 4:

Исследование структуры, динамики и неординарных свойств вещества нейтронными методами.

Проект 4.1.

Исследование сильно коррелированных фермионных систем и спиновой киральности с помощью дифракции нейтронов.

Руководители проекта: проф. В.П.Плахтий,
к.ф.-м.н. Ю.П. Черненко,
к.ф.-м.н. О.П. Смирнов,
к.ф.-м.н. И.В. Голосовский

1. Исследование аномальной киральной критичности металлического гольмия.

Критические явления в металлическом гольмии, как и в Dy, Tb, постоянно изучаются экспериментально и теоретически с момента открытия в них геликоидального магнитного упорядочения [1]. Тем не менее, аномальная критичность при этом переходе до сих пор активно дискутируется. Интересно отметить, что величины критических индексов неоднократно менялись в соответствии с новыми теоретическими предсказаниями [2, 3]. В нашей работе ставилась задача определения всех критических индексов на одном и том же кристалле в связи с большим разбросом литературных данных, полученных на разных кристаллах. Измерение обычных критических индексов, параметра порядка β , восприимчивости γ и обратной корреляционной длины ν , проводилось на реакторе ВВР-М ПИЯФ. Соответствующие киральные индексы, β_c , γ_c и ν_c , измерялись на реакторе ИЛЛ с использованием разработанной в ПИЯФ методики [5, 6], успешно применявшейся ранее при исследовании киральной критичности [7, 8]. Индекс теплоемкости α определялся в Исследовательском центре Россендорф по методике [9].

В результате проведенных исследований получены следующие значения критических индексов: $\alpha = 0.04(2)$, $\beta = 0.410(5)$, $\gamma = 1.01(3)$, $\nu = 0.64(7)$, $\beta_c = 0.90(3)$, $\gamma_c = 0.69(5)$, $\nu_c = \nu$. Следует отметить, что при этом выполняется установленное ранее [8] соотношение $2\beta < \beta_c$. Кроме того, показано, что деформация кручения, создаваемая при приложении механических усилий и необходимая для получения неравновесной заселенности киральных доменов [8], изменяет (уменьшает) величину β в пределах всего лишь трех стандартных ошибок. Это свидетельствует о ее малом влиянии на другие индексы.

Гольмий, как и исследовавшийся ранее треугольный магнетик CsMnBr_3 , имеют одинаковую симметрию, поэтому фазовые переходы в обоих случаях должны относиться к одному классу универсальности $Z_2 \times \text{SO}(2)$, предсказанному теоретически [3] и установленному экспериментально [7] для CsMnBr_3 . Наиболее чувствительным к киральной симметрии является критический индекс теплоемкости α , который в случае CsMnBr_3 равен $0.40(2)$ и на порядок превосходит полученную нами величину $\alpha = 0.04(2)$. Более того, в случае гольмия скейлинг оказывается неприменимым, в особенности для киральных индексов. Вместо скейлингового соотношения $\alpha + 2\beta_c + \gamma_c = 2$, экспериментальные значения приводят к $\alpha + 2\beta_c + \gamma_c = 2.53(8)$, что на семь стандартных ошибок превосходит следующую из скейлинга величину 2.

Дальнейшей целью работы было выяснение причины этого нарушения и, по возможности, соответствующего физического механизма.

На Рис. 1 показан профиль магнитного сателлита $(0, 0, 2^-)$ при продольном сканировании (вдоль q_z). При нормальной критичности этот профиль должен описываться функцией Лоренца (L), половина ширины которого на половине высоты определяется корреляционной длиной ζ , расходящейся согласно скейлингу как $\zeta \propto \tau^{-\nu}$, где $\tau = (T - T_N)/T_N$,

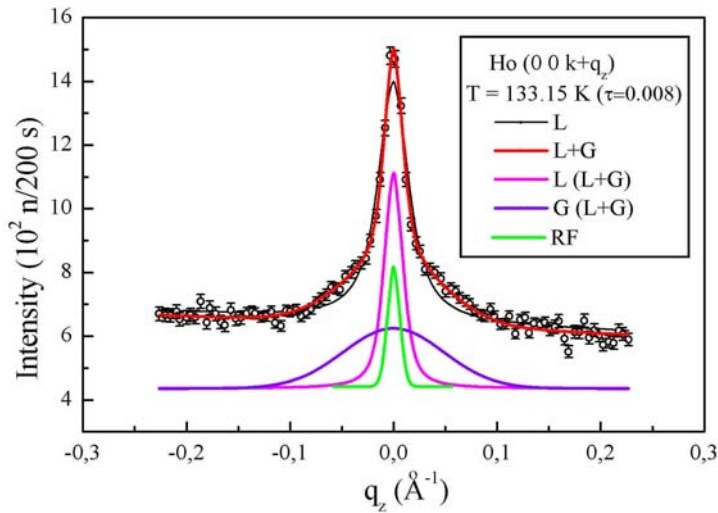


Рис. 1. Критическое рассеяние вблизи магнитного сателлита (0, 0, 1⁻). Пояснения в тексте.

и температура Нееля $T_N \approx 132$ К. На рисунке видно, что для описания экспериментальной кривой следует добавить также функцию Гаусса (G). Результаты подгонки по методу наименьших квадратов сверткой этих двух функций с функцией разрешения (зеленая кривая) показаны красной кривой.

Таким образом, при приближении к критической точке существует два типа флуктуаций:

1. Флуктуации, не имеющие четких границ и характеризующиеся средней длиной корреляции ζ . В импульсном пространстве им соответствует функция Лоренца. Именно на такие флуктуации и распространяется теория скейлинга.
2. Случайно распределенные по размерам ограниченные флуктуации, которым в импульсном пространстве соответствует функция Гаусса с шириной, определяемой средним размером флуктуаций Z . Так как к теории скейлинга эти флуктуации никакого отношения не имеют, то, очевидно, что скейлинг может быть нарушен. Остается выяснить возможную природу границ.

В нашей работе [10] предсказывалось, что взаимодействие спиновой киральности с фононами может привести к смягчению фононной моды с волновым вектором равным вектору магнитной спирали. В связи с тем, что интенсивность рассеяния на фононе обратно пропорциональна квадрату его частоты, то в эксперименте, представленном на Рис. 1, который проводился без анализа поляризации, пик, близкий по форме к Гауссиану, может появиться из-за рассеяния на фононе. Контрольный эксперимент с рассеянием рентгеновского синхротронного излучения, действительно, позволил обнаружить такой пик, однако при рассеянии нейтронов его относительная интенсивность была бы пренебрежимо мала.

Как известно, в элементарной ячейке гольмия имеется два слоя, с разностью фаз между ними, задаваемой симметрией. Однако это обстоятельство обычно не принимается во внимание, хотя поворот спинов в спирали относится не к отдельным слоям, а к элементарным ячейкам. Если к тому же принять во внимание анизотропию в базисной плоскости, то можно получить участки спирали с поворотом пары спинов, разделенные границами, содержащими лишь один спин, направленный вдоль одной из осей, задаваемых анизотропией. Пример для участков размером 11/2 слоев [11] приведен на Рис. 2.

В работе [12] было показано, что в гольмии вблизи температуры происходит так называемый “lock-in” переход к соразмерному периоду 18/5 элементарных ячеек (20.2 Å), что согласуется со средним размером флуктуаций, оцененным по ширине Гауссиана.

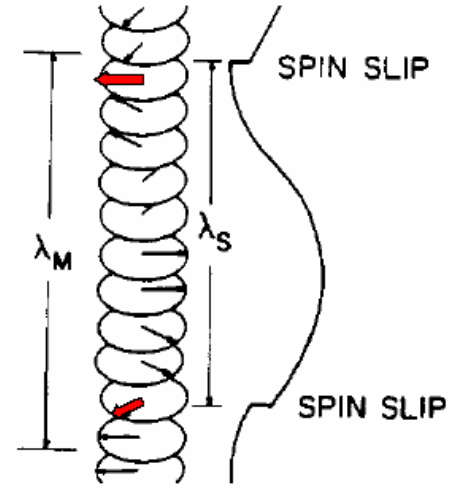


Рис. 2. Образование несоизмеримой магнитной структуры с волновым вектором $q_z = 2/11$ из-за наличия двух спинов в элементарной ячейке и анизотропии в базисной плоскости [11]. Наличие одного спина вместо двух на расстоянии пяти элементарных ячеек приводит к образованию границ.

Таким образом, можно сделать вывод, что нарушение скейлинга заложено в самой природе спиновой спирали.

2. Исследование пространственного распределения спиновой плотности в DyBaCo₂O_{5.5} методом дифракции поляризованных нейтронов на недвойникованном монокристалле.

Этап 2007: Обработка результатов измерений и подготовка публикации.

Кобальтиты RBaCo₂O_{5.5}, в которых имеет место эффект колоссального магнетосопротивления и наблюдается переход металл-диэлектрик, привлекают к себе постоянное внимание. Причины и механизмы этих явлений до конца не поняты. Предполагается, что они связаны с изменением спинового состояния ионов Co³⁺ ($S = 0, 1$ или 2). Ранее нами было экспериментально доказано, что кристаллическая симметрия высокотемпературной и промежуточной (из трех наблюдаемых) магнитных фаз является не общепринятой $Pmmm$, а $Pmma$. При этом элементарная ячейка удвоена по оси $[100]$ в сравнении с таковой для $Pmmm$. Как следствие, вместо двух, атомы кобальта размещены в 4-х неэквивалентных позициях, что ведет к большему числу возможных комбинаций по спиновым состояниям Co³⁺. Из данных, полученных в нашем эксперименте на дифрактометре D3 (реактор ИЛЛ, Гренобль, Франция) с использованием поляризованных нейтронов, построены карты распределения спиновой плотности в недвойникованном монокристалле DyBaCo₂O_{5.5} в его высокотемпературной магнитной фазе. Они позволяют делать выводы о спиновом состоянии ионов Co³⁺ в четырех неэквивалентных позициях. По результатам исследований подготовлена статья для публикации в журнале Phys. Rev. B.

3. Исследование структурного фазового перехода в магнитоупорядоченном состоянии DyBaCo₂O_{5.5}

Этап 2007: DyBaCo₂O_{5.5} рентген-дифракционные исследования монокристалла при $80 < T < 300$ К

В многочисленных публикациях, посвященных исследованию кобальтитов RBaCo₂O_{5.5}, предполагается, что наблюдаемые в этих соединениях эффект колоссального магнетосопротивления и переход металл-изолятор связаны с изменением спинового состояния ионов Co³⁺ ($S = 0, 1$ или 2). При этом кристаллическая симметрия ($Pmmm$) остается неизменной во всем диапазоне температур от парамагнитной проводящей фазы ($T > 320 - 350$ К) до низкотемпературной магнитной фазы (последней из трех, $T < 100$ К). Проведенные нами при $80 < T < 300$ К рентген-дифракционные исследования монокристалла DyBaCo₂O_{5.5} показали, что в этом диапазоне температур имеют место два структурных перехода. Первый, как видно из Рис. 3, совпадает с переходом металл-диэлектрик ($T \sim 320$ К), является второродным, сопровождается удвоением элементарной ячейки по оси a ($a_p \times 2a_p \times 2a_p \rightarrow 2a_p \times 2a_p \times 2a_p$, где a_p – параметр решетки перовскита) и изменением кристаллической симметрии $Pmmm \rightarrow Pmta$, аналогично наблюдавшемуся нами ранее в GdBaCo₂O_{5.5} и Tb_{0.9}Dy_{0.1}BaCo₂O_{5.5}. Этот результат доказывает общность явления. Второй переход является первородным, происходит в диапазоне $150 - 110$ К при охлаждении, $200 - 210$ К при нагревании (Рис. 4) и сопровождается удвоением элементарной ячейки по оси c ($2a_p \times 2a_p \times 2a_p \rightarrow 2a_p \times 2a_p \times 4a_p$). Можно ожидать, что и этот переход тоже типичен для RBaCo₂O_{5.5}. В дальнейшем мы планируем проверить на кобальтитах с другим редкоземельным элементом R , в которых наблюдают необычные магнитные свойства как раз в указанном диапазоне $110 - 210$ К. Тогда, необычность свойств естественным образом объясняется сосуществованием двух фаз с различными кристаллической и магнитной структурами.

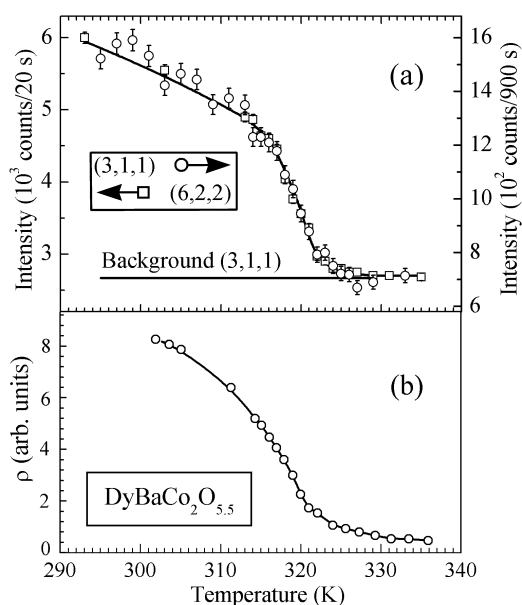


Рис. 3. (а) Температурная зависимость интенсивности сверхструктурного (3,1,1) и основного (6,2,2) отражений и (б) сопротивления. Индексы для ячейки $2a_p \times 2a_p \times 2a_p$.

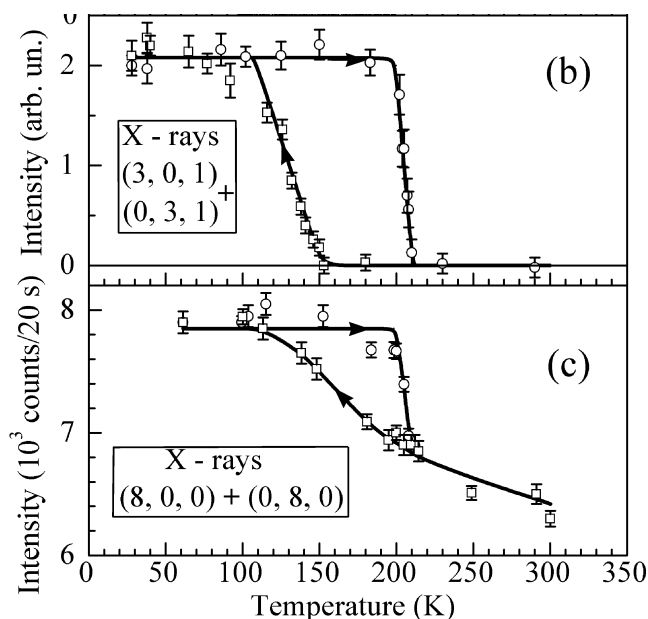


Рис. 4. (а) Температурная зависимость интенсивности сверхструктурного (3,0,1) + (0,3,1) и основного (8,0,0) + (0,8,0) отражений. Индексы для ячейки $2a_p \times 2a_p \times 4a_p$.

4. Выяснение связи кристаллической структуры с аномалией динамических магнитных свойств Pr_2CuO_4 .

Этап 2007: рентген-дифракционные исследования монокристалла Pr_2CuO_4 при $15 < T < 300 \text{ K}$

Pr_2CuO_4 принадлежит к классу двумерных квантовых гайзенберговских антиферромагнетиков. Ранее нам удалось наблюдать изменения кристаллической структуры в родственном соединении Eu_2CuO_4 , что позволило объяснить возникновение аномалий его магнитных свойств с понижением температуры. Известно, что эти соединения различаются своим поведением в магнитном поле, а в их спектрах поглощения электромагнитных волн (20 – 250 GHz) наблюдаются сильные изменения при $T = 20$ и 150 K , для Pr и Eu соответственно, которые связываются как со спиновой динамикой, так и с кристаллической решеткой. Для выяснения связи кристаллической структуры с аномалией динамических магнитных свойств Pr_2CuO_4 нами был исследован высококачественный монокристалл этого соединения, одна из шести граней которого перпендикулярна оси [100] (или [010], т.к. элементарная ячейка имеет тетрагональную симметрию), а две других - перпендикулярны оси [001]. Это позволило нам следить за возможными изменениями положения, ширины и интенсивности отражений типа (H00)/(0K0) и (00L) на больших углах дифракции. В диапазоне температур $12 < T < 30 \text{ K}$ никаких изменений в положении этих отражений не зафиксировано в пределах точности измерений, т.е. изменений межплоскостного расстояния с точностью $2 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}$. Неизменность профиля и ширины отражений свидетельствует о том, что кристаллическая симметрия не понижается. Исходя из этого, можно предположить, что наблюдаемая в Pr_2CuO_4 аномалия магнитных свойств при $T \sim 20 \text{ K}$ связана с магнитными взаимодействиями Cu - Pr и Pr - Pr.

5. Нейтрон-дифракционные исследования водородных связей в гидратах уранила, используемых при обогащении урановых руд.

Этап 2007г.: Обработка результатов нейтронных исследований дейтерированного дигидрата селената уранила $\text{UO}_2\text{SeO}_4 \cdot 2(\text{D}_2\text{O})$ и подготовка публикации

Совместно с Самарским государственным университетом выполнено нейтронографическое исследование порошкообразного образца дейтерированного дигидрата селената уранила $\text{UO}_2\text{SeO}_4 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$. Соединение кристаллизуется в моноклинной сингонии, пр. гр. $P2_1/c$, параметры элементарной ячейки: $a = 6.974(1) \text{ \AA}$, $b = 8.289(2) \text{ \AA}$, $c = 11.664(2) \text{ \AA}$, $\beta = 92.319(6)^\circ$, $Z = 4$, $R_F = 3.14$, $R_I = 5.53$ и $\chi^2 = 2.82$. Основными структурными единицами вещества являются цепи состава $[\text{UO}_2\text{SeO}_4(\text{D}_2\text{O})_2]$, относящиеся к кристаллохимической группе AT^3M^1_2 ($\text{A} = \text{UO}_2^{2+}$, $\text{T}^3 = \text{SeO}_4^{2-}$, $\text{M}^1 = \text{D}_2\text{O}$) комплексов уранила и направленные параллельно $[100]$. Цепи связаны в каркас совокупностью водородных связей, образованных атомами водорода молекул воды одной цепи с атомами кислорода уранильных группировок и селенат-ионов соседних цепей.

Публикации:

Статья успешно прошла рецензирование и принята к печати в “ЖУРНАЛ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ”.

Кроме того, данные о структуре были представлены в г.Одессе на международной конференции по координационной химии.

Выходные данные тезисов:

Марухнов А.В., Сережкин В.Н., Пушкин Д.В., Смирнов О.П., Плахтий В.П.

Нейтронографическое исследование $\text{UO}_2\text{SeO}_4 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$. // XXIII Международная Чугаевская конференция по координационной химии. 4-7 сентября 2007 г. Одесса. Тез. докл. С.518-519.

Проект 4.2.

Исследование спиновой киральности в интерметаллидах, спиновой структуры многослойной системы, магнитного рассеяния в тяжелофермионных соединениях, диффузных процессов в бериллиевой бронзе, эволюции магнитных текстур в Fe-Co пленках в процессе отжига.

Руководители проекта: проф. А.И.Окороков,
к.ф.м.н.С.В.Григорьев,
к.ф.-м.н. В.В.Рунов,
к.ф.-м.н. Г.П.Гордеев,
нс Г.П Копица

Изучение магнитных спиральных структур методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

Этап 2007г.

1. Изучение фазового перехода в квазидвумерной спиральной спиновой структуре YMn_6Sn_6 методом малоуглового рассеяния нейтронов.

Магнитная структура интерметаллидов интересна как с теоретической так и с экспериментальной точек зрения. Одновременное сосуществование различных типов обменных взаимодействий в этих материалах способно организовывать магнитную структуру с уникальными свойствами. Исследуемое соединение YMn_6Sn_6 ниже температуры $T_N=333\text{K}$ YMn_6Sn_6 –планарный гелимагнетик. Это означает, что Mn магнитные атомы имеют ферромагнитный порядок в плоскости ab и геликоидальный порядок вдоль оси c. YMn_6Sn_6 имеет гексагональную кристаллическую структуру типа HfFe_6Ge_6 ($P6/mmm$ пространственная группа). В данной работе проведено исследование температурного и полевого поведения магнитной структуры YMn_6Sn_6 методом малоуглового рассеяния (МУР) поляризованных_нейтронов. Показано появление большого количества дифракционных отражений от магнитной периодической структуры, вызванных случайной ориентацией кристаллитов в образце. Эти отражения сконцентрированы в две окружности с центром в $q=0$ и радиусами $q_{c1}=0.09$ и $q_{c2}=0.2\text{nm}^{-1}$. При приближении к $T_N=333\text{K}$ положения и

интенсивности наблюдаемых пиков ведут себя по разному. У пика с малым волновым вектором ($q_1=0.09$) q_{c1} стремительно падает, тогда как у пика с большим волновым вектором ($q_2=0.2$) q_{c2} стремительно растет. С увеличением температуры интенсивность пика с q_{c1} существенно увеличивается вблизи $T=70\text{K}$ и плавно уменьшается к T_N , тогда как интенсивность пика q_{c2} падает непрерывно. При температуре ниже $T=293\text{K}$ пик q_2 исчезает.

2. Исследования спиновой спиральной структуры в системе $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

Кристаллы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ являются представителями класса кубических магнетиков без центра инверсии, и как следствие этого взаимодействие Дзялошинского-Мория играет важную роль в магнитном упорядочении, приводя к геликоидальной односторонне-закрученной структуре. На основе данных малоугловой нейтронной дифракции и СКВИД-магнитометрии построены Н-Т фазовые диаграммы для серии образцов с $x = 0.15, 0.2, 0.5$. Обнаружено, что несколько экспериментально измеренных параметров универсальным образом управляют состоянием магнитной системы этих образцов. Эти параметры легко интерпретируются в рамках теории разработанной недавно С.В. Малеевым [PRB 73 (2006) 174402]. В результате были получены жесткость спиновых волн, константа взаимодействия Дзялошинского, константа анизотропии и энергетическая щель в спектре спиновых волн, обусловленная взаимодействием Дзялошинского. Изменения магнитной структуры с концентрацией интерпретированы на основе полученных данных.

3. Исследование явления наведенной магнитным полем спиновой киральности в Y/Dy многослойной системе методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

В работе показано, что Dy/Y многослойные системы упорядочиваются в когерентную спиновую спираль с преимущественным направлением закручивания (киральностью), наведенным магнитным полем. Рассеяние поляризованных нейтронов является уникальным методом для исследования киральности магнитных систем. В частности, поляризационно-зависящая асимметричная часть рассеяния прямо пропорциональна киральности системы, выраженной в разнице заселенностей лево- и право закрученных спиралей. Магнитное поле, приложенное в плоскости образца по мере охлаждения и переходе через критическую температуру, приводит к ненулевой киральности, или, неравновесной заселенности правых и левых спиралей. Наведенная полем киральность растет с ростом поля, но не зависит от направления приложенного поля. Величина киральности заметно меняется в области критических температур и оказывается константой для температур много ниже T_N .

4. Исследованию магнитных и структурных свойств наноматериалов в двумерных пространственно упорядоченных матрицах оксида алюминия методом малоуглового рассеяния нейтронов.

На первом этапе была изучена структура пленок анодированного оксида алюминия методом малоуглового рассеяния нейтронов. Получено теоретическое решение для описания нейтронного рассеяния на упорядоченной пористой структуре Al_2O_3 . Анализ данных нейтронного эксперимента продемонстрировал возможность получения пористых мембран с идеально периодической гексагональной упаковкой пор на большой площади порядка 0.5 см^2 .

На втором этапе изучались как структура, так и магнитные свойства пространственно-упорядоченных массивов магнитных нанонитей, сформированных на основе пленок пористого оксида алюминия, методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов. На картах интенсивности малоуглового рассеяния наблюдается несколько дифракционных максимумов (вплоть до 3 порядка отражений), соответствующих рассеянию на высокоупорядоченной пористой структуре матрицы, а также гексагональной упаковке магнитных нанонитей. Наблюдаемые рефлексy накладываются на заметное диффузное рассеяние, связанное с дефектами структуры. Получено теоретическое решение для описания нейтронной дифракции в динамическом пределе на сверхструктуре магнитных нанонитей внедренных в диамагнитную матрицу. Проанализировано несколько вкладов в

рассеяние: немагнитный (ядерный) вклад в рассеяние; магнитная составляющая, зависящая от магнитного поля, и ядерно-магнитная интерференция, показывающая корреляцию магнитной и ядерной структур. Получена детальная картина процесса перемагничивания упорядоченного массива магнитных нанонитей, и показано, что рассеяние поляризованных нейтронов дает информацию недоступную стандартным методам магнитометрии.

5. Исследования фрактальных свойств ксерогелей гидратированного диоксида циркония методом малоуглового рассеяния нейтронов.

1) Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) проведено изучение влияния мощной ультразвуковой обработки на мезоструктуру аморфных ксерогелей гидроксида железа(III), получаемых осаждением из растворов нитрата железа (III) различной концентрации.

Измерения МУРН были проведены на установке SANS-2 (реактор FRG1, GKSS Research Centre, Geesthacht, Germany) на двух длинах волн нейтронов $\lambda = 5.8$ и $11.6 \text{ \AA}$ с $\Delta\lambda/\lambda = 10\%$. Использование четырех дистанций образец-детектор $SD = 1, 3, 9$ и 20.7 м позволяло измерять интенсивность рассеяния нейтронов в диапазоне переданных импульсов $8 \cdot 10^{-4} < q < 2.5 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$.

Впервые установлено влияние мощной ультразвуковой обработки на мезоструктуру аморфных ксерогелей гидроксида железа (III). Показано, что данная обработка приводит к повышению гомогенности исследуемых ксерогелей по ядерной плотности на мезоскопическом масштабе и одновременному увеличению характерных размеров кластеров и мономерных частиц $\text{Fe}(\text{OH})_3$, а также увеличению фрактальной размерности поверхности ксерогелей. Предложена модель, описывающая наблюдаемые эффекты.

Полученные результаты были представлены в качестве стендового доклада: «Влияние мощной ультразвуковой обработки на мезоструктуру аморфных ксерогелей гидроксида железа(III)» (А.Е. Баранчиков, В.К. Иванов, Г.П. Копица, С.В. Григорьев) на VI Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов РНСЕ-2007 (12 – 17 ноября 2007 г., г. Москва) и подготовлены к отправке в виде статьи в журнал "Phys. Rev. B".

2) Методом традиционного и ультра МУРН продолжено изучение фрактальных свойств аморфных ксерогелей гидратированного диоксида циркония, синтезированных осаждением из раствора нитрата цирконила при различных значениях pH среды (3, 4, 5, 6, 7 и 9).

Измерения были проведены на установках: малоуглового рассеяния нейтронов SANS-2 (см. выше) в диапазоне переданных импульсов $8 \cdot 10^{-4} < q < 2.5 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ и двухкристаллическом дифрактомере DCD (реактор FRG1, GKSS Research Centre, Geesthacht, Germany) с рабочей длиной волны нейтронов $\lambda = 4.43 \text{ \AA}$ и $\Delta\lambda/\lambda = 1 \cdot 10^{-5}$, который снабжен блоком двойного монохроматора (БДМ), на основе совершенных кристаллов Si , вырезанных по плоскости (1,1,1). Первый из них — формирователь нейтронного пучка, второй — кристалл-монохроматор. После прохождения пучка нейтронов через узел образца, располагающегося по ходу луча за БДМ, их угловое распределение измерялось последовательным поворотом идентичного монохроматору кристалла-анализатора с угловым шагом 10^{-5}° . Ширина на половине высоты инструментальной линии составляла $w_0 = 2.6 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$. Диапазон переданных импульсов: $1.5 \cdot 10^{-6} < q < 5 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$.

Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы рассеивающих неоднородностей и удельные поверхности, а также прослежена их эволюция в зависимости от pH среды. Обнаружено, что pH среды при осаждении гелей гидратированного диоксида циркония оказывает существенное влияние на фрактальные характеристики гелей, а также влияет на размеры кластеров и образующих их мономерных частиц. Установлено, что ключевым

фактором, определяющим состав и структуру гелей, является отклонение pH осаждения гелей от $\text{pH} \approx 6$, соответствующего изоэлектрической точке гидратированного $\text{ZrO}_2(\text{pH}_{i.e.p.})$. Полученные результаты были представлены в качестве стендового доклада: «Фрактальные свойства ксерогелей гидратированного диоксида циркония» (В.К. Иванов, О.С. Полежаева, Г.П. Копица, С.В. Григорьев, В.М. Гарамус) на VI Национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов РНСЕ-2007 (12 – 17 ноября 2007 г., г. Москва) и опубликованы.

Публикации

[1] Г.П. Копица, В.К. Иванов, С.В. Григорьев, П.Е. Мескин, О.С. Полежаева, В.М. Гарамус, Письма в ЖЭТФ, т.85, с. 132 – 136 (2007).

6. Статические и динамические свойства спиновой системы сплава Pd-Fe-Mn.

Этап 2007 г.

Провести эксперимент по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов в геометрии $q \perp H$ в малых магнитных полях (до 50 эрстед) в температурном интервале (10 – 60) К.

Сплав $(\text{Pd}_{0.984}\text{Fe}_{0.016})_{0.95}\text{Mn}_{0.05}$ претерпевает два последовательных перехода благодаря двум конкурирующим взаимодействиям между атомами Fe и Mn в матрице Pd: в ферромагнитное состояние при $T = 41$ К и в состояние спинового стекла при более низких температурах. В последнем продольная компонента намагниченности отлична от нуля, в то время как поперечные замораживаются, как полагают, в произвольных направлениях. Однако фрустрация и конечная случайная анизотропия должны препятствовать произвольному замораживанию поперечных компонент, делая коррелированным их поведение.

В свете этого, исследование характера упорядочения магнитных моментов в подобных сплавах как на нано, так и на мезоскопическом уровнях масштаба длины, а также соответствующей спиновой динамики в них, является актуальным. Оно было проведено с помощью поляризованных нейтронов и мю мезонов.

Анализ полученных результатов измерений показывает существование низкотемпературной мезоструктуры, представляющей собой суперпарамагнитные кластеры, которые меняют свои размеры и форму в ходе упорядочения при немономотном отклике на внешнее магнитное поле. Подобные образования появляются в температурном интервале между двумя переходами. Спиновая динамика в такой системе представлена спиновыми волнами, на что указывает лево-правая асимметрия рассеяния нейтронов в “скошенной” геометрии.

На нано-уровне, т.е. на расстояниях, сравнимых с расстояниями между атомами Fe и Mn (0.6- 1.5 nm), упорядочение магнитных моментов характеризуется особым типом корреляций, а именно, киральными корреляциями, начало которым дает температура $T = 28$ К. Эта статическая киральность наблюдалась при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов в “прямой” геометрии при малых (порядка 10 Э) магнитных полях. Лево-правая асимметрия рассеяния в этом случае вызывается винтовыми флуктуациями.

7. Исследование тяжелофермионных соединений.

Этап 2007г.: исследование малоуглового рассеяния в соединениях CeRu_2Si_2 и CeAl_3 в области гелиевых температур.

Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов (МУРН) проведено изучение магнитного нейтронного рассеяния на ионных корреляциях в тяжелофермионной системе CeAl_3 при низких температурах.

Измерения МУРН проводились на установке SANS-2 (реактор FRG1, GKSS Research Centre, Geesthacht, Germany), работающей в близкой к точечной геометрии с ^3He позиционно-чувствительным 2D-детектором. В эксперименте использовалась длина волны нейтронов $\lambda = 5.8$ с $\Delta\lambda/\lambda = 10\%$. Диапазон переданных импульсов $1 \cdot 10^{-2} < q < 2.5 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$

¹ достигался изменением базы образец-детектор от 0.5 до 4 м. Измерения проводились в диапазоне магнитных полей $0 \leq H \leq 213$ мТ при температурах $T = 8, 10, 15$ и 60 К.

В ходе эксперимента наблюдалось уменьшение некогерентного парамагнитного рассеяния на ионах церия (имеющего место при 60 К) как с понижением температуры, так и ростом приложенного к образцу магнитного поля. Данный факт, во-первых, свидетельствует о трансформации магнитного рассеяния и, во-вторых, согласуется с результатами эксперимента по неупругому рассеянию нейтронов на CeAl_3 [1], в котором наблюдалось уменьшение квазиупругой компоненты магнитного рассеяния при $T < 60$ К. Кроме того, при $T < 15$ К в диапазоне $q < 7.5 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ обнаружено появление магнитного рассеяния, возрастающего с понижением температуры. Анализ импульсной зависимости сечения магнитного рассеяния $d\Sigma_m(q)/d\Omega$ показал, что она удовлетворительно описывается лоренцианом $d\Sigma_m(q)/d\Omega \approx A/(q^2 + \kappa^2)^{n/2}$ с показателем степени $n = 3$. Данный характер поведения $d\Sigma_m(q)/d\Omega$ соответствует рассеянию на корреляциях ферромагнитного типа.

Полученные результаты находятся в стадии анализа и теоретического обоснования.

[1] N.N. Tiden, P.A. Alekseev, V.N. Lazukov, A. Podlesnyak, E.S. Clementyev and A. Furrer, Solid State Communications 141 (2007), 474.

8. Исследование мезоструктуры и спиновой динамики в системах со структурными фазовыми переходами методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов: Этап 2007г:

Выполнить эксперименты на:

а) наноструктурированной системе $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}_{1-y}$;

б) системе $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$ с близкими температурами мартенситного и ферромагнитного переходов.

Проведены измерения малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на сплавах $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$ в диапазоне концентраций $x=0.18-0.27$ как в слабых (ведущих) магнитных полях, так и в полях порядка 0.5 Тл. Найдено, что реализуется единый магнитоструктурный фазовый переход 1- го рода, определены характерные температуры. Обнаружено сильное различие мезоструктуры образцов с увеличением концентрации Ni в диапазоне магнитоструктурного перехода. Данные обрабатываются.

9. Критическое состояние и изменение структуры потока в ВТСП при повороте внешнего магнитного поля.

Этап 2007:

Измерение распределения потока и угла его поворота при наличии внешнего магнитного поля, повернутого на заданный угол. Измерения провести в соответствии с модельными представлениями такого эксперимента.

Согласно концепции критического состояния в сверхпроводнике с пинингом, находящемся во внешнем магнитном поле устанавливается такое распределение внутреннего поля, что в каждой его точке плотность тока не превышает некоторого критического значения J_C и этот ток перпендикулярен полю. При изменении направления внешнего поля возникает продольный внутреннему полю ток. Возникает вопрос: принимает ли этот ток критическое значение $J_{C\parallel}$, независимое от поперечного тока $J_{C\perp}$ или же существует лишь критическое значение модуля полного тока J_C , одной из компонент которого является продольный ток. Проникновение поля в жесткий сверхпроводник в настоящее время описывается как моделью разрезания вихревых линий (РВЛ) с независимыми токами $J_{C\perp}$ и $J_{C\parallel}$, так и моделью с изотропной вольт-амперной характеристикой (ИВАХ). Эти модели приводят к разному поведению распределения внутреннего поля, скажем, при вращении внешнего. В первом случае распределение модуля не меняется, во втором же меняется кардинально.

Таким образом, непосредственное измерение распределения потока и его изменения внутри сверхпроводника может ответить на поставленный вопрос.

В эксперименте изучалось поведение потока в керамическом высокотемпературном сверхпроводнике (ВТСП) при повороте внешнего поля на заданный угол в диапазоне 0-360°. Измерялась матрица деполяризации нейтронного пучка. Из нее извлекался угол поворота потока. Измерения выполнялись как без выключения, так и с выключением внешнего поля. В обоих случаях было констатировано, что при вращении внешнего поля распределение модуля внутреннего поля изменяется существенным образом. Это означает, что продольный ток зависит от поперечного, т.е. налицо противоречие с выводами РВЛ и подтверждение представлений изотропной модели. Материал доложен на конференции РНСЭ-2007.

10. Разработка новой методики определения магнитных текстур

Разработка новой методики определения магнитных текстур образцов нами ведется в рамках задачи о природе наведенной магнитной анизотропии, для решения которой вначале использовались анизотропные железокобальтовые пленки. При наличии в таких пленках однонаправленной текстуры наблюдается специфическая картина незеркальных отражений поляризованных нейтронов, причиной чего является некое малоугловое рассеяние с переворотом спина нейтрона (Ковалев А.В. <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/036.pdf>). Аналогичная картина угловых распределений интенсивностей обнаружена и при преломлении нейтронов пленками и фольгами (Ковалев А.В. Сб. докл. межд. научн. конф. “Актуальные проблемы физики твердого тела”. Минск, т. 1, с. 95-97.) Рефрактометрические измерения выполнялись при разных величинах угла скользющего падения нейтронного пучка и внешних магнитных полей. Полученные многочисленные экспериментальные данные позволяют говорить об уникальных возможностях предлагаемой методики, которую, в частности, имеет смысл использовать при исследовании механизмов малоуглового рассеяния нейтронов магнитными материалами.

Проект 4.3.

Исследование корреляций между структурными особенностями и аномалиями функциональных свойств оксидов и интерметаллоидов редкоземельных элементов различными методами рассеяния нейтронов (исследования тонких взаимодействий нейтронов со сплошными средами). Нейтронографическое исследование кристаллической и магнитной структуры диэлектрических кристаллов.

Нейтронно – синхротронная аттестация нано- и композитных материалов, используемых в водородной энергетике (накопители водорода, протон-проводящие мембраны и электролиты, катализаторы).

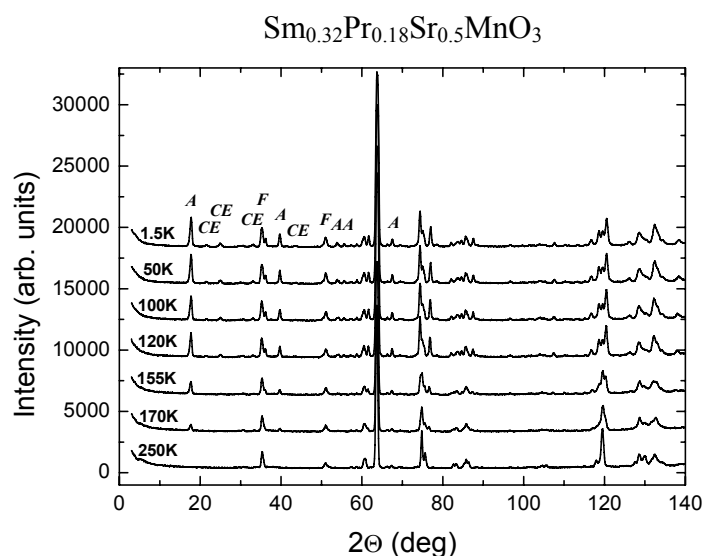
Руководители проекта:

проф. В.А.Трунов (ПИЯФ РАН),
проф. Г.А.Петраковский (ИФ СО РАН)

1. Исследование конкуренции между ферромагнитным состоянием и антиферромагнетизмом различного вида в сложных манганитах $\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$.

В силу большой разницы ионных радиусов $\langle r_A \rangle$ Sm, Pr и Sr в $\text{Sm}_{0.5-y}\text{Pr}_y\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ манганитах обнаруживаются уникальные физические свойства и ярко проявляются взаимодействия между электронной, фононной и магнитной подсистемами. Большое влияние $\langle r_A \rangle$ на возникновение или исчезновение ФМ металлического или АФМ диэлектрического состояний в данной области концентраций является также причиной КМС

эффекта, т.к. зарядоупорядоченное СО-АФМ диэлектрическое состояние легко коллапсирует в ФМ металлическое при приложении магнитного поля, что и было продемонстрировано на образце состава $y=0.18$: $\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$, когда приложение магнитного поля в 7 Тл понизило величину ρ на несколько порядков. Исследования этого состава методом нейтронной порошковой дифракции высокого разрешения продемонстрировали, что существует структурный фазовый переход (от высокотемпературной ромбической $Pbnm$ фазы к смеси двух ромбической $Pbnm$ и моноклинной $P2_1/m$ фаз с теми же самыми позициями атомов в элементарной ячейке, но с разными параметрами решетки. Анализ магнитного вклада в экспериментальные нейтронограммы при низких температурах однозначно указывает на то, что основное магнитное состояние исследуемого соединения является фазоразделенным и представляет собой смесь трех магнитных фаз, образующихся при разных температурах: ФМ (300К), АФМ –А (170К) и АФМ-СЕ (120К). Обнаружение АФМ-СЕ зарядоупорядоченной фазы в данной системе, уникально само по себе. Исследования $\text{Sm}_{0.32}\text{Pr}_{0.18}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ будут продолжены в 2008 г.



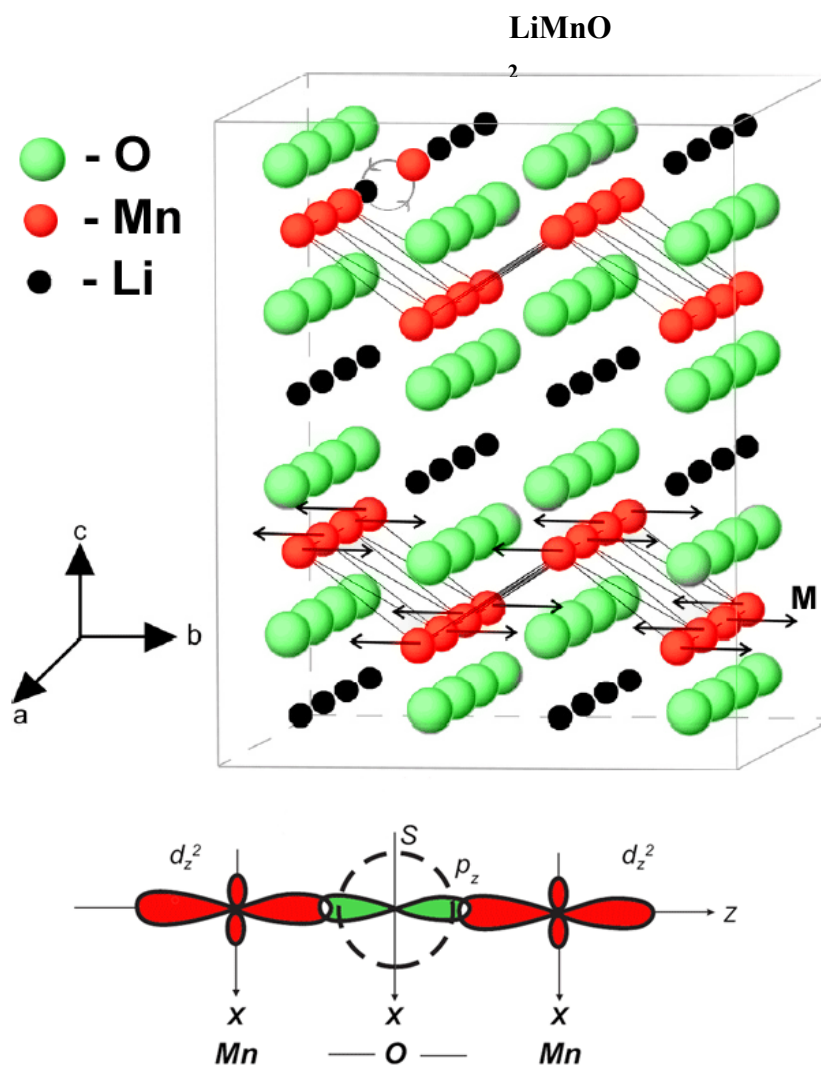
2. Изучение эффекта замещения в манганитах марганца другим переходным металлом, железом на соединениях $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ ($0 \leq y \leq 0.1$).

На соединениях $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ ($0 \leq y \leq 0.09$) был изучен эффект замещения Mn другим переходным металлом, Fe, имеющим практически такой же ионный радиус, что позволило сделать явление влияния переходного металла на физические особенности манганитов более прозрачным. Кристаллическая структура трех образцов с $y = 0, 0.03, 0.09$ была исследована в температурном интервале $T = 1.5 - 300$ К методом порошковой нейтронной дифракции. Все исследованные образцы относятся к ромбической пространственной группе $Pnma$ (№ 62). Подтверждено, что ионы Fe занимают позиции Mn в элементарной ячейке. С ростом концентрации Fe уменьшается величина спонтанного магнитного момента в насыщении и понижается температура Кюри, но основное магнитное состояние остается ферромагнитным для $0 \leq y \leq 0.1$. Величины магнитных моментов в насыщении, при $T = 1.5$ К, равны $m_{\text{FM}} = 3.72(3), 3.40(3)$ и $3.27(3)$ μ_B/Mn для образцов с концентрацией Fe $y = 0, 0.03$ and 0.09 , соответственно.

Результаты работы опубликованы в виде статьи Курбаков А.И., Захвалинский В.С., Laiho R. «Кристаллическая структура и магнитный порядок манганитов $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ » *ФТТ* **49** (2007) 691-695.

3. Исследования высокоэффективных катодных материалов LiMnO_2 для ионных батарей.

Методами нейтронной и рентгеновской порошковой дифракции, ЯМР на ^7Li ; калориметрии; измерения магнитной восприимчивости исследованы новые высокоэффективные катодные материалы для современных химических источников тока, у которых микронеоднородное строение является фактором, в значительной мере определяющим их физические и функциональные свойства. Проведено исследование структурных и магнитных характеристик манганита лития LiMnO_2 с варьируемым соотношением Li/Mn . Выполнен Ритвельдовский анализ кристаллических и магнитных



Фрагмент кристаллической структуры стехиометрического LiMnO_2 и взаимное расположение орбиталей ионов Mn^{3+} и O^{2-} , обуславливающее косвенное 180° обменное взаимодействие.

подтверждают существенные антиферромагнитные взаимодействия между этими цепочками. Кроме того, была рассмотрена гипотетическая $(\text{Li}_{15}\text{Mn})\text{Mn}_{16}\text{O}_{32}$ структура, где литиевый атом, расположенный между двойными слоями Mn, заменен атомом марганца. Вычисления показали, что присутствие таких дефектов приводит к появлению ферромагнитной компоненты, что согласуется с проведенными магнитными измерениями.

Обнаружено существенное различие спектров ЯМР ^7Li в парамагнитной и антиферромагнитной фазах манганита.

Результаты проведенных исследований опубликованы в виде двух статей:

1. Kellerman D.G, Medvedeva J.E., Gorshkov V.S, Kurbakov A.I., Zubkov V.G., Tyutyunnik A.P., Trunov V.A. «Structural and magnetic properties of orthorhombic Li_xMnO_2 » *Solid State Sciences* **9** (2007) 196-204.

структур Li_xMnO_2 ($x = 0.98, 1.00, 1.02$) на основе нейтронных и рентгеновских измерений. Показано, что общей чертой исследованных составов является заметная обращенность структуры, которая проявляется в присутствии ионов марганца на литиевых позициях (Mn_{Li}) и лития на марганцевых (Li_{Mn}), причем исключения не составляет и стехиометрический состав.

Наблюдается существенная анизотропия коэффициентов теплового расширения литий-марганцевых оксидов в температурном диапазоне 1.5 - 300 К. Искажение

кислородного октаэдрического окружения ионов марганца уменьшается с понижением температуры. Эти эффекты приписываются сильным обменным взаимодействиям между параллельными обменно связанными цепочками Mn. Первопринципные расчеты эффективных параметров обменного взаимодействия для $\text{Li}_{16}\text{Mn}_{16}\text{O}_{32}$

2. Келлерман Д.Г., Журавлев Н.А., Курбаков А.И., Зубков В.Г., Тютюнник А.П.
«Магнитные превращения и структурное разупорядочение в манганите лития LiMnO_2 »
Известия РАН. Серия физическая **71** (2007) 544-547.

4. Исследование структурных особенностей катализаторов для одностадийного окисления этана и получения этилена и ацетонитрила

Перспективными катализаторами для низкотемпературного одностадийного окисления этана и получения этилена и ацетонитрила являются трёхкомпонентные V-Mo-Nb оксидные соединения. Однако, детально структура VMoNb-оксида не исследована - неоднозначно определена пространственная группа симметрии, не установлено точно распределение катионов и из-за наличия тяжелых атомов имеются проблемы с локализацией атомов кислорода. На новом 48-детекторном дифрактометре высокого разрешения, установленном на канале реактора ВВРМ в июле 2007 года проведены дифракционные исследования, получены нейтронные спектры, результаты исследований обрабатываются.

5. Исследования платино-графитовых катализаторов, используемых в водородных топливных элементах, и оптимизация их свойств

По результатам различных исследований показано, что оптимальный размер платиновой гранулы в катализаторе должен быть на уровне (3-5) нм. В первых образцах катализаторов этот размер был далёк от оптимального (около 8 нм)

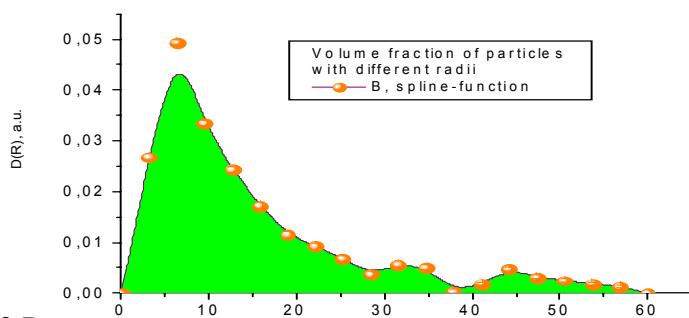


Рис.2 Распределение частиц по размерам по данным нейтронного малоуглового эксперимента.

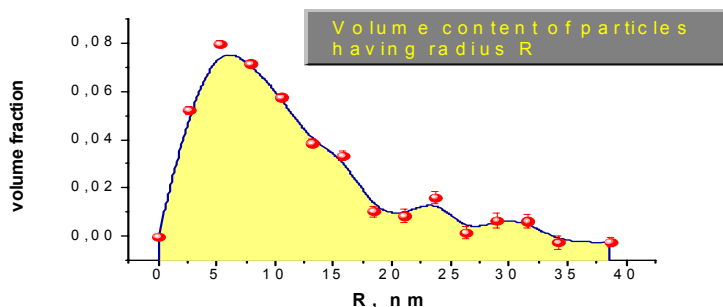


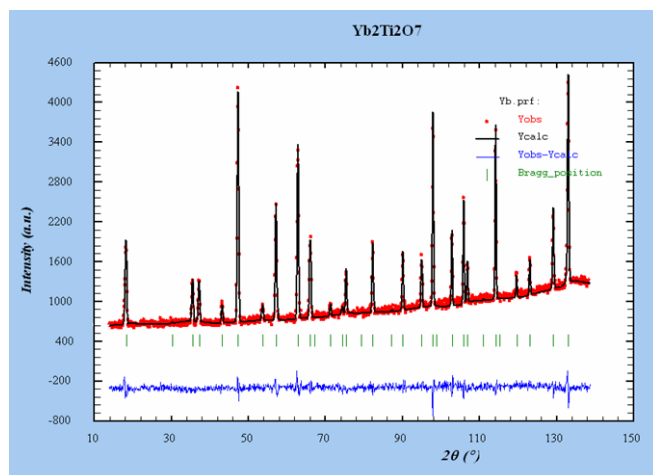
Рис.3

Модернизация технологии получения Pt-C- композитов привела к понижению размера платинового кластера близких к оптимальному. Работы по модификации технологии платино –содержащих углеродных нанокомпозитов необходимо продолжить.

V. A. Trounov, V. T. Lebedev, Yu. S. Grushko, A. E. Sokolov, I. I. Ivanova, V. B. Rybakov.
Some Capabilities of Neutron Methods for Investigating Materials and Components of Devices
Used in Hydrogen Power, Engineering *Crystallography Reports*, 2007, Vol. 52, No. 3, pp. 512–520.

6. Исследование кристаллической и магнитной структуры кристалла $\text{TbFe}_3(\text{BO}_3)_4$ методом нейтронного рассеяния.

Начато изучение совместно с институтом Химической Физики РАС влияния гетеровалентного замещения щелочноземельным катионом Ca^{2+} подрешетки иттербия в $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$.



Исследования структуры титанатов редкоземельных элементов в случаях гетеровалентного замещения методом дифракции нейтронов представляют значительный интерес, как научный, так и практический, для понимания механизма ионной проводимости в этих соединениях и твердых растворах, увеличения уровня ионной проводимости и, следовательно, их дальнейшего практического использования.

Начаты успешные нейтронные структурные исследования МГУ, ЛГУ, Ин-том Катализа им. Борескова, Ин-тутом Хим.Физики.

Необходимо разработать механическую оснастку для размещения на дифрактометре высокотемпературной печи, крио-печи, разработать и создать крио-печь на уровень температур 4 К, провести модернизацию узлов дифрактометра (детекторную часть) и программного обеспечения по результатам реальных экспериментов.

7. Исследование конкуренции между спин-стекольным состоянием и антиферромагнетизмом в сложных электронно-допированных манганитах $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.9-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$

Нейтронные дифракционные исследования обнаружили различные пространственные группы для $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.6}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ ($Pnma$) и $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{Sr}_{0.6}\text{MnO}_3$ ($I4/mcm$). Температурная зависимость нейтронограмм демонстрирует два магнитных перехода без структурных переходов у $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.3}\text{Sr}_{0.6}\text{MnO}_3$. При ≈ 240 К начинается С-типа антиферромагнитное (АФМ) упорядочение и при ≈ 120 К G-типа АФМ состояние. Магнитное упорядочение у $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.6}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ подобно: с С- и G-типа АФМ, образующимися при ≈ 150 и 70 К, соответственно. Тем не менее, для последнего соединения при 150 К наблюдается структурный переход (из $P-Pnma$ к $C\text{-АФМ-}P2_1/m$), ассоциирующийся с магнитным. В обоих случаях нигде по температуре не наблюдается никакого ферромагнетизма. Это коррелирует с данными по намагниченности, которые показывают, что ферромагнитная (ФМ) компонента, составляющая около $\sim 1\mu_B/\text{f.u.}$ для $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.9}\text{MnO}_3$, очень чувствительна к замещению кальция стронцием, и полностью подавляется для $\text{Sm}_{0.1}\text{Ca}_{0.7}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$. Построены магнитные и структурные фазовые диаграммы, которые демонстрируют сильную связь между структурой и свойствами для этой $\text{Mn}^{+3.9}$ серии. Конкуренция ФМ/АФМ-G/АФМ-С приводит к различным и удивительным свойствам, особенно для малых величин x , например, к появлению метастабильного диамагнетизма для $x=0.06$.

8. Исследование структурных особенностей соединений типа $\text{K}_{1-x}\text{Co}_x(\text{Fe}(\text{CN})_6)$

Разработана методика синтеза комплексов $K_{1-x}Co_x(Fe(CN)_6 \cdot nD_2O)$ в водном растворе. Проведены нейтронные дифракционные исследования соединений типа берлинской лазури $K_{0.4}Co_{1.3}[Fe(CN)_6] \cdot nD_2O$ и $K_{0.5}Co_{1.25}[Fe(CN)_6] \cdot nD_2O$ на новом порошковом 48-детекторном нейтронном дифрактометре высокого разрешения, установленном на 9-канале реактора ВВР-М. Установлена последовательность фазовых переходов в исследуемых соединениях. Переходы связаны с последовательными поворотами комплекса $Co(CN)_6$ относительно (010) и (001) направлений исходной кубической решетки. В результате проведенной работы была показана адекватность и высокая эффективность нейтронных методов применительно к исследованию нового класса магнетиков на основе берлинской лазури.

9. Исследования механизмов стабилизации водорода в композитах на основе цинк-никель-медных оксидов

Методами рассеяния нейтронов изучены композиты $ZnOCuH(D)$, насыщенные водородом (дейтерием) до содержания ~ 1 % мас. При охлаждении образцов (матрицы ZnO с кристаллами Cu размером ~ 10 нм) от 300 до 4 К водород (дейтерий) конденсируется у поверхности и проникает внутрь кластеров, где атомная концентрация H относительно Cu достигает ~ 30 % при 20 К. Одновременно водород заполняет нанопоры ZnO -матрицы. Установлено, что при 90-300 К примерно 1/3 водорода участвует в быстрой диффузии (константа $\sim 8 \cdot 10^{-5}$ см²/с), а 2/3 - локализовано. При 20 К доля подвижного водорода падает до ~ 10 %. Данные указывают на низкие энергетические барьеры, удерживающие водород в областях дефектов.

V. A. Trounov, V. T. Lebedev, Yu. S. Grushko, A. E. Sokolov, I. I. Ivanova, V. B. Rybakov. Some Capabilities of Neutron Methods for Investigating Materials and Components of Devices Used in Hydrogen Power *Engineering Crystallography Reports*, 2007, Vol. 52, No. 3, pp. 512–520.

10 Продолжение исследования комплексов сульфированных тетрафенилпорфинов с поливинилпирролидоном методами малоуглового рассеяния нейтронов, спектрофотометрии, вискозиметрии

Показано преимущество использования магнитной жидкости, стабилизированной лимонной кислотой (ФМЖ-2) для биомедицинского применения перед жидкостью, стабилизированной ионами хлора (ФМЖ-1).

Выявлены структурные отличия магнитных жидкостей на лимонной кислоте, приготовленных с разными исходными концентрациями. В жидкости с низкой исходной концентрацией (ФМЖ-2.1) магнетит содержится в виде отдельных частиц, кластеры магнетита отсутствуют и не образуются при повышении концентрации этой жидкости методом испарения, а в жидкости с высокой исходной концентрацией (ФМЖ-2.2) присутствуют кластеры магнетита, которые частично разрушаются при выпаривании жидкости досуха.

Представленные результаты позволяют сделать вывод об образовании комплексов порфиринов с частицами магнетита. В случае фотодитазина показано сохранение его фотокаталитических свойств в комплексе с ФМЖ-2 и усиление их под действием плуроника. Проведены успешные испытания препарата на онкологических культурах. Результаты могут быть использованы при создании магнитоуправляемого препарата для ФДТ.

[1] Ю.В. Кульвелис, В.А. Трунов, В.Т. Лебедев, Д.Н. Орлова, М.Л. Гельфонд¹, Н.С. Мелик-Нубаров², Т.М. Жиентаев². СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ С ПОРФИРИНАМИ, Препринт ПИЯФ-2007, 2736, 21 стр.

Принята к печати в журнале «Кристаллография»

Проект 4.4.

Исследование функциональных материалов и методика специального облучения образцов

Руководители проекта: д.ф.-м.н. Р.Ф. Коноплева,
к.ф.-м.н. С.П. Беляев,
к.ф.-м.н. В.А. Чеканов,
к.ф.-м.н. И.В. Назаркин

1. Выполнить изотермический отжиг образцов сплава TiNi с памятью формы, облученных нейтронами реактора для определения термоактивационных констант кинетического уравнения отжига.

Выполнен изотермический отжиг образцов сплава TiNi с памятью формы, облученных флюенсом нейтронов $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$. В результате отжига при температурах 380 К – 500 К установлено, что энергия активации процесса возврата электросопротивления составляет 0.65 эВ.

2. Методом компьютерного моделирования исследовать изменение критических температур мартенситных превращений в сплаве TiNi, облученном нейтронами реактора в условиях температурно -радиационного воздействия.

На основании ранее полученных экспериментальных данных определен вид дифференциального уравнения для скорости изменения критических температур фазовых переходов в сплаве TiNi с памятью формы. Выполнены расчеты изменения температур превращений, которые показали удовлетворительное согласие с экспериментом.

3. Методом ультразвуковой резонансной спектроскопии провести комплексное исследование наноструктур на основе наноалмазов в зависимости от объемной доли пироуглерода и зольности исследуемых образцов.

Методом ультразвуковой резонансной спектроскопии выполнены исследования упругих параметров решетки и неупругих релаксационных характеристик наноалмазов с пироуглеродом с различной зольностью в зависимости от состава материала. Показано, что обнаруженные пики внутреннего трения могут быть обусловлены процессами неупругой релаксации на границе раздела «наноалмаз–пироуглерод».

4. Исследовать акустическую эмиссию в материалах TiNi с эффектом памяти формы для выяснения влияния структурных фазовых переходов, возникающих в процессе термоциклирования, на характер интенсивности акустической эмиссии.

Выполнены исследования акустической эмиссии (АЭ), возникающей в образце TiNi при термоциклировании. При нагреве наблюдается возрастание интенсивности АЭ. При охлаждении наблюдается незначительное увеличение интенсивности АЭ в том же диапазоне температур. Можно предположить, что такой характер АЭ связан с мартенситными переходом в TiNi.

Проект 4.5.

Определение надатомной структуры и микроскопических механизмов разрушения металлов (аустенитные стали, алюминиевые сплавы).

Руководители проекта:

проф. А.И.Окороков,

д.ф.-м.н. В.Т. Лебедев

Изучение надатомной структуры стали и характера нанодефектов в области сварного соединения и в основном металле реакторных конструкционных материалов.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучены стали X18H10T, пластически деформированные до разрыва. При этом не возникало существенной анизотропии распределения интенсивности рассеяния $I(q)=I_0 \cdot [1+(qR_C)^2]^{-D/2}$, где показатель $3 < D < 4$, $R_C \sim 20\text{--}40\text{ нм}$ - радиус корреляции дефектов. Интенсивность $I=I_0$ в пределе малых переданных импульсов $q \rightarrow 0$ возрастала на порядок за счет развития гладкой поверхности (декогезия на границах включений, трещины, границы кристаллитов, скопления дислокаций, поры), а показатель $D(S)=D_0+\alpha \cdot S=3.2\text{--}3.9$ ($D_0=3.17 \pm 0.01$, $\alpha=0.0123 \pm 0.0004$) увеличивался линейно с растяжением $S=0\text{--}60\%$, показывая приближение к разрушению.

Сварной шов сканировали тонким нейтронным пучком (рис.1), измеряя малоугловое рассеяние в основном металле и материале шва. Измеренные сечения рассеяния показали наличие трех типов дефектов (радиусы инерции $R_{g1} \sim 20\text{ нм}$, $R_{g2} \sim 9\text{ нм}$ и $R_{g3} \leq 1\text{ нм}$ - "точечные" дефекты), количество которых резко различалось в зоне основного металла и внутри шва (рис.2,3). В шве число частиц первого и второго типа было в ~ 5 раз меньше, чем в основном металле, а количество точечных дефектов находилось на минимальном уровне (измеренное сечение $\sim$ некогерентного фона ядерного рассеяния).

Из анализа данных в предположении, что частицы размером $R_{g2} \sim 9\text{ нм}$ - карбиды Cr_{23}C_6 , определено их объемное содержание в основном металле $C=0.1\%$, что соответствует массовой доле углерода $C_C=0.05\%$, близкой к его полной концентрации ($C=0.07\%\text{ мас.}$) в данной стали. В металле шва только $0.01\%\text{ мас.}$ углерода связано в карбидах. Наблюдаемый размер крупных частиц $R_{g1} \sim 20\text{ нм}$ согласуется с моделью кластеров малых частиц в виде монослоев на границах кристаллических блоков.

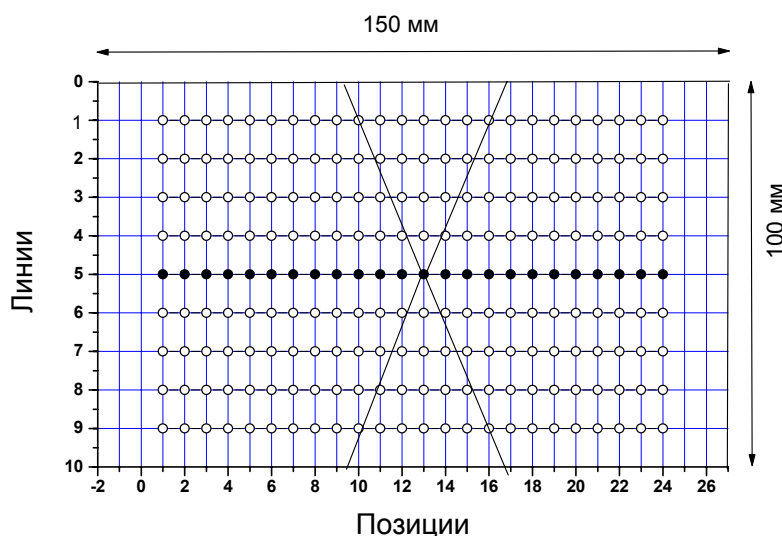


Рис.1. Сканирование сварного соединения (материал корпуса промышленного реактора) тонким пучком холодных нейтронов.

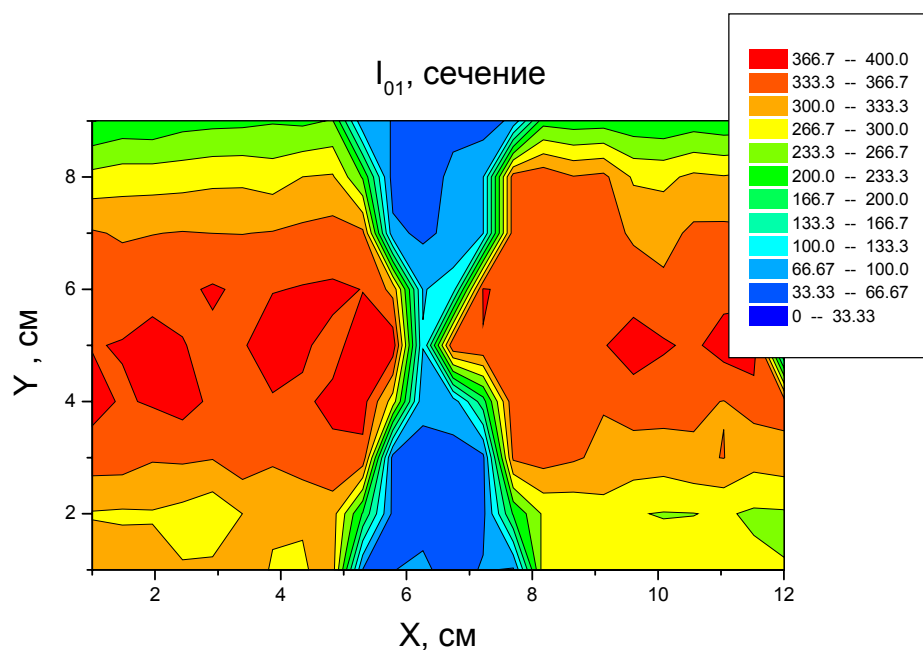


Рис.2. Сечение рассеяния в пределе малых импульсов I_{01} для больших частиц (шкала в см^{-1}).

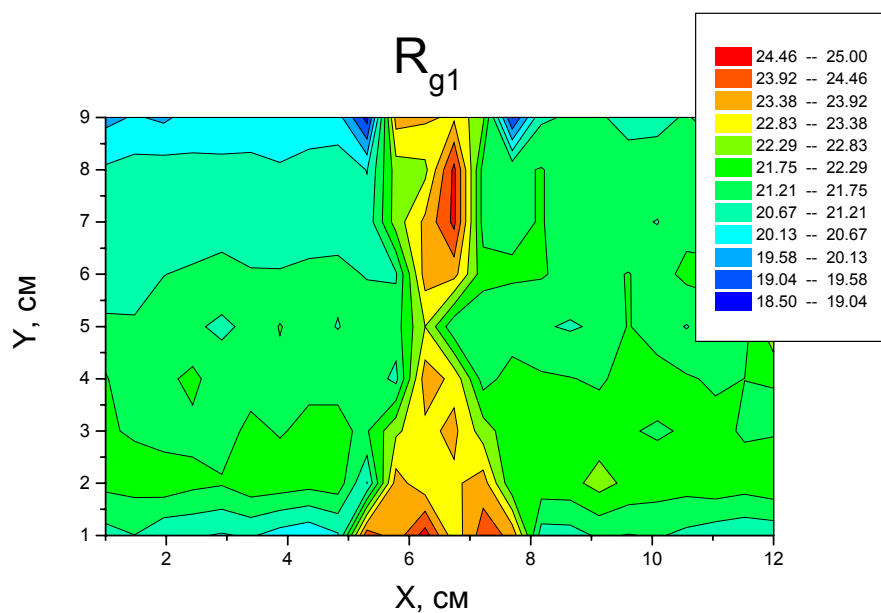


Рис. 3. Радиус инерции крупных частиц (шкала в нм).

полностью выполнена и опубликована:

Публикация:

Rogante M., Cesari F.G., Lebedev V.T. Defectoscopy and perspectives related to metallic materials adoptable in hydrogen storage pressure tanks production, Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials. NATO Security through Science Series, Vol. XLI (2007), pp. 139-148.

Проект 4.6.

Исследования надмолекулярной структуры композиционных полимерных материалов и сегнетокерамик нового поколения

Руководители проекта:

к.ф.-м.н. С.П. Кузнецов (ФИАН им.П.Н. Лебедева),

д.ф.-м.н.В.Т. Лебедев (ПИЯФ РАН)

В процессе реализации данного проекта в 2007 году было выполнено:

1. Разработана методика измерений дифференциальных сечений рассеяния ОХН.
2. Разработана методика определения параметров надмолекулярной структуры при нарушениях условий применимости Борновского приближения.
3. Проведены исследования надмолекулярной структуры (НМС) композиционного материала на основе полипропилена и многослойных углеродных нанотрубок.

1. Метод отражения ОХН.

При исследовании НМС с помощью рассеяния ОХН нами, как правило, измеряется пропускание ОХН образцом в зависимости от скорости или длины волны ОХН. Этот метод дает возможность выделить сечение рассеяния ОХН на элементах НМС и определить усредненные параметры исследуемой структуры. Очевидно, что дифференциальное сечение рассеяния более чувствительно к форме и размерам рассеивателя чем сечение интегральное. В связи с этим нами были получены выражения, позволяющие выделять дифференциальные сечения рассеяния ОХН из зависимостей (от длины волны $-\lambda$, энергии $-E$, модуля волнового вектора $-q$ или скорости $-V$ ОХН) коэффициента отражения ОХН от исследуемого образца $R_{ex}(\lambda)$.

Чувствительность метода падает с увеличением углового размера детектора Ωd (рис.1)

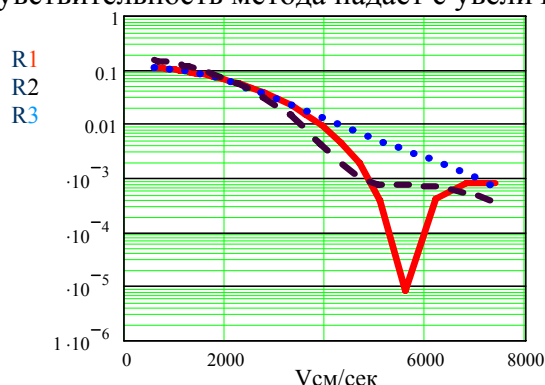


Рис.1 Дифференциальное сечение рассеяния ОХН на сфере с учетом углового размера детектора

- $R1$ - идеальный детектор
- $R2$ - $\Omega d = 0.07$
- $R3$ - $\Omega d = 0.15$

Проведено сравнение результатов исследования образца термопрессованного бериллия полученных методами пропускания и отражения ОХН (рис.2).

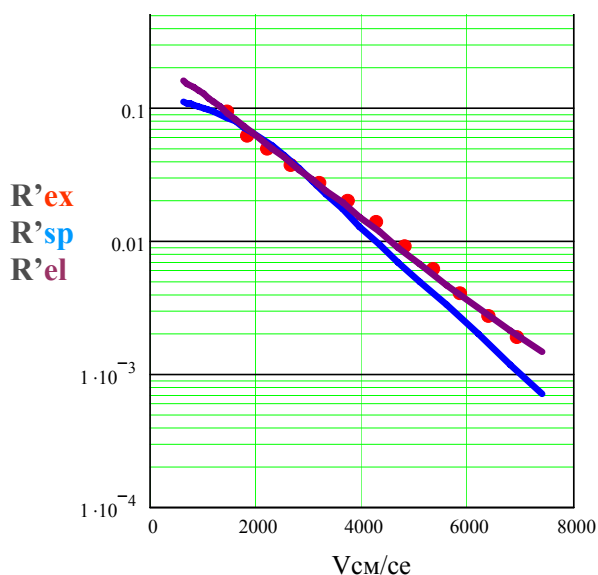


Рис.2

Дифференциальные сечения рассеяния ОХН на термо-прессованном бериллии.

- - эксперимент;
- $R'sp$ - рассеяние на сферических порах (1) $R=5.1$ нм и $n=10^{15} \text{ см}^{-3}$ Эти параметры были получены путем пропускания ОХН сквозь тот же образец.
- $R'el$ - рассеяние на изолированных эллипсоидах (2): $R=3.5$ нм и $v=3.9$ и объемной долей пор определенной методом пропускания.

Как видно из Рис.2 лучшее согласие с экспериментом достигается при применении модели эллипсоидов вращения с объемной долей определенной ранее методом пропускания.

2. Исследование НМС методом пропускания ОХН при нарушениях условий применимости Борновского приближения

Условия применимости БП могут быть нарушены, если, например, размеры НМС (параметр - R) увеличиваются. В таком случае следует применять иное приближение.

Для описания рассеяния ОХН на сферах большого радиуса ($R > 100\text{нм}$) были применены формулы Факсена-Хольцмарка, на основании которых была получена формула для сечения рассеяния ОХН с учетом конечного размера детектора.

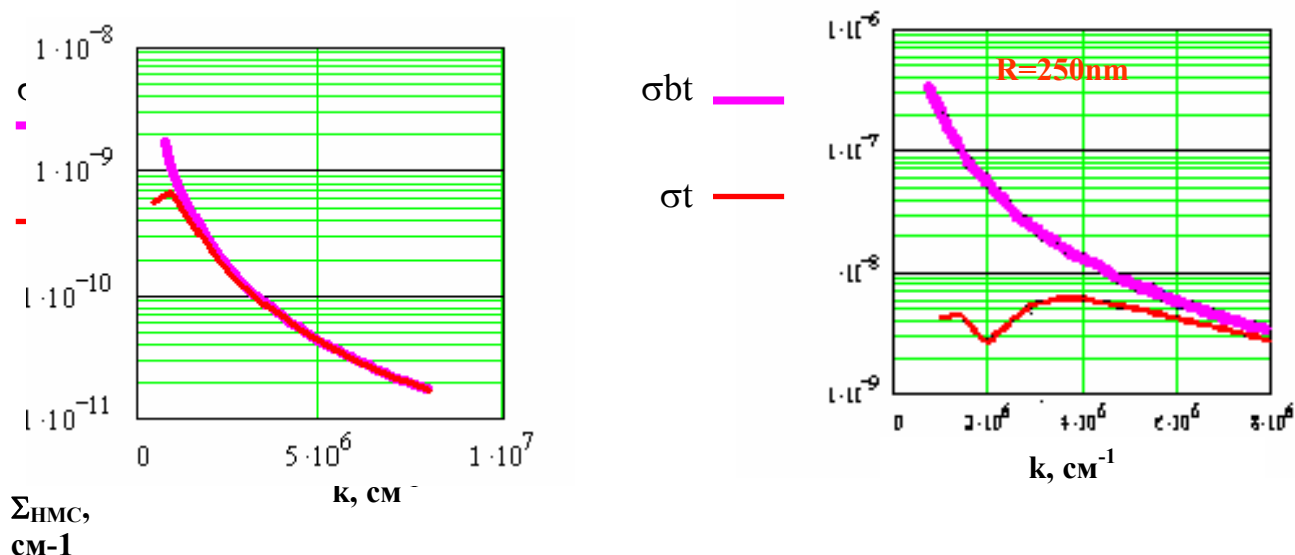


Рис. 3. Полные сечения рассеяния ОХН на сферах с $R=100\text{нм}$ и $R=250\text{нм}$ рассчитанные в Борновском приближении - σ_{bt} и учетом конечного размера детектора – σ_t .

Как видно из рис.3, различия между σ_{bt} и σ_t растут пропорционально радиусу частицы. Рассеяние ОХН было применено для определения размеров частиц алюминия в глицерине.

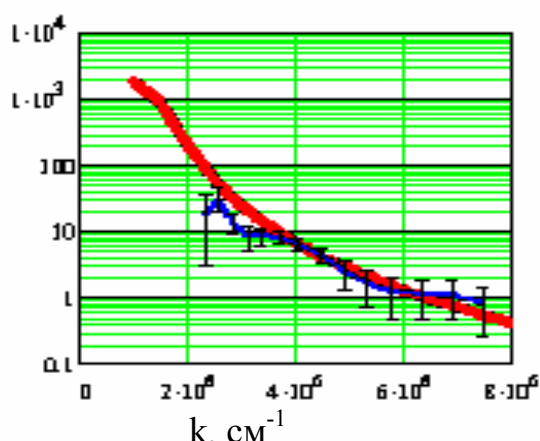


Рис. 4. Экспериментальная и теоретическая (Факсен-Хольцмарк $R=250\text{нм}$) зависимости $\Sigma_{\text{НМС}}(k)$ для рассеяния ОХН на частицах Al в глицерине.

Лучшее согласие с экспериментом достигается при радиусе частиц 250 нм, что согласуется с данными электронной микроскопии.

3. Определение размеров многослойных углеродных нанотрубок с помощью рассеяния ОХН.

Для определения параметров нанотрубок из экспериментальных зависимостей $\Sigma_{\text{SMS}}(k)$, была получена формула для сечения рассеяния на полом прямом цилиндре с учетом конечного углового размера детектора ОХН:

Исследовались композиционные материалы на основе полипропилена наполненного многослойными углеродными нанотрубками трубками с разным размером и степенью наполнения. Типичная экспериментальная кривая представлена на рис. 5, а результаты в таблице 1. Показано, что экспериментальные зависимости могут быть достаточно хорошо описаны с учетом конечного углового размера детектора ОХН. В качестве наполнителя использовались углеродные нанотрубки с внешним радиусом (по данным изготовителя) от 20 до 30 нм. Определенные методом ОХН значения внешних радиусов находятся вблизи средних значений указанных изготовителем. Толщина трубок определенная методом ОХН колеблется в пределах 3.0-4.0 нм. Уменьшение объемной доли изолированных трубок указывает на возрастание объемной доли агломератов с ростом степени наполнения.

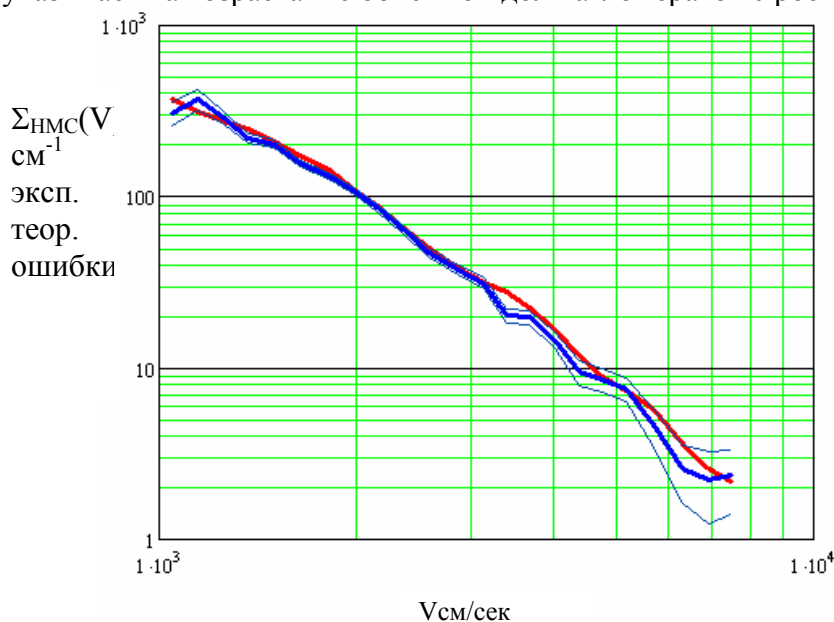


Рис.5. Экспериментальная и теоретическая (4)R1=26,5нм зависимости $\Sigma_{\text{HMC}}(V)$ для образца NT(K3)-1

Код образца	Модификация	Содерж. наполнителя (вес.)	Объемная доля изолированных нанотрубок. (ОХН)	Внешн. радиус, нм (ОХН)	Внутр. радиус, нм (ОХН)
NT(K3)-1	М	1%	90%	26,5	22,5
NT(K3)-2	М	3%	60%	25,9	22,5
NT(K3)-3	НМ	1%	90%	26,5	21,7
NT(K3)-4	НМ	3%	60%	26,5	22,5

Таблица 1. Параметры многослойных углеродных нанотрубок определенные методом ОХН.

Исследование надмолекулярных структур фуллеренсодержащих полимеров с разными типами связей полимер-фуллерен (донорно-акцепторными, ковалентными) в растворах (совм. с ИВС РАН).

Этап 2007:

а) Исследование конформационного перехода клубок-глобула в поли-N-винилкапролактаме и его комплексах с фуллереном C_{60} в водных растворах методами рассеяния нейтронов

Первоначально работы по синтезу фуллерен-полимерных комплексов стимулировались открытием фотоиндуцированного переноса заряда. Фуллерен-полимерные комплексы для приложений (биохимия, нелинейная оптика) были созданы в ИВС РАН. Использование фуллеренов в биологии и медицине ограничено трудностями введения их в водные среды (в воде фуллерены нерастворимы). Требуются производные для транспорта фуллерена в клетки (ткани) при сохранении его электронной структуры. Эта задача решается путем соединения фуллерена с водорастворимыми полимерами через невалентные связи, например, в случае комплекса поли-*N*-винилпирролидон+ C_{60} (ПВП+ C_{60}), подавляющего репродукцию вируса гриппа (ПВП+ C_{60} сравним по действию с ремантадином). Сочетание свойств гидрофобных углеродных каркасов и гидрофильных полимеров создает уникальные наноматериалы, неизвестные в природе.

В ИВС РАН синтезированы комплексы поли-*N*-винилкапролактама (ПВКЛ, масса $M=2.8 \cdot 10^5$, содержание C_{60} в сухом полимере 1.8 % мас.). ПВКЛ - водорастворимый и нетоксичный поли-*N*-виниламид - аналог природных полимеров с амидной группой (белковых молекул). При нагревании выше $T_C \sim 32^\circ\text{C}$ ПВКЛ испытывает переход клубок-глобула и способен при этом захватывать молекулы из раствора. Таким способом достигается иммобилизация (инкапсулирование) ферментов, белков и живых клеток, которые в ПВКЛ-оболочках сохраняют функциональные свойства при нагревании до 70°C . Эти свойства ПВКЛ возможно усилить путем присоединения к нему фуллерена C_{60} - акцептора электронов, что позволяет перевести фуллерен в водорастворимую форму.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучены структуры линейного ПВКЛ и комплексов ПВКЛ+ C_{60} в тяжелой воде (концентрация полимера 0.5 % г/дл) в диапазоне $20-40^\circ\text{C}$, включавшем критическую область. Соединение ПВКЛ+ C_{60} имеет много общего с комплексом ПВП+ C_{60} (донорно-акцепторное взаимодействие полимер-фуллерен, полимер выступает донором, а молекула C_{60} - акцептором электронов). В опытах при длине волны нейтронов $\lambda = 0.408$ нм перекрывался диапазон импульсов $q = 0.1 - 4$ нм $^{-1}$ для наблюдения структуры растворов от масштаба звена полимера до размеров макромолекул в цикле нагревание-охлаждение через область перехода клубок-глобула.

На масштабе клубка поведение ПВКЛ и комплекса сильно различаются. Сечение раствора ПВКЛ подчиняются закону Зимма

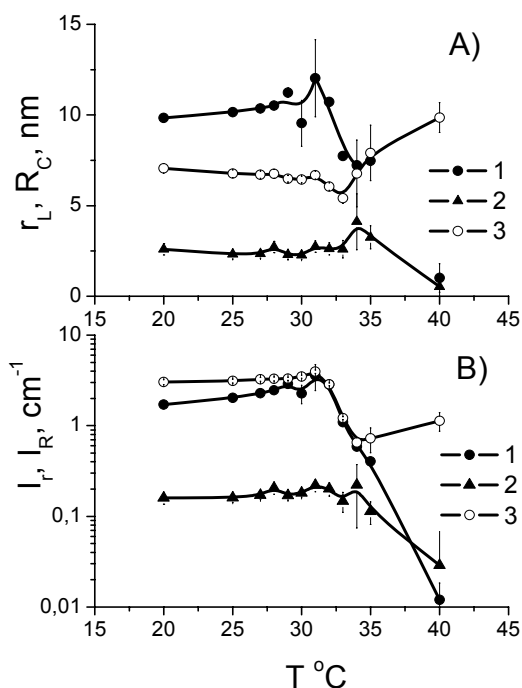


Рис. 1. Изменение параметров сечения ПВКЛ и комплекса при нагревании от 20°C до 40°C : А). 1, 3 – радиусы корреляции r_L клубков чистого ПВКЛ и гауссовых фрагментов цепи в составе комплекса, 2 – корреляционный радиус R_C глобулярной области комплекса; Б). 1, 3 – сечения рассеяния I_T в пределе малых импульсов для чистого ПВКЛ и гауссовых фрагментов цепи комплекса; 2 – аналогичное сечение I_R глобулярных областей комплексов. Линии – сплайн-функции.

$$d\sigma/d\Omega = \sigma(q) = I_r/[1+(r_L q)^2]$$

где I_r - сечение в пределе $q \rightarrow 0$, r_L - длина корреляции, связанная с радиусом инерции клубка $r_G = r_L \cdot \sqrt{3}$. Для комплекса наблюдается закон рассеяния

$$\sigma(q) = I_r/[1+(r_L q)^2] + I_R/[1+(R_C q)^2]^2 + B,$$

где есть вклад глобулярных структур с корреляционным радиусом $R_C \geq r_L$. Рассеяние от глобул в пределе малых импульсов характеризуется параметром I_R .

В отличие от ПВКЛ, комплекс изначально находится в растворе в виде глобул радиусом $R_C \sim 7$ нм меньше размера клубка ПВКЛ (~ 10 нм). В глобулах видны фрагменты полимерных цепей сегментального масштаба $r_L \sim 2-3$ нм. В растворе ПВКЛ при нагревании ($20-31^\circ\text{C}$) наблюдается ассоциация клубков (средняя масса частицы ~ 1.5 массы клубка). В растворе комплекса такая степень ассоциации достигнута при 20°C . Нагревание до перехода не меняет массу ассоциатов, параметр $I_R \approx \text{const}$. Выше $T_C \sim 31-32^\circ\text{C}$ до 35°C он убывает на порядок вследствие агрегирования глобул в крупные структуры, рассеивающие в область малых импульсов. Для глобулярных комплексов коллапс выражен слабее: уменьшение радиуса, $R_C = 7 \rightarrow 5$ нм, при $30-33^\circ\text{C}$. При нагревании до 40°C размер глобул увеличивается до 10 нм за счет роста длины сегмента r_L в цепях плотной полимерной фазы.

При высоких импульсах рассеяние отражает локальную конформацию цепей на масштабе от размера звена до размера сегмента. Сечение подчиняется функции $\sigma(q) = A/q^D$, где показатель D (рис. 2) показывает, насколько цепь является свернутой ($D = 2$ для гауссовой цепи, $D = 5/3$ для цепи с исключенным объемом, $D = 1$ для полностью вытянутой цепи).

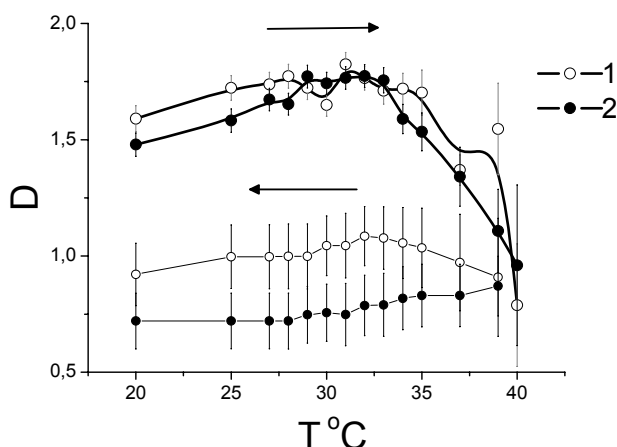


Рис. 2. Температурная зависимость показателя $D(T)$ для ПВКЛ и комплекса: светлые точки - ПВКЛ, темные - комплекс. Стрелками показано нагревание и охлаждение. Линии – сплайн-функции.

Суммируя результаты нейтронных экспериментов для ПВКЛ и комплекса, отметим новый необычный эффект упорядочения полимеров выше перехода клубок-глобула: локальное конформационное превращение в цепях ПВКЛ и комплекса, приобретающих вытянутые конформации на масштабе сегмента. Одновременно макромолекулы сжимаются по объему в 3 раза. В этих условиях в плотных глобулах возможны элементы нематического порядка в упаковке фрагментов размером масштаба длины сегмента.

Работа полностью выполнена, результаты доложены на Международной конференции «Фуллерены и атомные кластеры» (1-6 июля 2007, С.-Петербург). Полностью результаты будут опубликованы в трудах конференции.

Lebedev V.T., Torok Gy., Melenevskaya E.Yu., Vinogradova L.V., Ivanova I.N.
Poly(N-vinylcaprolactam)- C_{60} complexes in aqueous solution. // 8th Biennial Intern.
Workshop "Fullerenes and atomic clusters". July 2-6, 2007. St.-Petersburg. Abstracts P. 19.

Проект 4.7.

Изучение структуры и динамики молекулярных и надмолекулярных биологических комплексов методами рассеяния нейтронов

Руководитель проекта: к.ф.-м.н. В.В. Исаев-Иванов

Аннотация. Впервые, на основе структурных данных, полученных в экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов (МРН) на ядрах клеток эритроцитов курицы, лейкоцитов крови крыс, аденокарциномы шейки матки человека Hela, фибробластов китайского хомячка A238, выделенных из нативных клеток, показано, что упаковка хроматина в злокачественно трансформированных клетках HeLa и A238 существенно отличается от упаковки хроматина в ядрах нормальных клеток (эритроцитов курицы и лимфоцитов крыс). В случае аномально пролиферирующих злокачественно трансформированных клеток, хроматин в составе целого ядра имеет существенные возмущения в характере нуклеосомной организации в среднем по ядру.

4.7.1. Разработка метода изменения функциональной подвижности структурных доменов ResA белка из *Escherichia coli* путем направленного мутагенеза по созданию искусственных дисульфидных мостиков и анализа экспериментальных кривых малоуглового рассеяния нейтронов.

Этап 2007г. Исследование конформационной подвижности филаментной структуры ResA белка с помощью малоуглового рассеяния нейтронов и мутантных белков с обездвиженными N- и C-концевыми доменами.

На установках малоуглового рассеяния ЮМО (реактор ИБР-2, ОИЯИ, Дубна) и D-11 (Институт Лауе-Ланжевин, Гренобль, Франция) были получены кривые рассеяния нейтронов для комплексов мутантного белка ResA [Q261C, N269C] с нуклеотидными кофакторами (АТФ γ S, однострессовой ДНК и двустрессовой ДНК). Результаты показали, что по наблюдаемым конформационным состояниям филамента мутантный белок практически не отличается от белка ResA из *E.coli* дикого типа. Проведенный анализ биохимических характеристик мутантного белка показал, что дисульфидный мостик между цистеиновыми остатками в 261 и 269 положениях не образуется спонтанно, однако может образоваться в присутствии таких агентов, как 2,2'-дитиопирин, либо комплекс Cu^{2+} с фенантролином ($\text{Cu}^{2+}[\text{Phn}]_3$). Были подобраны условия обработки белка комплексом $\text{Cu}^{2+}[\text{Phn}]_3$, при которых практически все указанные цистеиновые остатки в мутантном белке образуют дисульфидную связь. При этом в контрольных экспериментах белок дикого типа, подвергнутой аналогичной обработке, сохранял биохимическую активность.

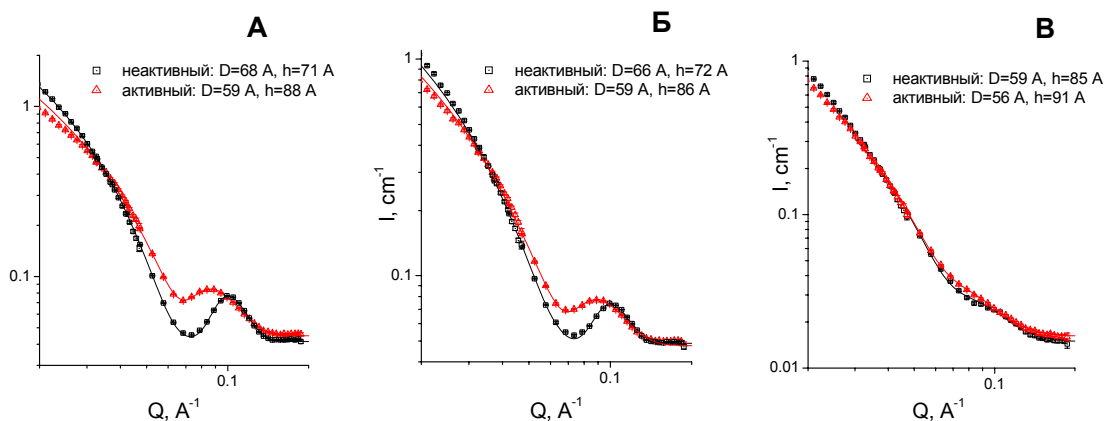


Рис. 1. Спектры рассеяния филаментами белков ResA дикого типа (А), мутантного белка ResA [Q262C, N270C] до и после образования дисульфидного моста в С-домене (Б и В, соответственно). Неактивный филамент образован инкубацией белка с 10 mM Mg^{2+} . Активный филамент образован в присутствии 10 mM Mg^{2+} , 2 mM АТФ γ S и 900 мкМ онДНК. Данные получены на спектрометре D11 (ИЛЛ, Гренобль).

Результаты малоуглового нейтронного рассеяния (Рис. 1) показали, что после обработки $\text{Cu}^{2+}[\text{Phn}]_3$ крупномасштабная структура мутантного белка RecA [Q261C, N269C] значительно меняется. При этом независимо от связывания нуклеотидных кофакторов и ионной силы растворителя шаг спирального филамента белка лежал в диапазоне от 85 до 94 Å, что соответствует активной конформации белка.

Полученные результаты являются прямым подтверждением функционального значения подвижности С-концевого домена белка RecA и указывают на координированное движение С- и N- концевых доменов белка при переходе из неактивной в активную конформацию.

4.7.2. Исследование фрактальных характеристик упаковки белковой и нуклеиновой компонент хроматина в интерфазных ядрах клеток эукариот различающихся размерами клеточного ядра, транскрипционной активностью ядер, степенью стабильности и перестроенности генома методом малоуглового рассеяния нейтронов.

Этап 2007г. Методом малоуглового рассеяния нейтронов провести сравнительное исследование организации хроматина в ядрах различных клеток млекопитающих и птиц. Исследовать зависимость наблюдаемых различий от содержания РНК и ее синтеза, наличия разрывов в ДНК, и изменения топологии ДНК интеркаляторами.

Принимая во внимание высокий уровень транскрипционной активности злокачественно трансформированных клеток по сравнению с нормальными клетками, цель работы настоящего этапа состояла в сравнительном анализе средних по ядру структурных параметров нуклеосомной упаковки и более высоких порядков упаковки хроматина в составе нативных ядер нормальных и злокачественно трансформированных клеток и влияния на эти параметры РНК.

В качестве объектов исследования использовались целые ядра, выделенные из нативных клеток эритроцитов курицы (ЯЭК), лейкоцитов селезенки крыс (ЯЛК), культивируемых клеток аденокарциномы шейки матки человека HeLa (HeLa), перевиваемой линии клеток фибробластов китайского хомячка A238 (A238). Ядра выделялись из клеток путем использования щадящих препаративных процедур, позволяющих сохранить упаковку хроматина в нативных условиях, после чего структура хроматина фиксировалась глутаровым альдегидом.

Кривые рассеяния нейтронов для указанных ядер были получены на установке малоуглового рассеяния D-11 (Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция).

Полученные экспериментальные результаты, позволяют сделать вывод о том, что для ЯЭК и ЯЛК параметры нуклеосомной структуры, в среднем по ядру, близки к общепринятым значениям, а функция распределения по расстояниям (ФРП), получаемая из кривых рассеяния, является бимодальной (рис.2). Бимодальность ФРП отражает неширокое распределение расстояний между нуклеосомами, в среднем по ядру, в фибриллярном уровне организации хроматина. Гистоновый кор нуклеосомной структуры в ядрах клеток HeLa и A238, в среднем по ядру, находится в состоянии существенно менее компактном, чем у ЯЭК и ЯЛК, а ФРП признаков бимодальности не имеет.

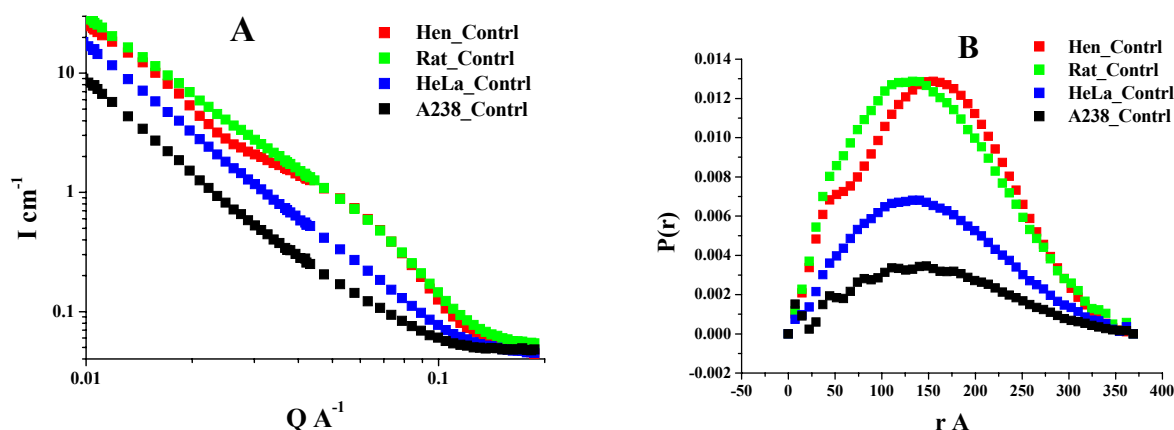


Рис. 2. Кривые рассеяния (А) и функции распределения по расстояниям (В), полученные из экспериментальных кривых, для ядер, выделенных из нормальных клеток (ЯЭК и ЯЛК) и для ядер, выделенных из злокачественно трансформированных клеток (HeLa и A238).

Удаление РНК из ядер клеток HeLa делает структуру гистоновоего кора нуклеосом по компактности близкой к ЯЭК и ЯЛК, обработанных интеркалятором ДНК EtBr, однако при этом ФРП не имеет бимодальной формы, как это имеет место у ЯЭК и ЯЛК в нативном состоянии.

Таким образом, впервые показано, что нуклеосомная структура упаковки ДНК в аномально пролиферирующих клетках (HeLa и A238), в среднем по ядру, кардинально отличается от нормальных клеток, и существенную роль в этой организации играет ядерная РНК.

Проект 4.8.

Исследование динамики решетки смешанных соединений и нанокompозитных материалов методом рассеяния нейтронов

Руководители проекта:

проф. С.Б. Вахрушев (ФТИ РАН),

проф. А.И. Окорочков (ПИЯФ РАН),

к.ф.-м.н. С.В. Григорьев (ПИЯФ РАН),

к.ф.-м.н. И.В. Голосовский (ПИЯФ РАН)

1. Изучить температурную эволюцию собственных векторов квазистатических ионных смещений в PMN, возникающих ниже температуры Бёрнса и приводящих к появлению центрального пика. Определить температурные зависимости относительных вкладов полярной компоненты и деформационной компоненты. С этой целью провести измерение двумерных карт распределения интенсивности диффузного рассеяния в окрестности ряда узлов обратной решетки со структурными факторами различной симметрии.

Вопрос о природе центрального пика, возникающего в сегнетоэлектриках релаксорах ниже температуры Бёрнса T_d , остается открытым более десяти лет. Необычность ситуации заключается в том, что в отличие от других соединений, претерпевающих фазовые переходы структурный фактор центрального пика принципиально отличается от структурного фактора мягкой моды. Ранее собственные вектора смещений определялись только при комнатной температуре (т.е. на 300K ниже T_d). С целью прояснения этого вопроса нами были проведены измерения вблизи ряда узлов обратной решетки в широком интервале температур как выше, так и ниже T_d . Было показано, что существующее выше T_d диффузное рассеяние имеет выраженную анизотропию (ранее не наблюдавшуюся), проявляющуюся только в окрестности узлов низкой симметрии. Для центрального пика ниже T_d было показано, что

уже в непосредственной близости к температуре Бёрнса его собственные вектора представляют линейную суперпозицию «оптической» и «акустической» компонент и не могут быть объяснены простым ТА-ТО взаимодействием. Полученная картина укладывается в предложенную нами ранее модель формирования локальных статических кластеров тетрагональной фазы в химически упорядоченных областях.

2. Изучить процесс формирования нанодоменов в соединениях демонстрирующих смешанное сегнетостекольное состояние путем проведения совместных нейтронно-синхротронных исследований

Нами были проведены комплексные исследования процессов формирования полярных нанообластей и нанодоменов в релаксорах. Нейтронные измерения с высоким разрешением позволили установить динамические характеристики этих нанообластей и показать, что они являются практически статическими. Впервые удалось провести исследование пространственных характеристик нанообластей используя когерентное рассеяние СИ. Были получены Speckl картины в широком интервале температур. Было показано, что уже выше температуры замерзания в релаксорах формируется регулярная система нанообластей с характерным расстоянием между ними. В окрестности температуры замерзания эта регулярная система размывается за счет критических флуктуаций. При дальнейшем охлаждении в твердых растворах релаксор – нормальный сегнетоэлектрик критические флуктуации ослабевают и возникает регулярная длиннопериодическая модуляция решетки, связанная с формированием нанодоменов.

3. Исследовать структуру и диэлектрический отклик мультиферроиков $Tb_{(1-x)}Bi_xMnO_3$ с $x=0.05$ и твердых растворов $(PbFe_{2/3}W_{1/3}O_3)_{(1-x)} - (PbTiO_3)_x$ с $x=0, 0.2$ и 0.3 выше и ниже температур наблюдаемых в этих материалах фазовых переходов.

Начаты нейтронно-дифракционные исследования мультиферроиков $Tb_{(1-x)}Bi_xMnO_3$ с $x=0.05$ и $(PbFe_{2/3}W_{1/3}O_3)_{(1-x)} - (PbTiO_3)_x$ с $x=0, 0.2$. Для $Tb_{0.95}Bi_{0.05}MnO_3$ получена температурная зависимость антиферромагнитного параметра порядка. Совместные нейтронно-синхротронные эксперименты будут завершены в декабре 2007 (выделено время на реакторе HMI и на источнике СИ BESSY)/

4. Изучить температурную эволюцию мезоскопической структуры наноконкомпозитов на основе нитрита натрия путем изучения малоуглового рассеяния нейтронов и синхротронного излучения

Проведены измерения наноконкомпозита нитрита натрия в пористом стекле методом МУРН. Проведен предварительный анализ. Показано, что наибольшее превышение интенсивности рассеяния на наноконкомпозите над рассеянием на чистом пористом стекле наблюдается в области характерных расстояний порядка 40nm, что хорошо согласуется с дифракционными данными. Было также обнаружено, что при малых волновых векторах возникает область, в которой выполняется закон Гинье, отсутствующая в чистом пористом стекле. В области больших Q нам не удалось разделить вклады от нитрита натрия и чистого стекла. Нами было показано, что при переходе в парафазу и формировании предплавительного состояния происходит резкое ослабление малоуглового рассеяния. Механизм этого процесса мы пока объяснить не можем.

5. Нейтрон-дифракционные исследования пленок MnF_2 разной толщины с целью изучения размерных эффектов.

На четырехкружном дифрактометре 6T2 исследовательского реактора Орфей (Сакле) проведены нейтрон-дифракционные измерения пленок MnF_2 разной толщины. Основная цель исследований - поиск зависимости направления магнитного момента по отношению к поверхности пленки для пленок разной толщины. Оказалось, что даже при толщине пленки 100 nm момент лежит в ее плоскости. Проводится полное уточнение магнитной структуры с

построением карт спиновой плотности при помощи Кембрижской библиотеки и программы Fullprof (в моде монокристалльного набора данных).

На спектрометре IN14 Института Лауэ-Ланжевена проведены измерения неупругого и квазиупругого рассеяния на пленке MnF_2 . Квазиупругое рассеяние оказалось очень слабым на фоне мощного некогерентного рассеяния, обусловленного структурным несовершенством пленки. Однако удалось зарегистрировать магноны. Были измерены магноны при $Q = 0$ и $Q = 0.2$ (в единицах обратной решетки). Определена анизотропия антиферромагнитной щели в спектре магнитных возбуждений.

Проект 4.9

Теоретическое изучение проблем, возникающих при исследовании конденсированных сред методом нейтронного рассеяния и возможностей постановки новых экспериментов

Руководители проекта:
проф.С.В. Малеев,
к.ф.-м.н. А.В. Сыромятников

- 1. Изучение квантовых фазовых переходов в кубических нецентросимметричных магнетиках в магнитном поле и под давлением. Специальное рассмотрение влияния магнитострикции.**
- 2. Теоретическое изучение малоуглового нейтронного и синхротронного рассеяний на структурах, содержащих пространственно упорядоченные нанобъекты.**

1. Изучены свойства магнетиков с главным ферромагнитным взаимодействием, которые вблизи от квантовых критических точек (ККТ) в магнитном поле эквивалентны разреженному газу Бозе-частиц. Магнетики данного класса являются хорошими кандидатами для изучения Бозе-конденсации магнонов, поскольку они имеют малое критическое поле. Обнаружено, что (в отличие от магнетиков с главным антиферромагнитным взаимодействием) взаимодействие магнонов вблизи от ККТ мало. Это позволило найти кроссовер в зависимости критической температуры от поля в квази-двумерных и квази-одномерных магнетиках из рассмотренного класса. [1] (см. список работ, приведенный ниже).

2. Рассмотрен нефрустрированный магнетоэлектрик, в котором достаточно сильное магнетоэлектрическое взаимодействие приводит к возникновению несоразмерной магнитной структуры и сегнетоэлектрического перехода. Рассмотрены свойства такого магнетоэлектрика в магнитном поле. Опубликовано в работе [2]

3. Показано, что в упорядоченных магнетиках магнитное поле нарушающее симметрию магнитной структуры (наклонное поле в антиферромагнетиках, поле перпендикулярное оси спирали в спиральных структурах) приводит к Бозе-конденсации магнонов с импульсами равными нулю и волновому вектору структуры. В результате возникает квантовый вклад в восприимчивость, искажение структуры и квантовые переходы в ней. Теория иллюстрируется результатами экспериментов в Pr_2CuO_4 и MnSi . Опубликовано в работе [3]

4. В работе [4] рассматриваются общие свойства кирального рассеяния поляризованных нейтронов в магнетиках, приводится краткий обзор основных экспериментальных результатов, и обсуждаются возможности новых экспериментов.

5. В работе [5] исследовано критическое рассеяние поляризованных нейтронов в MnSi выше и ниже T_c . Показано, что так называемая А-фаза, появляющаяся ниже T_c , в действительности характеризуется поворотом вектора магнитной спирали перпендикулярно полю, а не возникновением магнитного беспорядка, как это предполагалось ранее.

6. В работе [6] методом рассеяния поляризованных нейтронов исследовалась серия образцов сплавов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с различным содержанием Co. Из измеренной величины

критического поля перехода в ферромагнитное состояние и величины периода магнитной спирали была определена зависимость спиновой жесткости от x .

7. В работах [7,8], в частности, развита теория рассеяния тепловых поляризованных нейтронов на упорядоченной системе пор, представляющих собой длинные цилиндры с диаметром порядка нескольких десятков нанометров. В работе [7] рассмотрены пустые поры, а в работе [8] предполагается, что поры заполнены магнитным веществом.

Список статей по результатам выполнения проекта:

1. A.V. Syromyatnikov, "Bose-Einstein condensation of magnons in magnets with predominant ferromagnetic interaction", Phys. Rev. B **75**, 134421-1 – 134421-7 (2007);
2. A.V. Syromyatnikov, "Nonfrustrated magnetoelectric with incommensurate magnetic order in magnetic field", ЖЭТФ **132** (3), 666-672 (2007);
3. S.V.Maleyev, V.P.Plakhty, S.V.Grigoriev, A.I.Okorokov and A.V. Syromyatnikov, "Magnon Bose condensation in a symmetry breaking magnetic field", J. Phys.: Condens. Matter **19**, 145208-1 – 145208-6 (2007);
4. S.V.Maleyev, "Chiral scattering in complex magnets", Physica B **397** (1-2), 11-14 (2007);
5. S.V.Maleyev, S.V.Grigoriev, "Partially disordered state near ferromagnetic transition in MnSi", Phys. Rev. B in print, cond/mat 0704.0683;
6. S.V.Grigoriev, S.V.Maleyev, A.I.Okorokov, Yu.O.Chetverikov, V.A. Dyadkin, D. Menzel, J. Schoenes, H.Eckerslebe, "The magnetic structure of $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ in the magnetic field: Polarized SANS study", Phys. Rev. B in print,
7. С.В.Григорьев, Н.А.Григорьева, А.В. Сыромятников, К.С.Напольский, А.А.Елисеев, А.В.Лукашин, Ю.Д.Третьяков, Х.Эккерлебе, «Двумерные пространственно-упорядоченные системы Al_2O_3 : исследование методом малоуглового рассеяния нейтронов», Письма в ЖЭТФ **85** (9), 549-554 (2007);
8. С.В.Григорьев, Н.А.Григорьева, А.В. Сыромятников, К.С.Напольский, А.А.Елисеев, А.В.Лукашин, Ю.Д.Третьяков, Х.Эккерлебе, «Пространственно-упорядоченные системы магнитных нанонитей: исследование методом рассеяния поляризованных нейтронов», Письма в ЖЭТФ **85** (12), 738-743 (2007);

Проект 4.10.

Влияние атомно-кристаллической и электронной структуры на свойства конденсированных сред (П-28)

Синтез, разделение, глубокая очистка и исследование свойств металлофуллеренов.

Исследование зависимости свойств наноразмерных кластеров металлов и сплавов от состава, морфологии, структуры и обработки

Руководители проекта:

к.х.н. Ю.С.Грушко,

к.х.н. В.С. Козлов,

к.ф.-м.н. В.А. Шилин

1. Изучение влияния изотопных и валентных эффектов на выход радиометаллофуллеренов при n,γ -реакции.

- Синтезированы «редкие» эндоэдрические металлофуллерены европия и тулия.
- Выделены фракции, обогащенные металлофуллеренами $\text{Ln}@\text{C}_{82}$, и изомеры металлофуллеренов тулия. $\text{Tm}@\text{C}_{82}$ (изомеры I и III) и $\text{Tm}@\text{C}_{84}$ (изомер I).
- Проведена активация тепловыми нейтронами полученных образцов и радиохимическое разделение «выживших» металлофуллеренов и образовавшихся продуктов деструкции. Определены величины удерживания в реакции Сциларда-Чалмерса для превращений $^{151}\text{Eu} (n,\gamma) ^{152}\text{Eu}$, $^{153}\text{Eu} (n,\gamma) ^{154}\text{Eu}$ и $^{159}\text{Tm} (n,\gamma) ^{160}\text{Tm}$.

- Показано, что различие в схемах распада захватных состояний и, соответственно, в спектрах мгновенных γ -квантов изотопов ^{152}Eu и ^{154}Eu не оказывает заметного влияния на величину удерживания в реакциях активации природных изотопов европия. Таким образом, **изотопический эффект в этих реакциях не наблюдается.**
 - Напротив, при нейтронной активации изомеров I и III $\text{Tm}@C_{82}$ наблюдается значительное влияние различий в структуре и электронном строении углеродного кэйджа на величину удерживания. Величина удерживания для изомера I почти в 4 раза больше, чем для изомера III.
 - Полученные нами результаты [1] подтверждают высказанное нами ранее предположение о важности быстрых электронных процессов типа shake-off в распадах возбужденных молекул металлофуллеренов. Результаты также согласуются с опубликованными недавно работами, показывающими, что в случаях, когда первичное возбуждение молекулы металлофуллерена локализовано на эндоэдрическом атоме, преобладающими модами распада молекулы являются фемтосекундные нерадиационные межатомные процессы.
- [1] Yu.S. Grushko, M.A. Khodorkovski, S.G. Kolesnik, V.S. Kozlov, V.A. Shilin, S.A. Grachov, T.O. Artamonova, and L.P. Rakcheeva, "Isomeric and Isotopic effects on survival of Tm- and Eu-metallofullerenes at neutron activation." 8th Biennial International Workshop "Fullerenes and Atomic Clusters", July 2-6, 2007, StPetersburg, Russia, Book of Abstracts p.38, Oral contributions.

2. Изучение свойств нанокompозитных катализаторов в системе платина / углерод в зависимости от элементного состава, распределения частиц по размерам и их фазового состава.

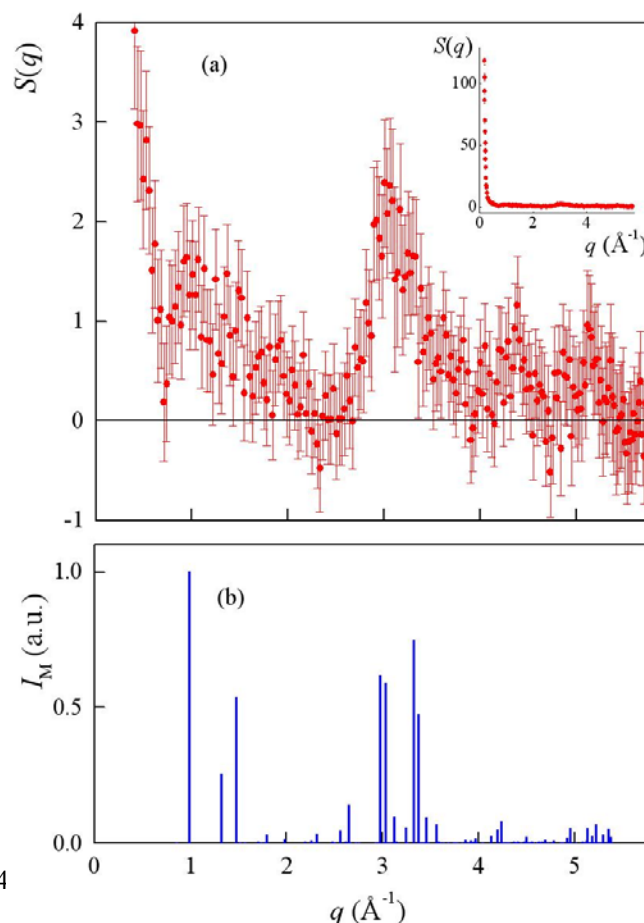
- Электродуговым методом получен катализатор наноразмерных частиц платины (5% родия) в матрице углерода.
- Малоугловым рассеянием нейтронов изучено распределение по размерам частиц катализатора.
- Термогравиметрически изучена температурная зависимость скорости окисления углеродной матрицы и процесса удаления графеновых оболочек с поверхности металлических частиц.

4.11. Исследование радиационно-разупорядоченных соединений с сильными корреляциями

Руководитель проекта:
проф. Ю.Н. Скрябин (ИФМ УрОРАН)

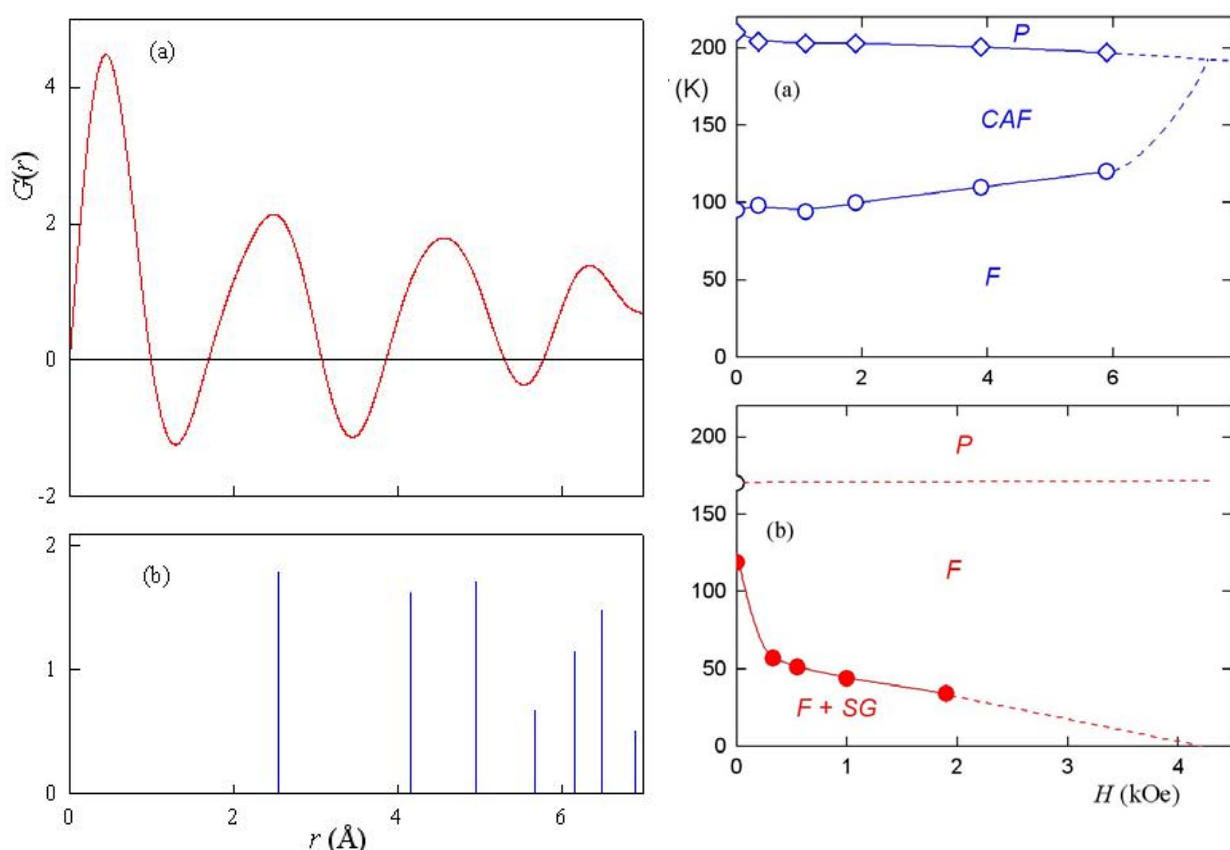
1. Исследование структурных и магнитных превращений в интерметаллидах $R_2\text{Me}_{17}$ ($R - \text{Ce}, \text{Y}; \text{Me} - \text{Fe}, \text{Ni}$) после нейтронного облучения и последующего отжига

Было предпринято сопоставительное исследование магнитного состояния кристаллического и аморфного (полученного путем облучения быстрыми нейтронами) $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ методами дифракции нейтронов и магнитными методами.



Установлено, что аморфный $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ является ферромагнетиком с температурой Кюри 170 К. Вместе с тем исследования показали, что аморфизация приводит к понижению магнитного момента на атом железа с $1.7 \mu_B$ до $1.5 \mu_B$ и появлению в области низких температур в слабых магнитных полях аномалий намагниченности, характерных для т.н. "<возвратного>" перехода в состояние спинового стекла. Из картин нейтронной дифракции (слева на рисунке), измеренных при различных температурах, разностным методом получен магнитный структурный фактор аморфного $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ (а) и интенсивности магнитного рассеяния кристаллического $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ (б). На вставке – магнитный структурный фактор аморфного $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ в мелком масштабе.

Его характерная особенность — интенсивное малоугловое рассеяние магнитного происхождения, свидетельствующее о возникновении в аморфном состоянии магнитных неоднородностей нанометрового масштаба. Методами Фурье-техники из экспериментальных данных восстановлена спиновая корреляционная функция (в центре рисунка), характеризующая пространственное распределение нескомпенсированной спиновой плотности в аморфном $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ (а), и ее аналог для кристаллического $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ (б). Анализ показывает, что локальная магнитная структура аморфного интерметаллида в общих чертах похожа на ферромагнитную структуру кристаллического $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$. На основе экспериментальных данных построены фазовые ($H-T$) диаграммы магнитного состояния кристаллического и аморфного $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ (справа на рисунке).



Видно, что магнитное поле вызывает метамгнитный переход антиферромагнетик $\rightarrow$ ферромагнетик для кристаллического состояния и спиновое стекло $\rightarrow$ ферромагнетик для аморфного.

Резюмируя совокупность экспериментальных данных, можно утверждать, что конкуренция ферро- и антиферромагнитных связей в структурно разупорядоченном состоянии приводит к появлению локальных спиновых отклонений.

Результаты исследования опубликованы в виде доклада [1].

1. А. Е. Теплых, Ю. Г. Чукалкин, А. Г. Кучин. “Магнетизм интерметаллида $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ в кристаллическом и аморфном состояниях”. VI Национальная конференция РСНЭ-2007, Москва, ноябрь 2007.

2. Изохронные температурные отжиги облученных быстрыми нейтронами соединений R_2Fe_{17}

В настоящее время наиболее перспективными в качестве постоянных магнитов считаются интерметаллические соединения $\text{Re}_2\text{Fe}_{17}$, в которых содержится наибольшее количество железа (в расчете на Re-атом). Из-за конкурирующих антиферро- и ферромагнитных взаимодействий температура Кюри (T_c) у них низкая. Для выяснения природы этого взаимодействия и пути возможного повышения T_c необходим экспериментальный поиск закономерностей изменения магнитного состояния. Цель работы — поиск структурных критериев, ответственных за формирование магнитного состояния интерметаллических соединений. Чаще всего для этого используют введение в решетку дефектов атомного масштаба (легирование подрешетки железа другими элементами, внедрение в междоузлия легких атомов и т.п.). Но при этом меняется стехиометрия образца и трактовка результатов довольно неоднозначна. Для устранения подобных неопределенности необходимы методы изменения магнитного состояния без изменения состава образца. Таких методов два: внешнее давление и облучение быстрыми нейтронами.

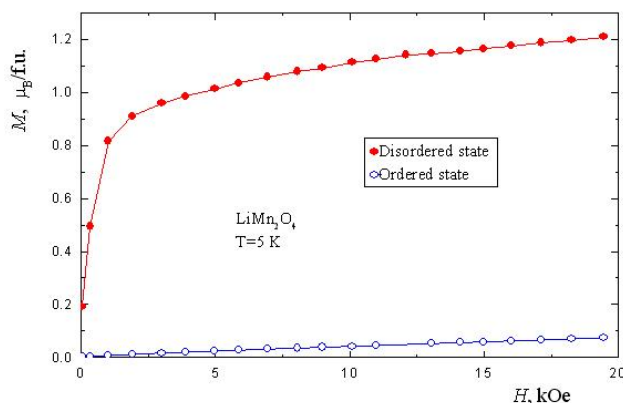
Показано, что после облучения образцов Y_2Fe_{17} быстрыми нейтронами температура Кюри в них увеличивается до 340 К. Это повышение объясняется расширением элементарной ячейки при облучении из-за возникновения сложного типа дефектов, перераспределения атомов железа в свободные междоузлия, обмен гантелями атомов железа и иттрия местами. В облученных образцах $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ было найдено полное подавление антиферромагнитного состояния, характерное для исходного образца, переход в ферромагнитное состояние с температурой Кюри $T_c = 320$ К. Согласно структурным исследованиям такие изменения связаны с увеличением объема при разупорядочении кристаллической решетки. Это согласуется с концепцией зависимости температуры Кюри от межатомных расстояний. Изохронные отжиги были выполнены на образце $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$, облученном быстрыми нейтронами флюенсом $1.3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$ в вакууме. При изохронных отжигах наблюдается две стадии, на первой до 400°C , температура Кюри увеличивается до $T_c = 355$ К, а на второй до 700°C наблюдается резкое падение до $T_c = 150$ К. Из нейтронографических исследований найдено, что объем элементарной ячейки уменьшается с повышением температуры отжига, причем на зависимости объем — температура наблюдается излом в области $T = 400^\circ \text{C}$. Такое поведение, в целом, согласуется с данными магнитных измерений (две стадии отжига).

Анализ полученных результатов показывает, что из наших экспериментов можно говорить об определенных корреляциях между T_c и объемом решетки, а также о корреляции между T_c и отношением c/a . Также было получено, что величина T_c проходит через максимум при определенном значении межатомного расстояния в "<гантелях>" атомов железа. Это указывает на более сложный механизм реализации магнитного состояния. Оно, во многом, определяется реальным распределением атомов железа в решетке, и в $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ при сохранении стехиометрии может меняться в значительных пределах, практически от 0 до 300 К.

3. Исследование влияния структурного разупорядочения на структурное и магнитное состояния, физические свойства перспективных катодных материалов на основе литиевых манганитов со структурой шпинели (на примере LiMn_2O_4)

Из литературы известно, что литиевый манганит со структурой нормальной шпинели $\text{Li}^+[\text{Mn}^{4+}\text{Mn}^{3+}]\text{O}_4^{2-}$ является весьма интересным физическим объектом. В окрестности комнатной температуры возникает зарядовое упорядочение ионов Mn^{4+} и Mn^{3+} по типу $(1/3, 1/3, 0)$, сопровождающееся орторомбическими искажениями кристаллической структуры. Этот структурный переход (I-рода) резко снижает количество циклов перезарядки батарей (литиевый манганит предполагается использовать в качестве катодного материала в перезаряжаемых батареях). В высококачественных образцах ниже 65 К возникает антиферромагнитное упорядочение (окончательной ясности здесь нет). Первоначальная идея заключалась в том, чтобы путем облучения перераспределить катионы лития и марганца по октаэдрическим и тетраэдрическим позициям шпинельной решетки. Предполагалось, что такое разупорядочение подавит структурный переход, обусловленный электронным упорядочением, и, возможно, приведет к ферримагнетизму.

Установлено, что физические свойства синтезированных образцов LiMn_2O_4 соответствуют литературным данным — наблюдаются электронное упорядочение и соответствующий структурный переход, дальний антиферромагнитный порядок в области низких температур. Уточнена несоизмерная антиферромагнитная структура. На основе дифракционных данных установлено, что облучение приводит к реализации следующего распределения катионов — $\text{Mn}_{0.33}\text{Li}_{0.67}[\text{Mn}_{1.67}\text{Li}_{0.33}]$, т.е. происходит частичное структурное разупорядочение. По-видимому, по тетра- и окта-узлам статистически перераспределяется только четырехвалентный марганец. Признаков зарядового упорядочения в таком структурном состоянии не обнаружено. Исследования показали, что в результате возникновения междоузельного обмена при структурном разупорядочении, LiMn_2O_4 становится неколлинеарным ферримагнетиком с температурой Кюри ~ 80 К. Отклонения от



коллинеарной магнитной структуры носят характер локальных спиновых отклонений (кантинг). Рисунок демонстрирует появление спонтанного магнитного момента при разупорядочении.

Рис 1. Изотермы намагничивания образцов LiMn_2O_4 в структурно упорядоченном и разупорядоченном состояниях.

По результатам исследований готовится статья (Ю. Г. Чукалкин, А. Е. Теплых, Д. Г. Келлерман, А. Н. Пирогов, “Эффекты

структурного разупорядочения в манганите LiMn_2O_4 ”).

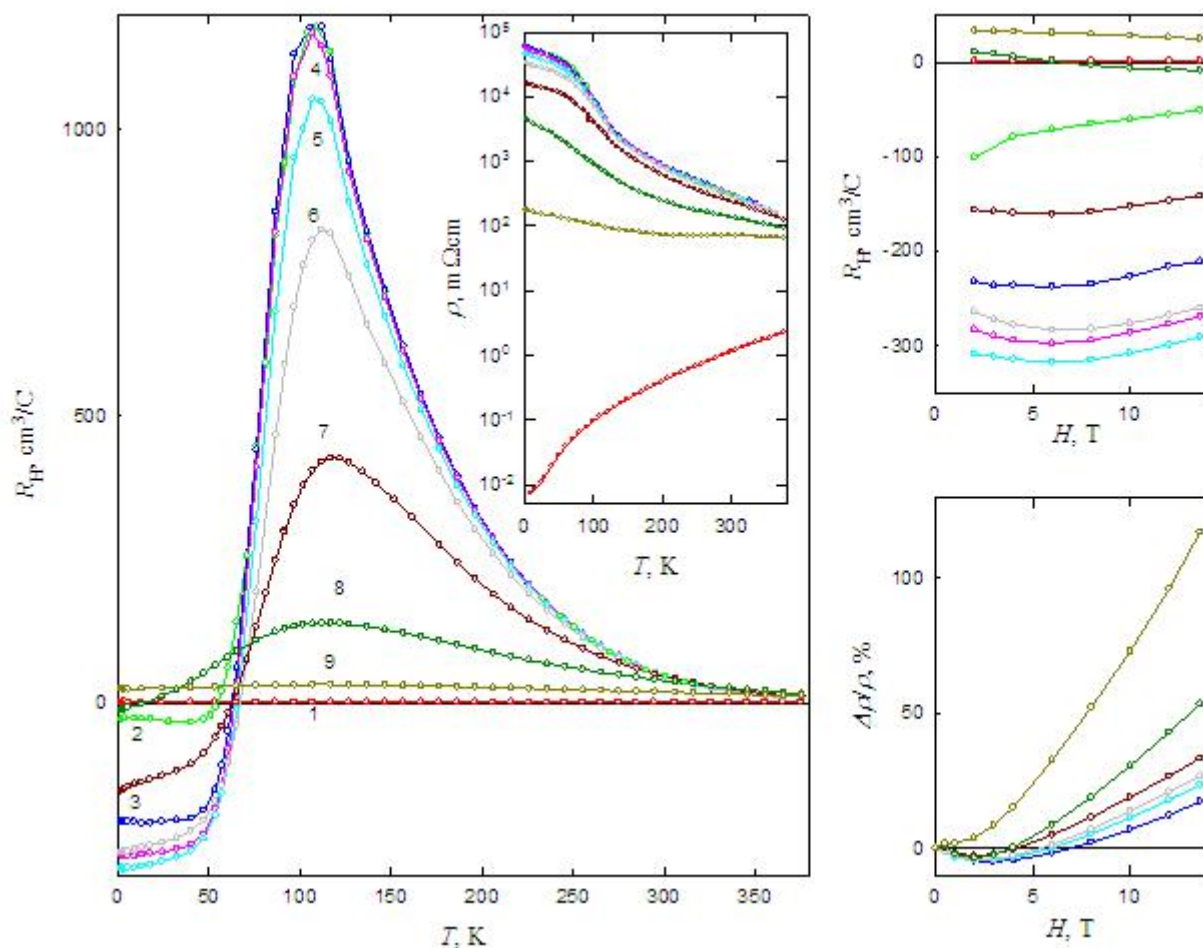
4. Исследование гальваномагнитных свойств тройных кристаллов PbSnSe ($x = 0 - 0.125$) при облучении быстрыми нейтронами (при $T = 330$ К) и последующих изохронных отжигах

Замещение свинца оловом в узко щелевых полупроводниках PbSnSe приводит к сужению запрещенной щели и является приборным эффектом. Инфракрасные датчики на основе селенида свинца считаются радиационно-стойкими из-за высокой плотности состояний, стабилизирующих уровень Ферми.

Исследовано влияние радиационных дефектов, образованных облучением быстрыми нейтронами и последующими изохронными отжигами, на свойства серии сплавов Pb-Sn-Se с

целью выявления общих закономерностей изменения свойств при замещении. Облучение и отжижки позволяют обратимо сдвигать уровень химпотенциала в кристаллах, что используется, как для изучения электронной структуры, так и для модифицирования облучением электрофизических свойств материалов для электронных устройств.

Исследованы температурные зависимости эффекта Холла R_H , удельного сопротивления ρ и магнетосопротивления $\Delta\rho/\rho$ кристаллов $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ($0 \leq x \leq 0.125$), облученных флюенсом $\phi = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$ быстрых нейтронов в интервале температур 2–350 К в магнитных полях до 14 Т.



На рисунке представлены R_H , ρ и $\Delta\rho/\rho$ как функции T и H для исходного (1), облученного (2) и отожженного при 340 К (3), 350 К (4), 360 К (5), 370 К (6), 380 К (7), 390 К (8), 400 К (9) образца PbSe.

В бинарном соединении PbSe обнаружен переход металл-полупроводник при облучении, и обратный переход при температурах отжига 340–400 К, и изменение типа проводимости (электронный вместо дырочного). В монокристаллах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ с $x=0.06-0.125$, в которых введение олова приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны, после облучения такой же дозой сохраняется металлический тип проводимости, но меняются величина и характер температурной зависимости константы Холла. Данные описаны в рамках двух зонной модели полупроводника, определены параметры носителей заряда на всех стадиях облучения и отжигов.

5. Структурные и магнитные исследования интерметаллида $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ при радиационном разупорядочении

Путем воздействия быстрых нейтронов представляется возможным дозированно вводить в массивный кристалл двумерного манганита $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ так называемые

антиузельные дефекты, т. е. частично разупорядочивать исходное распределение катионов в этих оксидах. Детальный анализ атомной и магнитной структуры такого радиационно-модифицированного манганита позволяет более корректно обозначить физические причины, формирующие магнитное состояние и транспортные свойства соединений данного класса. Обычно фазовые переходы металл-изолятор в точке Кюри манганитов трактуются в рамках модели двойного обмена (DE). Действительно, при легировании антиферромагнитного (AF) манганита ионами двухвалентного стронция, которые замещают трехвалентные атомы лантана, в наполовину заполненной e_g зоне марганца возникают дырки (другими словами, ионы Mn^{4+}). Поскольку энергия дырок минимальна при FM упорядочении локальных спинов ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} , при определенной концентрации дырок ферромагнитное состояние становится основным, а диэлектрический характер проводимости парамагнитной фазы при понижении температуры ниже точки Кюри меняется на металлический. Эта модель DE широко применяется в настоящее время при трактовке магнитных и транспортных характеристик наиболее распространенных трехмерных манганитов, в которых ферро- и антиферромагнитные корреляции хорошо наблюдаются в нейтронографических экспериментах. Сложнее дело обстоит в слоистых двумерных манганитах. Известно, что магнитная структура соединений этого класса формируется конкуренцией FM и AF взаимодействий. Существенно то, что антиферромагнитный косвенный обмен имеет место в этих материалах только между двумя ближайшими слоями марганца. По нашему мнению, антиузельные дефекты, возникающие в кристалле в результате воздействия быстрых нейтронов, должны изменить соотношение между DE- и AF-косвенным обменом в двойных слоях, а значит, должны модифицировать магнитную структуру и транспортные свойства двумерного манганита. Представляется интересным проверить сформулированные здесь физические гипотезы.

В широком температурном интервале исследовалась магнитная структура и транспортные свойства частично разупорядоченных кристаллов двумерных манганитов $La_{2-2x}Sr_{1+2x}Mn_2O_7$ ($x = 0.3, 0.4$). Атомно-разупорядоченное состояние в кристаллах достигалось путем воздействия быстрых нейтронов дозой $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$. В этом случае концентрация дефектов замещения в среднем по кристаллу составляет $\approx 4\%$.

Установлено, что дефекты замещения являются причиной перехода манганита данного класса из состояния ферромагнитного металла в состояние изолятора со структурой спинового стекла. Полученные результаты обсуждаются в рамках соотношения кинетической энергии носителей заряда и обменной энергии локализованных спинов.

1. С. Ф. Дубинин, В. Е. Архипов, Ю. Г. Чукалкин, С. Г. Теплоухов, В. Д. Пархоменко, Я. М. Муковский. "Магнитная структура и транспортные свойства атомно-разупорядоченного кристалла двумерного манганита $La_{2-2x}Sr_{1+2x}Mn_2O_7$ ". ФТТ, 2007, т. 49, в. 2, с. 297-303.

4.12. Нейтронные исследования структур и особенностей фазовых переходов систем с сильными спиновыми корреляциями

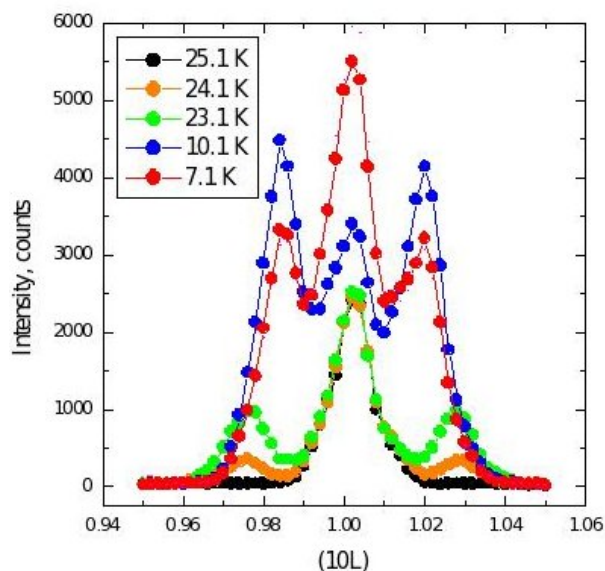
Руководитель проекта: проф. Ю.Н. Скрябин (ИФМ УрОРАН)

1. Исследование кирального рассеяния поляризованных нейтронов при переходе из несоизмеримой фазы в "<look in"> магнитную структуру в монокристалле $TbNi_5$

В $TbNi_5$ наблюдается магнитный фазовый переход типа несоизмеримая магнитная структура — магнитная структура с замерзшим волновым вектором ("<look-in"> структура). Имеющиеся экспериментальные данные не позволяют сделать вывод о причинах перехода. Наш эксперимент с поляризованными нейтронами был ориентирован на выяснение этих причин.

Образец сферической формы — монокристалл TbNi_5 — был выращен в Институте физики металлов УрО РАН. Аттестация образца и установление его кристаллографических осей были проведены рентгено- и нейтронографическим методами. Установлено, что монокристалл имеет гексагональную структуру типа CaCu_5 .

Измерения на поляризованных нейтронах были выполнены на спектрометре E-1 (Hahn-Meitner-Institut, Berlin, Germany). Установлены температурные и полевые зависимости



возрастает.

поляризации нейтронов в интервале температур $1.8 \div 35$ К и полей $0 \div 50$ кЭ.

Обнаружено [1], что температурная зависимость поляризации нейтронов имеет две аномалии. Одна из них наблюдается в точке перехода порядок-беспорядок (23 К), другая — при переходе из несоизмеримой магнитной структуры в "<look-in"> структуру (см. рисунок).

Из рисунка видно, что при $T \geq 25$ К существует только ядерный рефлекс (101). При $T < 25$ К появляются магнитный рефлекс и сателлиты. При охлаждении до 10 К интенсивность как сателлитов, так и рефлекса уменьшается. При дальнейшем охлаждении от 10 до 7 К интенсивность сателлитов заметно уменьшается, а интенсивность рефлекса

Обнаружена также сильная зависимость поляризации от внешнего поля.

1. E. A. Sherstobitova, A. N. Pirogov, V. Sikolenko, R. Schedler, J.-G. Park, S. G. Bogdanov, Yu. N. Skryabin. "Polarized neutron scattering on TbNi_5 single crystal". Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 101.

2. Изучение структурных и магнитных превращений в соединениях $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$

Намагниченность кобальтовой подрешетки в соединениях типа RCo_2 определяется величиной обменного поля, действующего со стороны редкоземельной подрешетки. Каково поведение кобальтовой подрешетки, в соединениях, в которых редкоземельная подрешетка сформирована из таких разноименных ионов, что их суммарная намагниченность равна нулю.

Образцы $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$ ($0 < x < 1$) синтезированы дуговым методом на водоохлаждаемой лодочке в Институте физики металлов УрО РАН. Аттестация образца была проведена рентгено- и нейтронографическим методами. Установлено, что образцы имеют кубическую структуру типа MgCu_2 .

Установлены температурные зависимости электросопротивления, определены температуры Кюри соединений. Нейтронографические измерения выполнены на дифрактометрах Д-2 и Д-3 Института физики металлов УрО РАН при 4.2 и 293 К.

Температура Кюри исследуемых соединений линейно возрастает с увеличением концентрации тербия, что указывает на усиление обменного взаимодействия. Концентрационная зависимость намагниченности редкоземельной подрешетки имеет отчетливо выраженную аномалию при $x \approx 0.3$, при этой концентрации намагниченность редкоземельных ионов равна нулю. Однако намагниченность кобальтовой подрешетки не

исчезает при этой концентрации, а сохраняет свой линейный рост при увеличении содержания тербиевых ионов.

По результатам работы подготовлена статья (E. A. Sherstobitova, K. A. Kozlov, A. E. Teplykh, Yu. A. Dorofeev, J.-G. Park, Yu. N. Skryabin, N. V. Baranov, A. N. Pirogov. "Structure and magnetic state of the $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$ compounds at 4.2 K").

3. Изучение локализации атомов водорода в структуре кубических и ромбоэдрических гидридов соединения ErFe_2

Интерметаллиды типа RFe_2 способны образовывать гидриды с высокой концентрацией водорода. Это свойство открывает широкие возможности использования гидридов типа RFe_2H_x в водородной энергетике. Однако имеющиеся экспериментальные данные пока не позволяют создать модель, описывающую механизм распределения атомов водорода по позициям решетки.

Образцы $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$, $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ были синтезированы в Институте физики металлов УрО РАН. Исходное соединение было получено дуговым методом на водоохлаждаемой лодочке. Гидрирование проведено при 200°C .

Нейтроннографические исследования $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$ и $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ проведены в интервале температур $10 \div 453\text{ K}$ на дифрактометре высокого разрешения HRPT (Paul Scherrer Institut, Villigen, Switzerland).

При 270 K обнаружен структурный переход из ромбоэдрической структуры (пространственная группа $\text{R}\bar{3}\text{m}$) в кубическую ($\text{Fd}3\text{m}$). Установлены координаты и коэффициенты заполнения атомов водорода в кубической фазе. Определены температурные зависимости намагниченностей эрбиевой и железной подрешеток. Обнаружено, что магнитный порядок в Er-подрешетке разрушается при $\approx 300\text{ K}$, тогда как в Fe-подрешетке — при 450 K [1].

1. N. V. Mushnikov, V. S. Gaviko, A. N. Pirogov, A. V. Korolyov. "Magnetic properties and structure of ErFe_2H_x hydrides". Euro-Asian Symposium "<Magnetism on a Nanoscale">, EASTMAG-2007, Kazan, August 2007.

4. Нейтроннографическое исследование структурного состояния манганитов

$\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$

Хорошо известно, что замена немагнитного лантана трехвалентными магнитными ионами редкоземельных элементов приводит к существенному изменению транспортных и магнитных свойств манганитов. В качестве объектов исследования выбраны мало изученные соединения $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.22, 0.24$).

При легировании антиферромагнитного манганита $\text{R}^{3+}\text{MnO}_3$ ионами A^{2+} , которые замещают трехвалентные атомы R, в наполовину заполненной e_g зоне марганца возникают дырки. Поскольку энергия дырок минимальна (в рамках двойного обмена) при ферромагнитном упорядочении локальных спинов ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} , при определенной концентрации дырок ферромагнитное состояние становится основным, а диэлектрический характер его проводимости в парамагнитной фазе меняется на металлический ниже точки Кюри.

Известно, что манганиты $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ в области дырочного легирования ($x = 0.22, 0.24$) являются ферромагнитными с точкой Кюри $\sim 170\text{ K}$, а поведение электропроводности позволяет отнести эти материалы к полупроводникам во всем температурном интервале. Именно эти основные свойства существенно отличаются в La–Sr-манганите с тем же самым уровнем легирования. Действительно, температура Кюри T_C соединения $\text{La}_{0.77}\text{Sr}_{0.23}\text{MnO}_3$

составляет $T_C = 350$ К, т. е. приблизительно вдвое превышает величину T_C манганита на основе Pr, а ниже T_C этот манганит является хорошим металлом. В рамках сформулированной выше модели отличие магнитных и транспортных свойств в обсуждаемых соединениях должно быть связано с ослаблением двойного обмена $Mn^{3+} \leftrightarrow O^{2-} \leftrightarrow Mn^{4+}$ при замене ионов лантана на празеодим. Таким образом, относительно слабый двойной обмен в $Pr_{1-x}Sr_xMnO_3$ способствует сохранению неметаллического характера проводимости в манганитах до концентраций стронция, очень близких к $x=1/4$. С фундаментальной точки зрения данный факт представляет большой интерес, поскольку в этом случае возникает принципиальная возможность дать ответ на вопрос относительно существования в ферромагнитных манганитах квазистатического зарядового упорядочения по типу "1/4".

В широком температурном интервале исследовалось структурное и магнитное состояние манганитов $Pr_{1-x}Sr_xMnO_3$ ($x=0.22, 0.24$). По результатам измерения магнитной восприимчивости и электросопротивления установлено [1], что исследуемые манганиты относятся к классу ферромагнитных полупроводников. Картины упругого рассеяния тепловых нейтронов свидетельствуют, что в интервале 4.2-350 К структура манганитов является орторомбической (пространственная группа $Rnma$) с хорошо развитым кооперативным эффектом Яна–Теллера. Наиболее подробно изучена ядерно-магнитная сверхструктура с волновым вектором $q=(2\pi/2a, 0, 2\pi/2c)$. Показано, что эта сверхструктура свидетельствует о существовании в данных манганитах зарядового упорядочения по типу "1/4".

5. Изучение атомной и субатомной структуры нанодисперсных углеродных наноматериалов

Слоистое строение графита и электронное строение углеродных слоев допускают спонтанное проникновение атомов и молекул некоторых веществ в межслоевые пространства с образованием интеркалированных соединений графита (ИСГ). С 70-х годов прошлого века ИСГ интенсивно изучаются во всех передовых странах, и, прежде всего, с целью создания на их основе новых функциональных углеродных материалов, реагентов с каталитическими свойствами и твердых носителей реакционно способных веществ — щелочных металлов, фторидов и хлоридов металлов, оксидов неметаллов и безводных кислот.

Однако графит обладает низкой универсальностью к внедряемому веществу. Он способен образовывать ИСГ только с объектами, обладающими донорно-акцепторными свойствами. Кроме того, стабильность ИСГ достаточно низка. Давление разложения для них сравнимо с упругостью паров интеркалированных веществ. Это обусловлено тем, что в ИСГ межслоевые пространства графита "<открыты>" как для интеркалирования, так и для деинтеркалирования.

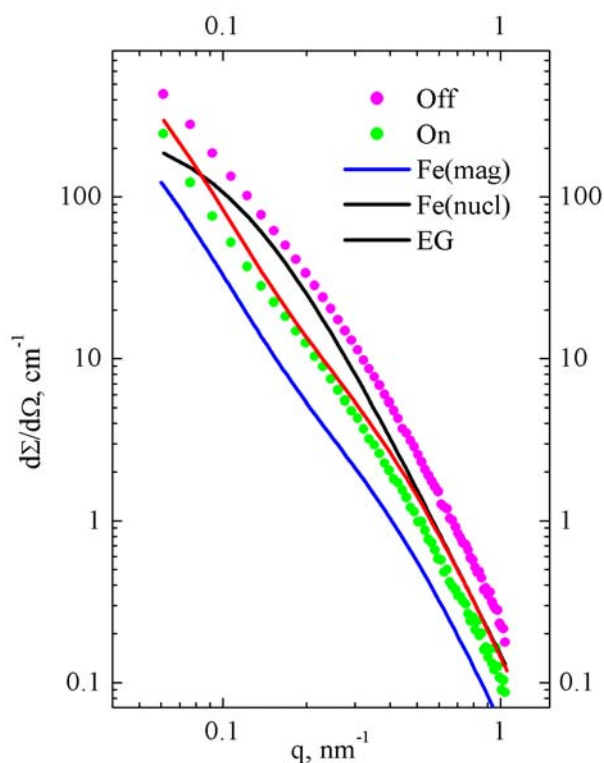
С практической точки зрения для получения новых функциональных материалов более перспективным оказалось использование интеркалированных соединений окисленного графита (ИСОГ). Их получают путем внедрения в межслоевые пространства графита атомов фтора, кислорода или аминогрупп. Тем самым удастся реализовать структуру, в которой атомы или функциональные группы оказываются химически связанными с атомами углерода графитовых слоев. Внедренные объекты выполняют роль "<перегородок>", из-за чего существенно затрудняется процесс деинтеркалирования. Благодаря этому ИСОГ могут использоваться в качестве молекулярных химических контейнеров для хранения, транспортировки и дозированного выделения в окружающую среду летучих веществ; реагентов, функционирующих в качестве детоксикантов и сорбентов в экологических технологиях; исходных продуктов для получения расширенного графита (РГ) —

эффективного химически и термически устойчивого сорбента низкой плотности с графитовой структурой.

Целью настоящей работы является исследование наноструктурного композитного материала РГ/Fe. Выбранный объект рассматривается как модельный для описания атомной и субатомной структуры нанокompозитов на основе расширенного графита. Синтез образцов проводили в несколько этапов. Исходным материалом являлось интеркалированное соединение фторированного графита (матрица — фторид диуглерода C_2F , интеркалат — трифторид хлора ClF_3). Из него методом быстрого термораспада получали расширенный графит, который пропитывали водным раствором хлорида железа. Полученный раствор нагревали до температуры $100-120^\circ C$, высушивали и восстанавливали водородом при температуре $600^\circ C$. Получено четыре образца с разным содержанием железа: 0,5–1,25–35,40–50,65–75 масс. %.

Атомная и субатомная структура композитов исследовались методами рентгеновской и нейтронной дифракции и малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов. На дифрактограммах образцов наблюдаются линии графита и железа. Структура графита является гексагональной и описывается в рамках пространственной группы $P6_3/mmc$. Структурные рефлексы уширены, а параметр c увеличен по сравнению с природным графитом и составляет $c = 0,685-0,690$ нм. Линии металлической компоненты наблюдаются на всех образцах, кроме первого с минимальной концентрацией железа, и принадлежат α -фазе железа.

Субструктура композитов определена по данным малоуглового рассеяния нейтронов. Поляризация нейтронного пучка уменьшалась с ростом концентрации железа в образцах и почти не изменялась во внешнем магнитном поле до 8 кЭ. Разделение ядерного и магнитного вкладов в сечения рассеяния проводили аналитически по формулам, полученным в рамках настоящей работы. Получено, что размеры частиц железа описываются двумя характерными размерами: 5–7 нм и 35–50 нм, а наночастицы графита имеют размер 8–15 нм. В образце



с максимальным содержанием железа детектируются частицы графита размером порядка 80 нм. Предположительно они являются аморфными, о чем можно судить по уширенным линиям на дифрактограммах этого образца. На рисунке представлена картина малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на композитном материале расширенный графит-железо с номинальным содержанием 45 масс. % железа [1,2].

Исходными являются экспериментальные зависимости, полученные с включенным (верхние точки) и выключенным флиппером (нижние точки). Поскольку частицы железа частично деполяризуют пучок ($P/P_0 = 0,676$), то ядерный и магнитный вклады в экспериментальных сечениях оказываются перемешаны. Их разделение выполнено аналитически с учетом величины поляризации. Сечения магнитного рассеяния на частицах железа и ядерного рассеяния на железе и графите показаны линиями. Из них получены размеры и

объемная концентрация наночастиц железа (50 нм, 0,2% и 6 нм, 0,3%) и графита (15 нм, 0,8%).

1. А. П. Вохмянин, А. Е. Теплых, С. Г. Богданов, Ю. А. Дорофеев, А. Н. Пирогов, В. А. Казанцев, Ю. Н. Скрябин, В. Г. Макотченко, А. С. Назаров, В. Е. Федоров. “Структурное состояние композитов на основе расширенного графита”, Международная научная конференция “<Актуальные проблемы физики твердого тела (ФТТ-2007)>”, Минск, 23-26 октября 2007.
2. С. Г. Богданов, Э. З. Валиев, А. Н. Пирогов, Ю. Н. Скрябин, А. Е. Теплых, А. С. Назаров, В. Г. Макотченко, В. Е. Федоров. “Малоугловое рассеяние нейтронов композитами расширенный графит – железо”, VI Национальная конференция РСНЭ-2007, Москва, ноябрь 2007.

6. Изучение кристаллической структуры и фазовых переходов Me_3PO_4 (Me = K, Rb, Cs) в высокотемпературной области

Электрохимический способ преобразования энергии имеет ряд преимуществ перед традиционными методами переработки природных топливных ресурсов, использующихся в “<большой>” энергетике. Однако электрохимические процессы наиболее эффективны при высоких температурах (400–1000°С), что создает определенные трудности при выборе подходящих, совместимых друг с другом материалов. Это и является сдерживающим фактором быстрого развития электрохимической энергетики. Поэтому остается актуальной задача направленного воздействия на свойства твердых электролитов с целью повышения их проводимости и энергоемкости, понижения рабочей температуры и агрессивности по отношению к окружающей среде. Для успешного решения этой задачи необходимо понимание природы и механизма возникновения суперионного состояния (СИС), которое пока до конца не достигнуто и является одним из важнейших вопросов физики и химии твердых электролитов. К перспективным твердым электролитам относятся суперионики Me_3PO_4 (M = K, Rb, Cs). До сих пор их низкотемпературная структура была не известна.

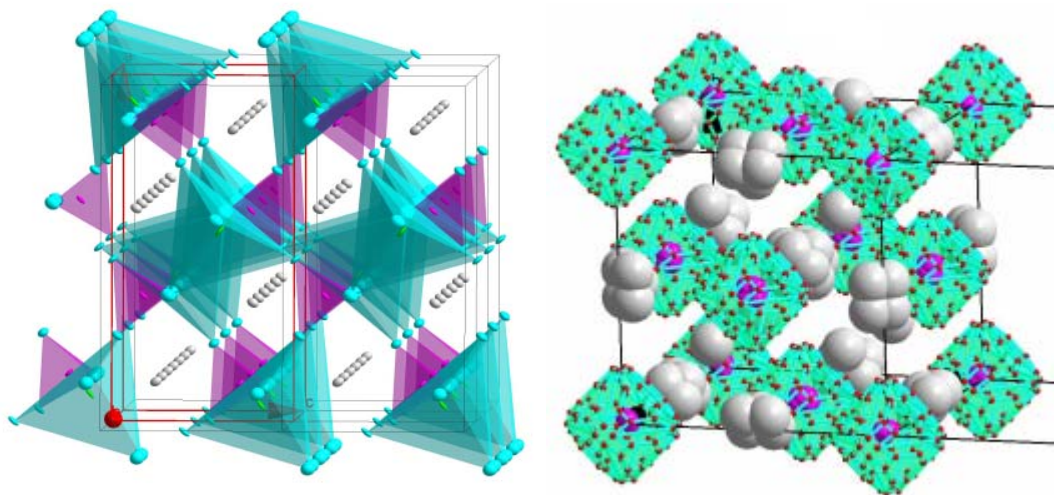
Структурные исследования проводились методом дифракции нейтронов. Вид нейтронограмм аналогичен нейтронограммам для K_3PO_4 , кристаллическая структура низкотемпературной фазы которого была ранее установлена [1]. Это позволило считать их изоструктурными соединениями. Поэтому для уточнения структурных параметров исследуемых соединений использована модель кристаллической решетки K_3PO_4 . Также была определена кристаллическая структура низкотемпературных модификаций твердых электролитов Rb_3PO_4 и Cs_3PO_4 .

В итоге, решетка является слоисто-блочной. Блоки образованы из октаэдров $[\text{MeO}_6]$ (Me = Rb, Cs) и тетраэдров $[\text{PO}_4]$. В межблочном пространстве располагаются слои, сформированные из цепочек щелочных металлов. Проводимость низкотемпературных модификаций Me_3PO_4 при комнатной температуре главным образом обусловлена наличием одномерных непрерывных цепочек из атомов Me вдоль направления [001]. Величина проводимости увеличивается, а энергия активации уменьшается с ростом размера иона щелочного металла, что связано с ослаблением силы связи катион-кислород. Эти результаты направлены в печать [2].

Проведены также высокотемпературные нейтронографические исследования данных супериоников [3,4]. При повышении температуры наблюдается резко анизотропное расширение элементарной ячейки. При достижении температуры перехода в суперионное состояние происходит структурный переход в кубическую решетку, но с неожиданным скачкообразным уменьшением объема. При этом наблюдается возникновение дополнительного диффузного рассеяния, а также возрастание теплового множителя для щелочных металлов до величин порядка $B \sim 8 \text{ \AA}^{-2}$.

Эти процессы, скорее всего, свидетельствуют о “<плавлении>” подрешетки щелочных металлов. Наряду с трехмерным упорядочением каналов проводимости при фазовом

переходе в кубическую структуру эти процессы способствуют высокой проводимости по катионам ортофосфатов щелочных металлов в суперионном состоянии. Полученные зависимости структурных параметров хорошо согласуются с данными по проводимости, согласно которым проводимость увеличивается с ростом температуры и испытывает скачок при температурах, при которых наблюдается переход в высокотемпературную кубическую модификацию.



На рисунке показана структура низкотемпературной фазы (слева) и высокотемпературной фазы (справа).

2. В. И. Воронин, С. Ю. Поносов, И. Ф. Бергер, Н. В. Проскурнина, В. Г. Зубков, А. П. Тютюник, С. Н. Бушмелева, А. М. Балагуров, Д. В. Шептяков, Е. И. Бурмакин, Г. Ш. Шехтман, Э. Г. Вовкотруб. “Кристаллическая структура низкотемпературной модификации ортофосфата калия K_3PO_4 ”, Неорганические материалы, 2006. Т.42. No 8. с. 1001-1006.

3. В. И. Воронин, И. Ф. Бергер, Н. В. Проскурнина, Д. В. Шептяков, Б. Н. Гощицкий, Е. И. Бурмакин, С. С. Строев, Г. Ш. Шехтман, “Кристаллическая структура низкотемпературной модификации ортофосфатов цезия и рубидия”, Неорганические материалы (в печати).

4. В. И. Воронин. “Нейтронные исследования особенностей кристаллической структуры супериоников Me_3PO_4 ($Me=K, Rb, Cs$) в широком температурном интервале”, 4-й Международный симпозиум “<Химия и химическое образование>”, 16-19 мая 2007, Владивосток, с.60.

5. N. V. Proskurnina, V. I. Voronin, I. F. Berger, D. V. Sheptyakov, E. I. Burmakin, G. S. Shekhtman. “Alkali element sublattice “<melting”> – mechanism of occurrence of superionic condition in Me_3PO_4 ($Me=K, Rb, Cs$)”. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 185.

Подпроект 4.13.

Изучение стохастических связей и спектров тепловых флуктуаций

Руководители проекта:
к.ф.-м.н. М.А.Пустовойт,
д.ф.-м.н. С.Л.Гинзбург,
к.ф.-м.н. Б.И.Якубович

1. Изучить статистические свойства всплесков активности в модели безмасштабной сети возбудимых элементов со стохастическими связями.

Изучено поведение простейшей бинарной модели возбудимого элемента при соединении таких элементов в безмасштабную сеть. При передаче активности между

связанными элементами осуществлялась стохастическая блокировка связи. Такая система при слабом внешнем воздействии демонстрирует лавинообразную динамику отклика. Граница перехода (по вероятности блокировки связи) от затухающей активности к незатухающей оказывается значительно выше, чем при статической блокировке. Вблизи этой границы обнаружены два типа всплесков активности (лавин), резко отличающихся по статистическим свойствам. Распределения коротких лавин (затухающих на размере сети) по длительности и полному размеру (числу сработавших элементов) демонстрируют скейлинговое поведение с индексами, соответствующими т.н. процессу критического ветвления. Для длинных лавин эти характеристики демонстрируют экспоненциальный спад, соответствующий наличию ярко выраженной характерной длительности всплеска. При приближении к границе перехода эта характерная длительность растет степенным образом, и соответствующий критический индекс не зависит от размера сети. Мгновенная активность сети (число одновременно возбужденных элементов) в длинных лавинах испытывает сильные флуктуации, а ее усредненное значение в точке перехода одинаково для всех сетей данного типа при условии его нормировки на квадратный корень из размера сети. Это позволяет сделать вывод о наличии в системе фазового перехода второго рода, где параметром порядка является средняя активность сети.

2. Исследование тепловых флуктуаций в твердых телах. Изучение свойств и анализ спектров тепловых флуктуаций. Изучение низкочастотных электрических флуктуаций в неоднородных средах.

В джозефсоновской среде - высокотемпературном гранулярном сверхпроводнике - экспериментально обнаружена лавинообразная динамика магнитного потока, проникающего в образец при медленном линейном нарастании внешнего магнитного поля. Наблюдающиеся при этом всплески ЭДС индукции связаны со скачкообразным проникновением магнитного поля в сверхпроводник и имеют степенное распределение. Полученные результаты являются прямым подтверждением гипотезы о самоорганизации критического состояния в такой системе.

1. О.В.Герашенко "Лавины магнитного потока в джозефсоновской среде", Письма в ЖЭТФ, т.86, вып.7, с.539-544 (2007).
2. О.В.Герашенко "Самоорганизованное критическое состояние в гранулярных ВТСП: эксперимент", Труды III Международной научной конференции "Актуальные проблемы физики твердого тела", Минск, 2007.

НАПРАВЛЕНИЕ 5:

Современные высокоинтенсивные источники нейтронов. Модернизация, разработка и создание приборной базы.

Проект 5.1.

Создание приборного оснащения высокопоточного реактора ПИК.

Руководитель проекта: проф. В.В. Федоров

Источник холодных и ультрахолодных нейтронов на основе сверхтекучего гелия для реактора ВВР-М.

Руководители подпроекта:

проф. А.П.Серебров,
зав. гр. В.А.Митюхляев

1. Разработан концептуальный проект источника холодных и ультрахолодных нейтронов на основе сверхтекучего гелия для реактора ВВР-М.

Расчеты, выполненные по программе MCNP, позволили определить оптимальную геометрию источника и выбор материалов. Было показано, что тепловыделение в свинцовой защите составляет 15 кВт, тепловыделение в графитовом предзамедлителе составляет 700 ватт, тепловыделение в алюминиевой оболочке источника со сверхтекучим гелием составляет 13 Вт, а непосредственно в сверхтекучем гелии 6 Вт. В качестве оптимального предзамедлителя выбран графит. По эффективности в производстве нейтронов с длиной волны 9 Å графит уступает жидкому дейтерию в два раза, однако дает реальное техническое решение задачи.

Проведены расчеты, указывающие на возможность удаления указанных выше тепловыделений на соответствующих температурах: 300К, 20К, 1.2К.

2. Разработана конструкция источника в 3D-геометрии, которая включает в себя:
 - a. свинцовую защиту при температуре 300К,
 - b. графитовый предзамедлитель при температуре 20К,
 - c. холодный модуль при температуре 1.2К,
 - d. криостат со сверхтекучим фильтром,
 - e. а также систему коммуникаций с криорефрижераторами.
3. Выполнены измерения наведенной активности на извлекаемых элементах тепловой колонны, которые показывают реальность выгрузки и захоронения радиоактивных конструкций. Подготовлен эскизный проект удаления пробки тепловой колонны.
4. Разработан проект размещения холодильной установки на 15-20К и 3кВт мощности.
5. Проведена реконструкция помещений для установки новой холодильной машины и ее компрессорного оборудования.
6. Начат монтаж новой холодильной установки.
7. Составлен эскизный проект нейтроноводного зала.
8. Составлен эскизный проект на переоборудование имеющихся экспериментальных установок и создание новых.
9. Составлен эскизный проект нейтроноводной системы.

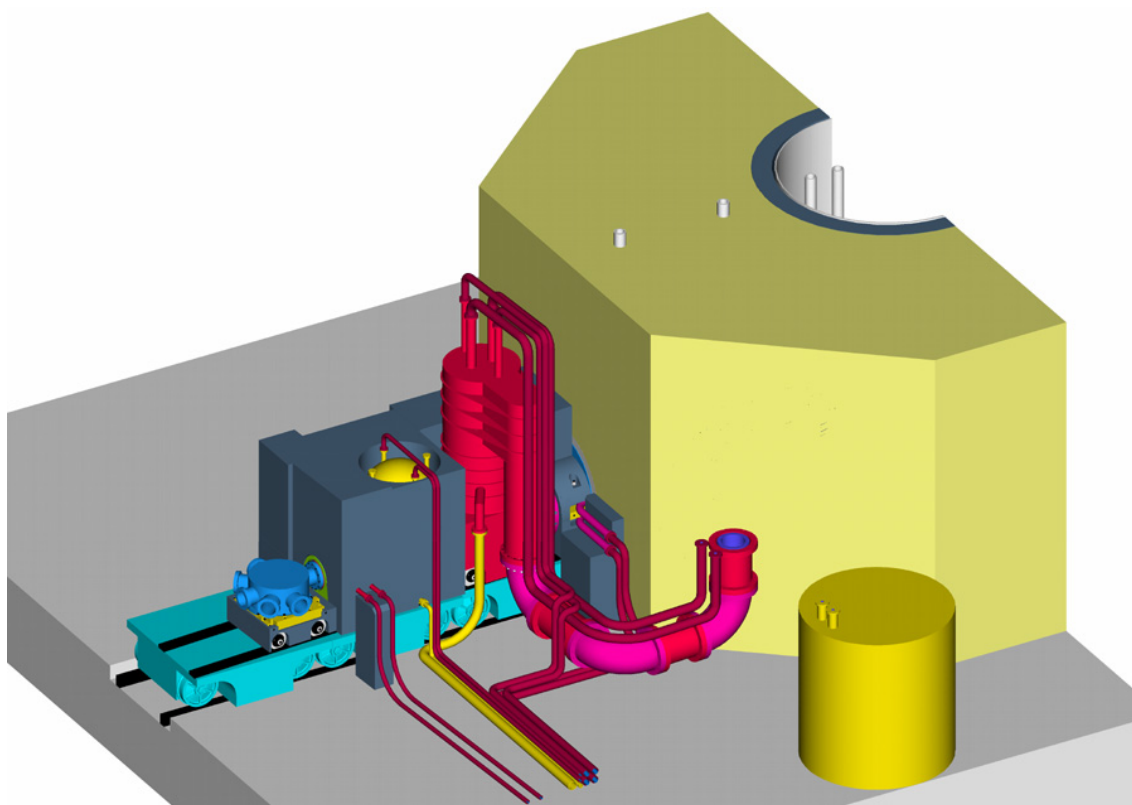


Рис. 1. Концептуальный проект источника холодных и ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-М.



Рис. 2. Начало монтажа криорефрижератора.

Изготовление напылительного комплекса для получения отражающих покрытий нейтронотводов и ловушек УХН

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. М.С.Ласаков

Напылительные установки комплекса оснащены новым откачным оборудованием. Установлены безмаслянные форвакуумные насосы для предварительной откачки и криогенные низкотемпературные насосы для высоковакуумной откачки.

Обновленный комплекс был успешно использован для изготовления покрытий нейтронотводной системы, ловушек УХН и детекторов УХН для мультикамерного ЭДМ спектрометра.

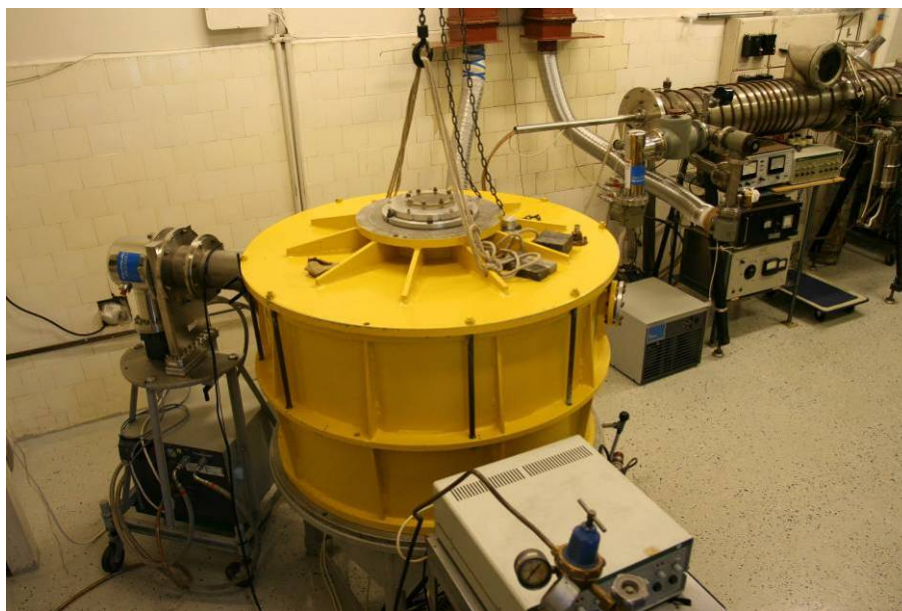


Рис. 1. Установка для напыления плоских покрытий и изготовления реплик (слева внизу). Установка для напыления полированных труб изнутри (справа вверху).



Рис. 2. Установка для напыления ^6Li на полупроводниковые кремниевые детекторы УХН (справа). Установка для напыления крупногабаритных цилиндрических ловушек изнутри, а также плоских поверхностей большого размера (дальний левый угол). Установка находится в стадии разработки.

Создание комплекса приборов и методов для исследования динамики процесса деления ядер тепловыми и резонансными нейтронами

Руководитель подпроекта: проф. Г.А. Петров

С целью обеспечения планируемых исследований динамики деления тяжелых ядер медленными поляризованными нейтронами современными системами сбора и предварительной обработки получаемой многомерной физической информации созданы две экспериментальные много-счетчиковые установки для измерений угловых, энергетических и массовых распределений продуктов деления с соответствующим электронным и программным обеспечением.

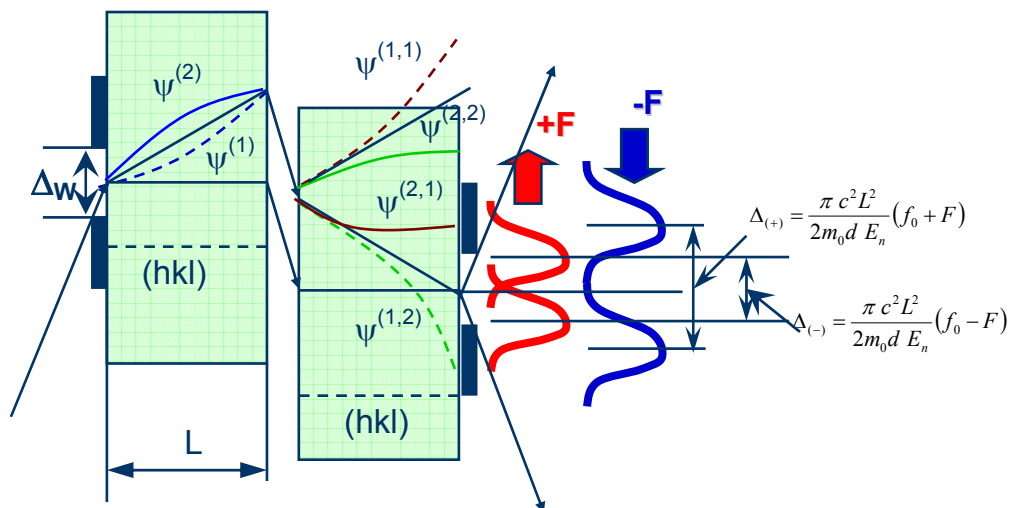
Установка для измерения отношения инертной и гравитационной масс нейтрона дифракционным методом.

Руководитель подпроекта: д.ф.-м.н. В.В.Воронин

Предложен новый метод измерения отношения инертной и гравитационной масс нейтрона, основанный на дифракции по Лауэ в совершенном кристалле при углах Брэгга близких к 90° [1,2]. Показано, что в такой постановке эксперимента точность измерения данной физической величины может быть улучшена примерно на два порядка по сравнению с современной. Аналогичную схему эксперимента можно использовать и для измерения электрического заряда нейтрона.

В рамках подготовки этого эксперимента приобретен ряд экспериментального оборудования –

1. Термостат Julabo F32-HE для поддержания температуры рабочего кристалла с точностью 0.01°K .
2. Двухкомпонентный датчик угловых перемещений (инклинометр) ДДУП-2 для контроля горизонтальности расположения рабочего кристалла с точностью лучше 0.1 угл. секунды.



3. Заготовка бездислокационного монокристалла кремния размерами $\varnothing 104 \times 177$ мм.

4. Поворотная платформа $\varnothing 300$ мм для юстировки и вращения узла кристалла.

В настоящее время ведутся исследования совершенства монокристалла кремния и анализ возможности его использования в данном эксперименте.

[1] V.V. Fedorov, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, S.Yu. Semenikhin, V.V. Voronin, Neutron Laue diffraction in a weakly deformed crystal at the Bragg angles close to $\pi/2$, Письма в ЖЭТФ, 85 (1) 90-93

[2] V.V. Fedorov, E.G. Lapin, E. Lelievre-Berna, V. Nesvizhevsky, A. Petoukhov, S.Yu. Semenikhin, T. Soldner, F. Tasset, V.V. Voronin, First Observation of the Neutron Spin Rotation for Laue Diffraction in a Deformed Non-centrosymmetric Crystal, Preprint PNPI-2677, Gatchina, 2006. 16 p.

Установка для измерения циркулярной поляризации гамма-квантов из реакции $n+p \rightarrow d+\gamma$ с поляризованными нейтронами.

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. Пирожков А.Н.

Измерение «квадратичного эффекта» с источником гамма-квантов для оценки возможной точности измерения эффективности поляриметров циркулярной поляризации.

Измерение циркулярной поляризации γ -квантов из реакции $pn \rightarrow d\gamma$ с точностью $(5 \div 6)\%$ требует знания поляризационной эффективности поляриметра с абсолютной точностью $(8 \div 10) \cdot 10^{-4}$. Экспериментально поляризационная эффективность может быть определена при измерении квадратичного эффекта, когда поляриметры работают в режиме «включено – выключено». Точность определения этого эффекта должна быть на уровне $(2 \div 3) \cdot 10^{-6}$. Для регистрации спектров гамма-квантов в установке имеется 14 спектрометрических каналов с детекторными сборками ВГО+ФЭУ.

Систематические эффекты, связанные влиянием на регистрирующую аппаратуру сигнала, управляющего состоянием флиппера поляризации нейтронов (синфазная «наводка»), были устранены ранее до статистически незначимого уровня. Это удалось сделать благодаря изучению и опробованию различных схем построения управляющих и логических связей.

Однако, при работе поляриметров в режиме «включено – выключено», возможен ложный эффект влияния изменяющегося рассеянного магнитного поля поляриметров на детектирующую систему. При работе с ФЭУ полностью исключить такое влияние с помощью пассивной магнитной защиты не удастся. Для мониторингирования этого систематического эффекта и его учета при обработке результатов измерения создана

система, позволяющая отслеживать изменения коэффициентов усиления спектрометрических трактов. Создана и программа обработки данных, позволяющая устранять систематический эффект, связанный с линейным изменением коэффициента усиления тракта.

Работоспособность системы мониторинга малых ($\sim 10^{-2} \div 10^{-3}$) относительных изменений коэффициента усиления спектрометрического тракта проверялась с делителем сигнала, имитирующим влияние магнитного поля на амплитуду сигнала. Обработка результатов таких измерений с помощью созданной программы показывала, что эффект синфазного линейного изменения амплитуды (и формы спектра) правильно и полностью (в пределах статистической ошибки) учитывается, и не приводит в итоге к регистрации ложного эффекта.

Однако, влияния на детекторную сборку периодически изменяющегося внешнего магнитного поля, также приводящего к малым изменениям амплитуды сигнала, полностью устранить при обработке накопленных данных не удастся. Неустраняемый относительный эффект изменения счета в выбранном для интегрирования «окне» спектра составляет величину $\sim 10^{-5}$. Тщательное изучение этого явления показало, что «включение» внешнего магнитного поля приводит к нелинейному изменению амплитуды сигнала и формы всего спектра. Физически это может быть связано с расфокусировкой потока электронов на динодах ФЭУ, уменьшением амплитуды сигнала и нелинейным изменением статистического разброса числа электронов (разрешение ФЭУ). Объективных и точных критериев устранения такого эффекта при обработке данных к настоящему времени не найдено. Изучение этого вопроса еще будет продолжено. Не исключено, что возможности предлагаемой методики для экспериментального определения эффективности поляриметров с высокой точностью принципиально ограничены наблюдаемым эффектом.

Альтернативой может быть использование детекторов гамма-квантов, нечувствительных к изменениям магнитных условий, например, ППД. Но на этом пути есть свои трудности, связанные с эффективностью регистрации и скоростью счета гамма-квантов.

Изучается возможность использования имеющегося физического оборудования и многоканальной спектрометрической установки для решения других физических задач.

Создание универсального кристалл-дифракционного спектрометра по Кошуа для измерения малых энергетических смещений рентгеновских линий.

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. Тюнис А.В.

В 2007 г. проведены следующие работы:

1. Изготовлен и введен в эксплуатацию новый кристалл-дифракционный спектрометр по схеме Иоганна для измерения малых смещений рентгеновских линий в области «мягких» энергий ($4 \div 15$ кэВ). Схема спектрометра показана на рисунке 1.
2. Проведена юстировка спектрометра и проверка его в «нулевом» опыте, т.е. измерение смещения на паре идентичных образцов Mn_2O_3 . Характерные спектры $K\alpha_1$ и $K\alpha_2$ -линий Mn показаны на рис. 2.
3. Проведены измерения смещений рентгеновских линий на ряде соединений Mn с разной валентностью (металлический марганец, Mn^{2+} , Mn^{3+} , Mn^{4+} и Mn^{7+}). Результаты измерений приведены на рис. 3 и в таблице.
4. Проведены измерения смещений рентгеновских линий La, Sr и Mn в манганитах $LaSrMnO$ с различной концентрацией Sr. В настоящее время ведется обработка экспериментальных результатов для определения электронной структуры элементов, входящих в данные соединения.
5. Проведены теоретические расчеты смещений рентгеновских линий в модели Дирака-Фока для возможных конфигураций валентных электронов Mn. Наблюдается

качественное (а в большинстве случаев и количественное) согласие теоретических и экспериментальных данных, что является основой для идентификации симметрии

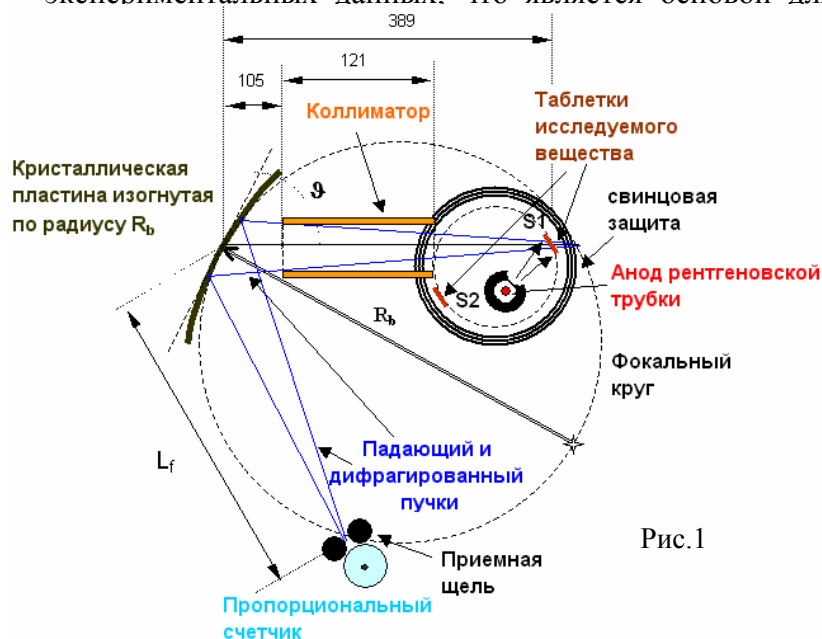


Рис.1

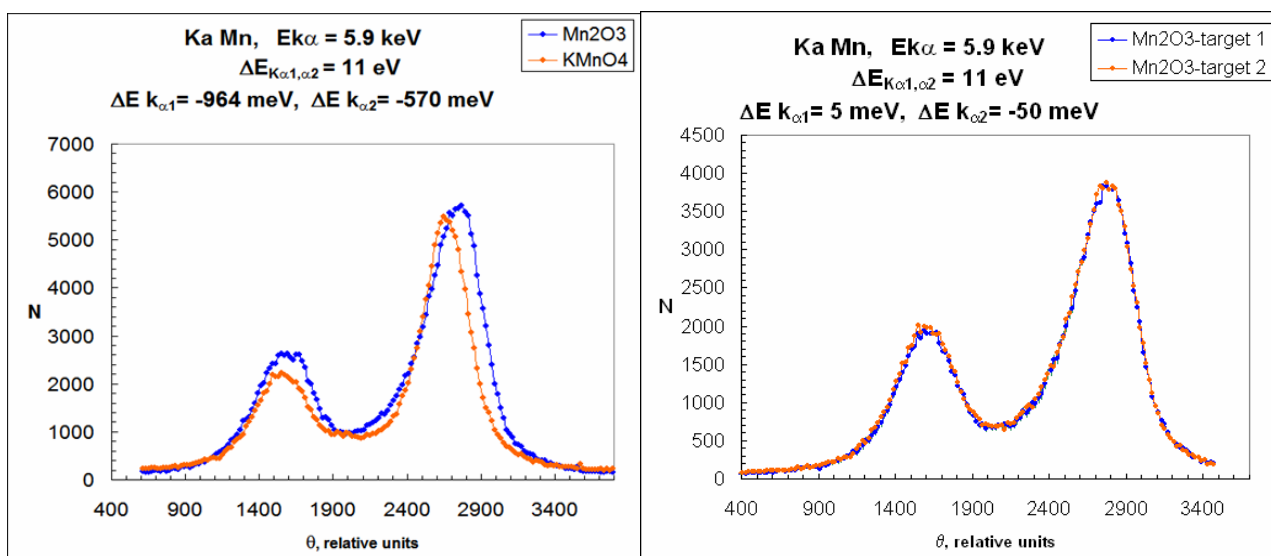


Рис.2

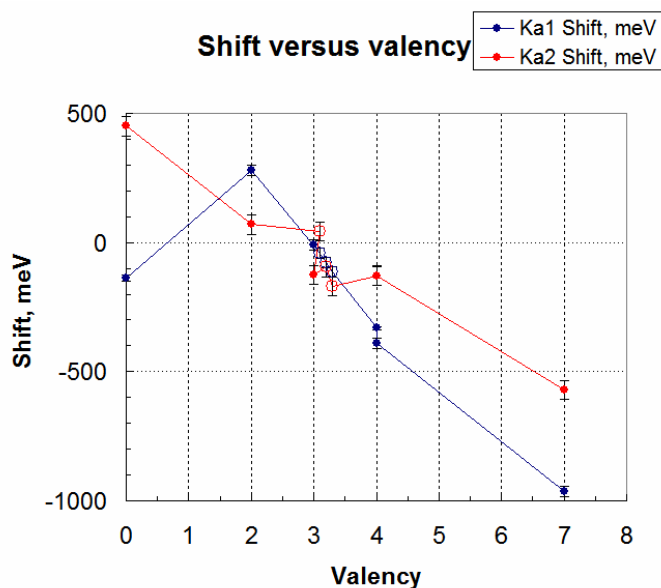


Рис.3

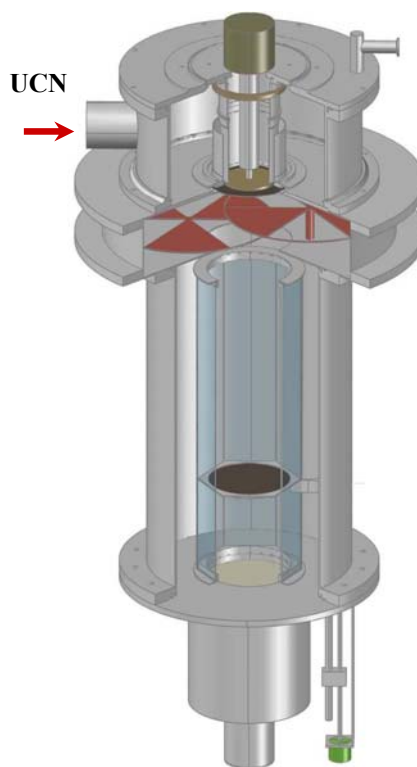
Shift = $E_{K\alpha}(X) - E_{K\alpha}(Mn_2O_3)$					
X	$K\alpha_1$	σ	$K\alpha_2$	σ	Valency
	Shift, meV		Shift, meV		
MN_metal	-138	11	450	21	0
MnCl ₂	279	21	69	40	2
LaSrMnO ₃	-42	20	44	40	3.1
LaMnO ₃	-9	20	-126	54	3
PrSrMnO ₃	-78	20	-95	40	3.2
CeSrMnO ₃	-113	20	-169	40	3.3
MnO ₂	-331	6	-129	15	4
SrMnO ₃	-390	20	-128	40	4
KMnO ₄	-965	20	-570	40	7

Проверка слабого принципа эквивалентности для нейтрона

Руководители подпроекта: д.ф.-м.н. А.И.Франк (ОИЯИ)
д.ф.-м.н. В.В.Воронин (ПИЯФ РАН)

С целью проверки принципа эквивалентности для нейтрона начата работа по созданию специального спектрометра УХН с интерферометрами Фабри-Перо. Схема прибора представлена на рис.1. Идея эксперимента основана на сравнении энергии $\Delta E_g = mgh$, которую нейтрон приобретает при падении с высоты h , с энергией, $\Delta E_q = \hbar\Omega$ передаваемой ему квантовым модулятором, оперирующем на частоте Ω . В качестве последнего используется вращающаяся дифракционная решетка, пересекающая направление движения нейтронной волны. Для прецизионной спектрометрии УХН применяются нейтронные интерферометры Фабри-Перо.

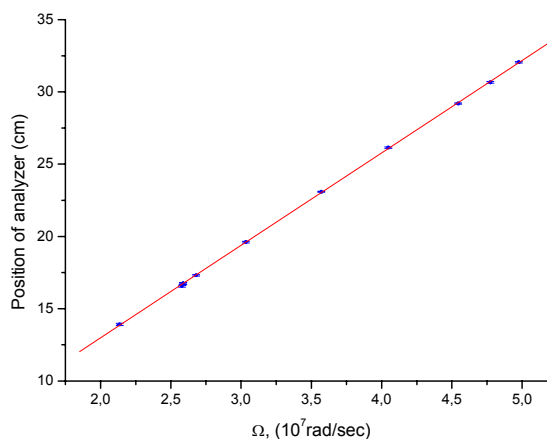
На реакторе ИЛЛ (Гренобль) проведен тестовый эксперимент с прототипом спектрометра. Результат эксперимента согласуется с расчетом, в котором использовалось табличное значение массы нейтрона m и величина локального ускорения свободного падения макроскопических тел g . Степень этого согласия удобно выразить через отношение $\gamma = mg/(mg)_{\text{exp}}$. Для величины определенного таким образом фактора эквивалентности получено: $1-\gamma = (1.8 \pm 2.1) \times 10^{-3}$. Проектируемый спектрометр, установленный на источнике УХН нового поколения, позволит увеличить точность на два порядка.



Проектируемый спектрометр
УХН с ИФП



Монтаж прототипа
спектрометра на реакторе ILL



Зависимость положения интерферометра-
анализатора от частоты модулятора

Бета-ЯМР спектрометр на поляризованных нейтронах

Руководители подпроекта:
проф. Ф.С. Джепаров (ИТЭФ)
к.ф.-м.н. Ю.П. Черненко (ПИЯФ РАН)

1. Разработана блок-схема компьютерной программы для управления работой бета-ЯМР спектрометра на поляризованных нейтронах, проектируемого для реактора ПИК. Программа обеспечивает дистанционное управление работой установки и контроль её параметров. Программы задают режим работы узлов установки, контролируют параметры этих узлов и полностью автоматизируют процесс измерения. Программа определяет направление вектора поляризации пучка поляризованных нейтронов, падающих на образец, длительность облучения образца этими нейтронами, длительность полуцикла измерения бета-активности с заданным направлением поляризации, число тактов (каналов) временного анализатора, длительность такта, списывание данных, их накопление и создание файла данных.
2. Проведена настройка и согласование блоков наносекундной электроники, изготовленной в ПИЯФ, с блоками бета-счетчиков и проведены контрольные измерения на пучке нейтронов. Работы по настройке измерительных трактов проведены с использованием генератора импульсов, образцовых источников гамма-излучения и пучка нейтронов МИФИ. Проведены контрольные измерения параметров импульсов, нагрузочных характеристик, разрешающего времени электронных трактов и спектра излучений.

Создание универсального нейтронного спектрометра с идеальными кристаллами (на базе аналогового спектрометра МИФИ).

Руководители подпроекта:
проф. Н.О. Елютин (ИТЭФ)
к.ф.-м.н. Ю.П. Черненко (ПИЯФ РАН)

В 2007 году продолжались работы по преобразованию и модернизации Универсального нейтронного дифрактометра (УНД) с целью его дальнейшего монтажа на ГЭК 2 реактора ПИК. На эти цели было выделено для ИТЭФ 179 т. рублей, разделённые на три контракта. Общая направленность работ – стягивание существующего оборудования на место его будущей постоянной эксплуатации, и привязка его к механическим и электронным стандартам ПИЯФ, принятым для оснащения приборного парка реактора ПИК.

С этой целью в ПИЯФ были поставлены узлы УНД, и произведены необходимые операции для его предварительного монтажа вне зала ПИКа. А именно: поведена подготовка опорного стола и опорной плиты к установке на нём основных узлов УНД; согласование и монтаж гониометра кристалла-образца с опорной плитой и консолью 2-ого гониометра и монтаж гониометра кристалла-анализатора и консоли защиты детектора; согласование и установка на второй консоли защиты детектора; балансировка конструкции. Завершение этих операций в 2008 году позволит перейти к сопряжению механических конструкций с электронными средствами управления прибором.

Другим направлением был поиск технического решения, изготовление необходимых частей и замена двигателей постоянного тока СЛ-369 на шаговые двигатели с использованием существующих редукторов. Эти работы должны завершиться сборкой 4-х связок редуктор-ШД и проверкой конструкции в свободном состоянии и в рабочих условиях с креплением на гониометрах.

Последним направлением работ 2007 года была разработка программного обеспечения для тестирования 4-х осей движения, обеспечивающегося с помощью шаговых двигателей;

контроль управлением движения с помощью 3-х осевых контроллеров приводов R364, при этом движение контролируется по количеству шагов, без датчиков обратной связи. Программа должна работать под управлением Windows XP.

В работах принимают участие сотрудники ПИЯФ и ИТЭФ.

Модернизация трехосного нейтронного спектрометра СНК-3

Руководитель подпроекта: проф. С.Б.Вахрушев (ФТИ РАН)

Была продолжена модернизация трехосного нейтронного спектрометра СНК-3 для реактора ПИК.

- Приобретены и аттестованы кристаллы пиролитического графита для фокусирующего анализатора, завершается изготовления прототипа анализатора для тестового использования на реакторе ВВР-М

- Завершены изготовление и монтаж подвижной защиты узла анализа, проведены тестовые испытания.

- Проведена тестовая эксплуатация прецизионных датчиков угол-код. Показана их высокая стабильность. Аттестованы узлы крепления датчиков на осях и показано, что они не вносят погрешностей более 5 угловых секунд.

- Совместно с ООО Атомграф начата проработка возможности создания нейтронного искривленного монохроматора с заданной кривизной. Рассматривается возможность создания многослойных структур.

48 –ми детекторный порошковый дифрактометр для ГЭК 9 реактора ПИК.

Руководитель подпроекта: проф. В.А. Трунов.

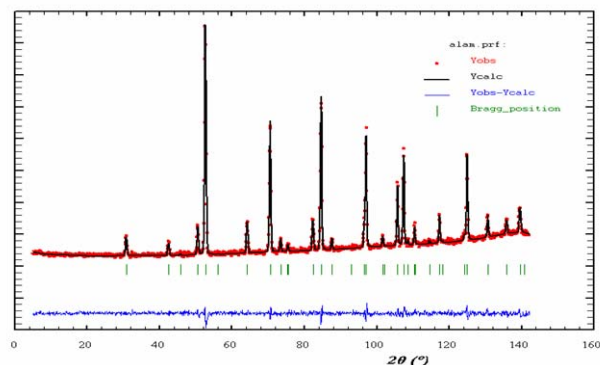
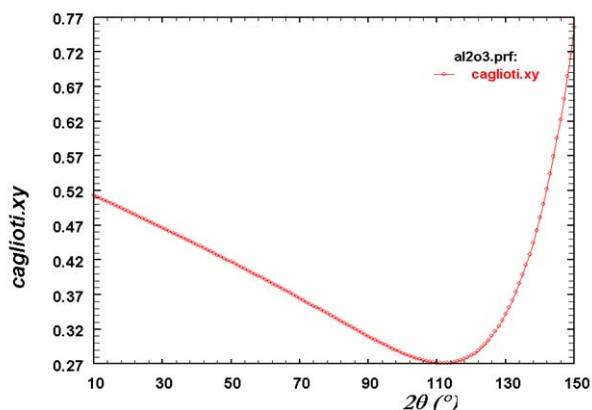
Суперпозиционный 48 детекторный 4-х секционный порошковый нейтронный дифрактометр, созданный в ПИЯФ РАН, установлен на 9-ом канале реактора ВВР-М. Дифрактометр предназначен для изучения кристаллических и магнитных структур различных материалов, включая наноматериалы (композиты, катализаторы, магнетики, накопители водорода, лекарственные препараты и др.).

Основными элементами дифрактометра являются:

- 4 детекторные секции по 12 детекторов в каждой с 4 декодерами абсолютного углового кода с точностью 18угл.сек ;
- 48 детекторов (3Не типа СМ-17);
- 48 соллеровских пленочных коллиматоров (коэффициент пропускания ~ (85-90)%, горизонтальная расхожимость 12 угл. мин., поперечное сечение ~8x100mm²);
- Модули воздушных подушек транспортирующих 4 секции;
- Монитор с предусилителем;



Были проведены тестовые измерения стандартных образцов Al_2O_3 и $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{F}_{14}$. Обработка результатов проводилась методом Ритвельда при помощи программы полнопрофильного анализа FullProf.



Функция разрешения.

Сборка, отладка и испытания высокотемпературного узла образца для порошковой нейтронной дифракции в диапазоне температур от 20 до 1000 С

Руководитель подпроекта:
к.ф.-м.н. В.А. Ульянов

Созданный высокотемпературный узел образца (см. Рис.1.) представляет собой шахтную вакуумную печь, предназначенную для проведения экспериментов по дифракции нейтронов от порошковых образцов с размерами высотой до 45 мм и диаметром до 10 мм в диапазоне температур 20-1000С.

Необходимо модернизировать оснастку для установки печи на дифракометре.



Рефлектометр с вертикальной плоскостью рассеяния “Реверанс”.

Этап-2007г.

Разработка адиабатического устройства для трехмерного анализа поляризации пучка. Получение поляризованного пучка и проведение экспериментов с ним

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. Гордеев Г.П

В тестовом варианте на нейтронном пучке с длиной волны нейтронов 0.55 nm опробована нейтроно-оптическая поляризующая система (2-х зеркальный поляризатор и широкоугольный многощелевой анализатор). Получен поляризованный пучок с поляризацией порядка 60%. Малая интенсивность пучка (порядка 100 имп./сек) и неблагоприятные фоновые условия не позволили определить эффективность устройств. Для увеличения интенсивности монохроматических нейтронов опробован ряд монокристаллов (магнетит, пирографит, новый набор пластин фторфлогопита). По результатам тестовых исследований для дальнейшей работы был выбран новый кристалл фторфлогопита и

изготовлен блок длинных поляризующих зеркал для поляризатора, позволяющих увеличить размеры отраженного пучка.

Спроектирован узел адиабатического время-пролетного поляриметра. Составлено тех. задание на изготовление низкочастотного (25-100 Гц) генератора для электронного прерывателя монохроматического поляризованного нейтронного пучка.

Установка малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов «Вектор»

Этап 2007г.:

Разработать проект установки ПЧ - детектора на установку "Вектор".

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. Рунов В.В

Проект установки ПЧ - детектора на установку "Вектор" разработан, идет его реализация.

Реализация схемы SESANS с векторным поляриметром.

Этап 2007 года:

а) Монтаж магнитов и датчиков магнитного поля на приборной платформе.

Калибровка полей магнитов. Составление алгоритма работы прибора и разработка управляющей программы .

б) исследование параметров магнитных фольг для выбора их в качестве п-вращателей в магнитах.

Руководитель подпроекта: к.ф.-м.н. Григорьев С.В.

- Смонтированы магниты прецессии на приборной платформе установки;
- прокалиброваны магнитные поля магнитов;
- продолжается работа над созданием алгоритма работы прибора для управляющей программы;
- создана магнитная система из постоянных магнитов, создающая ведущее поле вдоль нейтронного тракта;
- настроен узел векторного анализа поляризации входящий в рабочую схему прибора;
- испытаны четыре типа магнитных фольг на предмет использования их в качестве π - вращателей поляризации;
- изготовлены адиабатические катушки для $\pi/2$ -вращателей поляризации,
- измерено распределение магнитных полей в них,
- проведено тестирование этих катушек на нейтронном пучке;
- осваивается промышленный компьютер и управление с его помощью программируемых источников питания магнитов прецессии

Разработать техническое задание на технологическую линию облучения образцов в низкотемпературной гелиевой петле реакторе ПИК (проектирование осуществляет гр. ИХН ПИЯФ и НИКИЭТ)

Руководитель подпроекта: д.ф.-м.н. Коноплева Р.Ф.,

Разработано (совместно с гр. ИХН ОНИ ПИЯФ и НИКИЭТ) техническое задание на технологическую линию облучения и исследования образцов на низкотемпературной гелиевой петле реакторе ПИК.

Проектирование и изготовление блоков защиты поляризующего нейтроновода для дифрактометра с анализом поляризации на канале 6 реактора ВВР-М.

Руководители подпроекта:

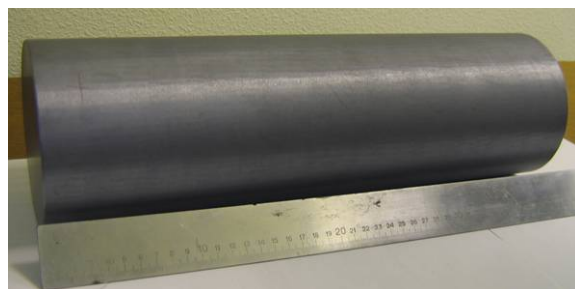
к.ф.-м.н. Смирнов О.П.

к.ф.-м.н. Щебетов А.Ф.

Выполнено проектирование, изготовлены и установлены на пучке №6 реактора ВВР-М 10 блоков биологической защиты поляризующего нейтроновода для дифрактометра с анализом поляризации.

Завершение работ по созданию вакуумных кожухов формирователя пучков 9 канала реактора ПИК. Продолжение работ по созданию порошкового нейтронного дифрактометра для исследования микрообразцов и создание фокусирующего монохроматора на основе кристаллов кремния.

Закончено создание оптических элементов для формирования нейтронных пучков, сделано около 40% механической и вакуумной оснастки для сборки оптических элементов в формирующие каналы. Приобретен монокристалл кремния диаметром 120 мм, необходимый для создания монохроматора, вырезана и ориентированна пластина, необходимая для приготовления монохроматора.



Исследование формфактора нейтрона на пороге реакции $e+e- \rightarrow n \text{ antin}$

Руководитель подпроекта:

д.ф.-м.н. С.И.Средняков (ИЯФ СО РАН)

1. На коллайдере ВЭПП-2000 установлен временный вакуумный промежуток (рис.1). Он включает алюминиевую вакуумную камеру, прототип трековой системы и прототип аэрогелевого черенковского счетчика. Конструкция крепления выбрана такой, что полный вес около 20 кг опирается на тяжелые линзы, а вакуумный промежуток оказывается ненагруженным. Проведенная работа позволяет сомкнуть калориметр вокруг коллайдера и приступить измерению фонов на ВЭПП-2000 и измерению светимости.

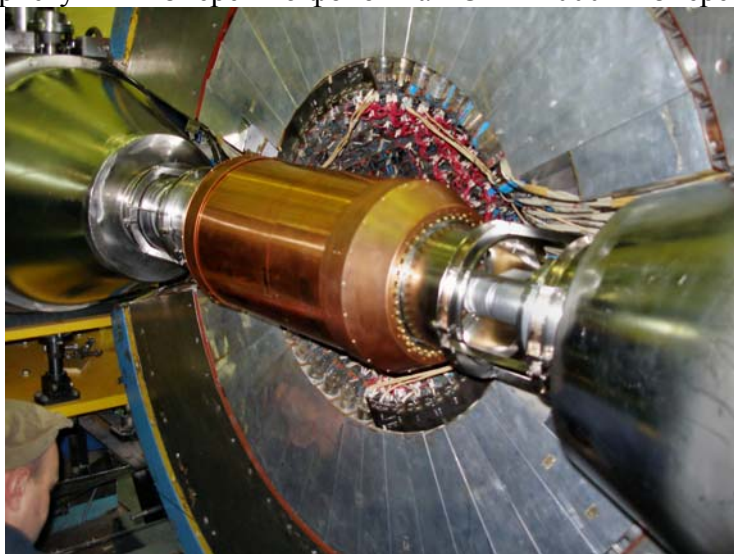


Рис.1 Внутренняя часть детектора СНД. Видны два сверхпроводящих соленоида, в центре трековая система вокруг места столкновения пучков и на заднем фоне калориметр.

2. Остальные компоненты детектора находятся в стадии сборки и установки на ВЭПП. Мюонный детектор, состоящий из пропорциональных трубок длиной 2 м и

сцинтилляционного счетчика такой же длины, уже частично установлен. Трековая система сейчас на ремонте – меняются прослабшие проволоочки. В начале 2008 года камера будет проверяться и затем установлена на ВЭПП. Электроника всего детектора на 90% собрана и находится в рабочем состоянии. Система считывания данных (ССД) опробована на реальных космических событиях. Ведется работа по созданию калибровок, программ третичного триггера, визуализации событий.

3. Измерения с прототипом канала для времени пролета проведены с вариантом электроники, который выбран в качестве основного для будущей глобальной модернизации электроники калориметра. Он включает в себя РС-формирователь с передним фронтом около 100 нсек и флэш-АЦП ПА24. Измерения проводились с прототипом этого канала. При энергии 70 МэВ получено разрешение 3 нсек. При пересчете на большую энергию ~ 400 МэВ разрешение будет лучше 1 нсек. Измерения будут продолжаться с целью более полного понимания полученного разрешения. Наш заказ на новый комплект электроники сформулирован. Это будет недешевый проект. Его стоимость оценивается в районе 5-6 млн.рубл.

4. На качественно новом уровне проводится моделирование будущего эксперимента – начиная от временного разрешения и кончая полным моделированием взаимодействия частиц в детекторе СНД. На рис.2 в качестве иллюстрации приводится двумерное распределение по координате первого взаимодействия пары нейтрон-антинейтрон при кинетической энергии 5 МэВ. Видно, что первое взаимодействие происходит преимущественно в кристалле первого слоя калориметра. Роль второго и третьего слоя состоит в поглощения энергии продуктов последующих взаимодействий.

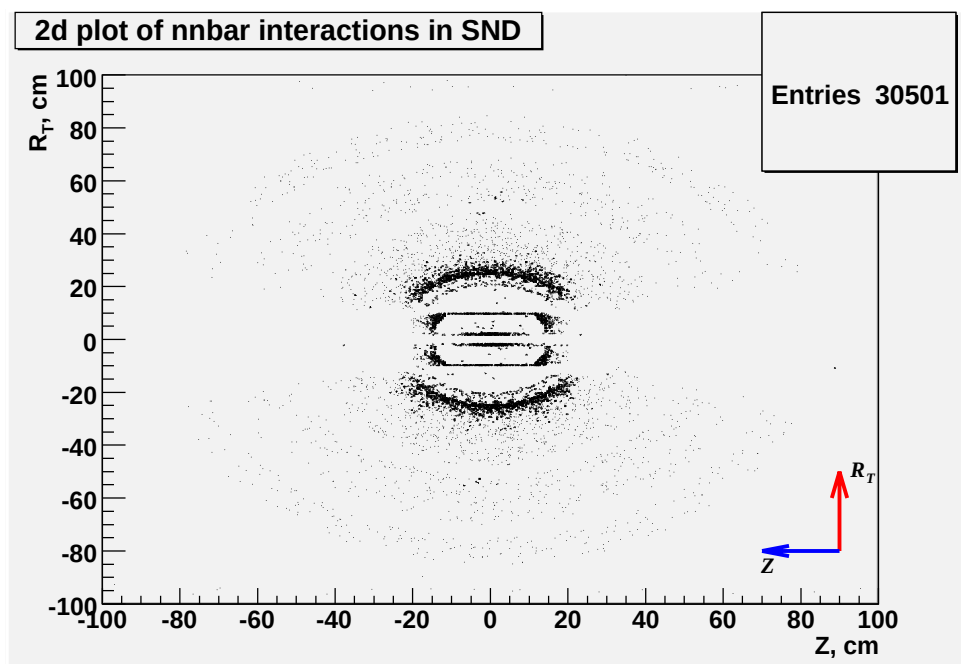


Рис.2 Двумерный плот Z-R проекции точки первого взаимодействия нейтрон-антинейтронного события в детекторе СНД.

5. В заключение приведем краткое описание состояния дел на коллайдере ВЭПП-2000 и детекторе СНД. Работа ведется с токами электронов и позитронов несколько миллиампер. Измеренные параметры пучков в режиме с включенными сверхпроводящим соленоидом соответствуют расчетам. Параметр пространственного заряда, определяющий светимость, не противоречит расчету. Есть проблемы с инжекцией и апертурой, а также с электроникой управления коллайдера. На ближайшие полгода намечена программа работ по решению названных проблем.

В детекторе СНД в рабочем состоянии находится калориметр, электроника и система считывания данных. В течение декабря 2007 г. и начала 2008 г. будут проводиться измерения с пучками электронов и позитронов.

Дифрактометр для исследований веществ при высоких давлениях (ДВД)

Руководители подпроекта: проф. А.М.Балагуров (ОИЯИ)
проф. В.А.Трунов (ПИЯФ РАН)

На 2007 г. было запланировано:

- Разработка и изготовление тридцати двух нестандартных гелиевых счетчиков для кольцевого детектора.
 - Разработка технической документации и изготовление 20 штук уникальных клиновидных оптических зеркальных элементов для формирователя нейтронного пучка на канале 9а реактора ПИК.
 - Разработка и изготовление автоматизированной электроники для регистрации и накопления данных от 128 точечных нейтронных детекторов и двух мониторинговых детекторов.
- Все запланированные работы выполнены.

1. Дифрактометр ДВД на реакторе ПИК.

Расположение дифрактометра в экспериментальном зале реактора ПИК показано на **рис. 1**. Канал ГЭК9 включает два выведенных пучка нейтронов, сформированных зеркальными нейтроноводами, на которых располагаются несколько спектрометров. Место расположения ДВД – позиция D3 на рис. 1 – соответствует планируемым параметрам дифрактометра.

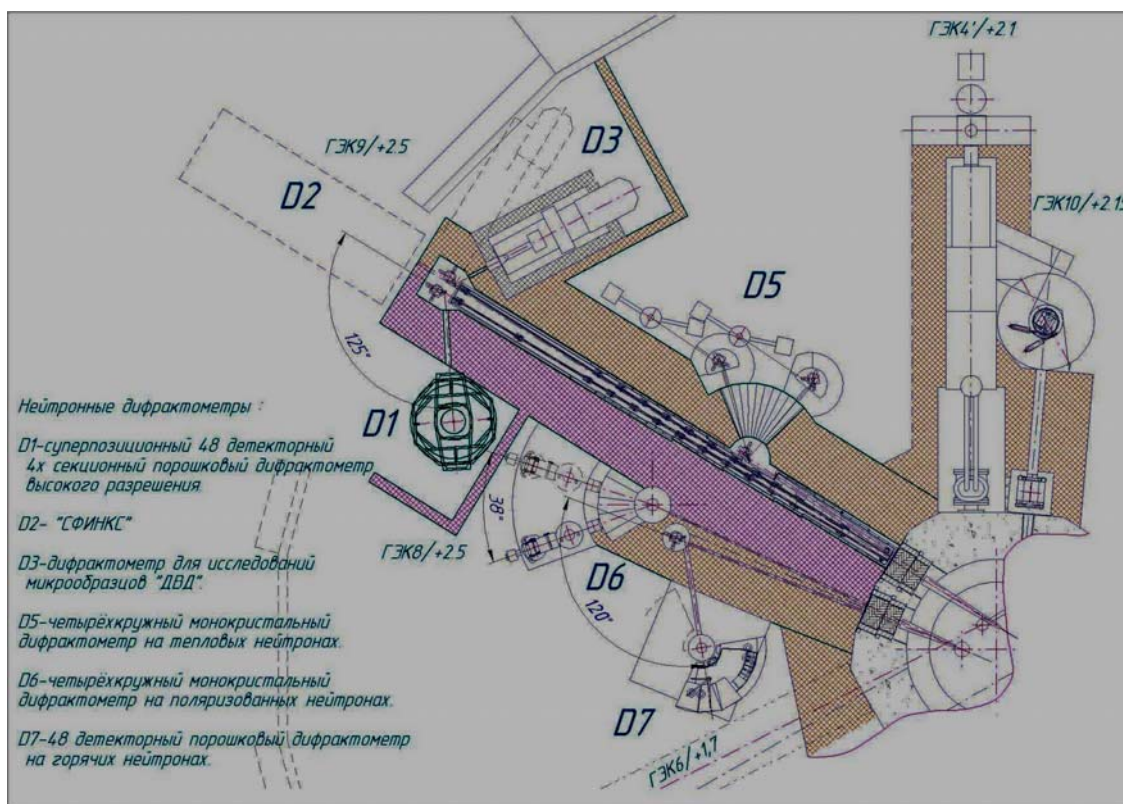


Рис. 1. Схема расположения нейтронных спектрометров на канале ГЭК9а. Дифрактометр ДВД располагается в позиции D3.

2. Счетчики для детектора.

В 2007 г. Разработана и изготовлена партия (32 штуки) гелиевых счетчиков для кольцевого детектора. Основные параметры счетчика: диаметр 12 мм, смесь газов He^3 (8 атм) и Ar (2 атм), длина рабочей части счетчика 80 мм. Внешний вид и схема счетчика показаны на **рис. 2**. Счетная характеристика показана на **рис. 3**. Технические параметры счетчика приведены в таблице 1.

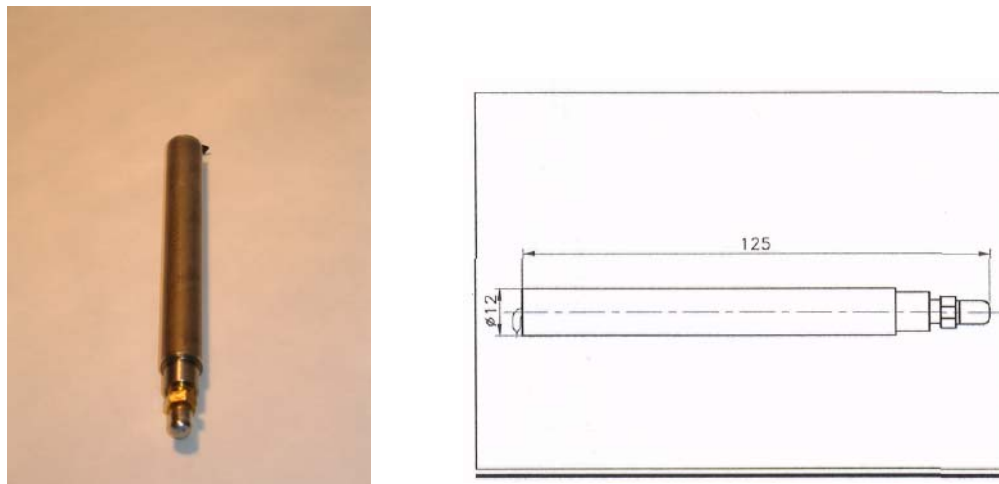


Рис.2. Счетчик нейтронов для детекторной системы ДВД. Внешний вид и схема.

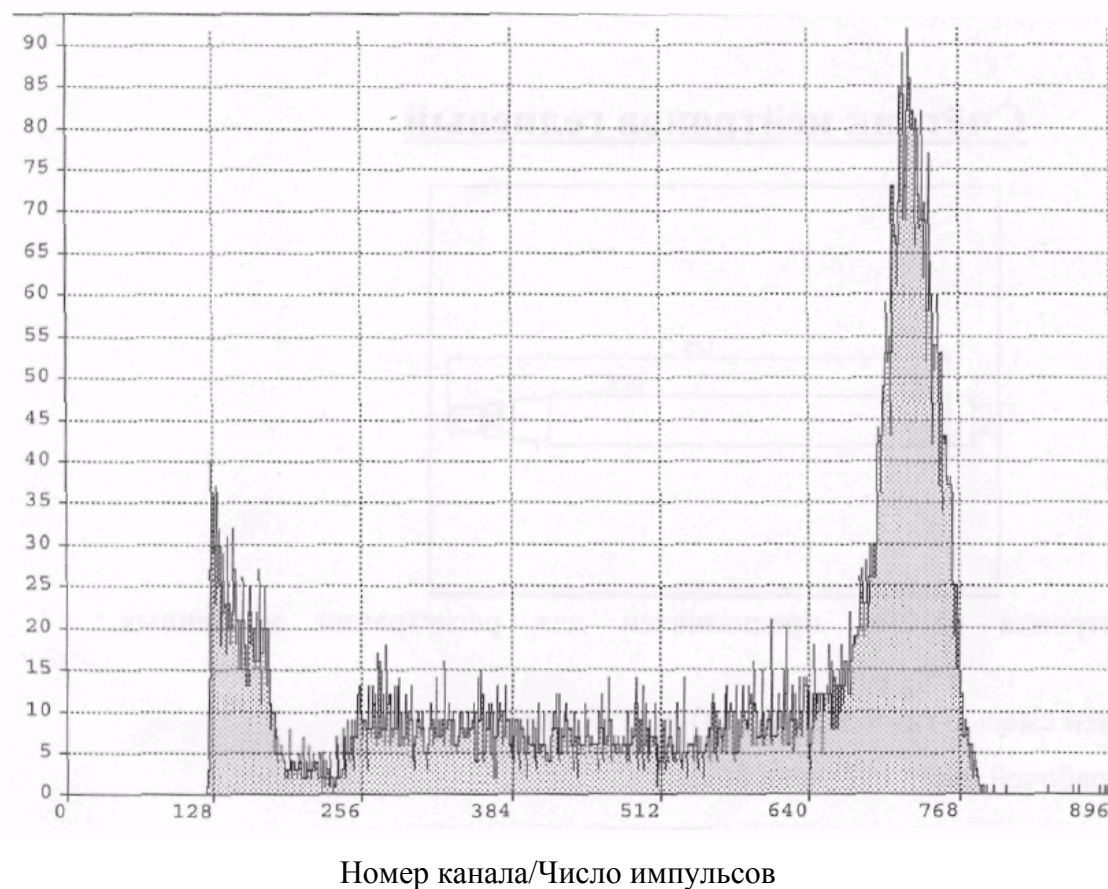


Рис. 3. Амплитудный спектр ^3He -счетчика для ДВД.

Таблица 1. *Основные электрические и радиометрические параметры*

Рабочее напряжение	1200 В
Разброс положения пика от среднего значения в партии	$\pm 15\%$
Собственный фон	< 0.2 имп/сек
Рабочий интервал температур	0 - 50°C

3. Электроника накопления данных.

Разработана система регистрации и накопления данных от точечных нейтронных детекторов (нейтронных счетчиков) с максимальным количеством детекторов до 128 и двух мониторных детекторов. Управление системой и считывание данных в персональный компьютер осуществляются с помощью интерфейса USB2.0. В системе сбора данных реализованы следующие режимы работы:

- интегральный режим накопления;
- накопление гистограмм по времяпролетной методике с программируемым числом временных каналов и шириной канала;
- режим накопления множества гистограмм по времяпролетной методике в коротких интервалах времени для изучения динамики фазовых переходов в образце.

Система сбора и накопления данных выполнена по модульному принципу (8 модулей по 16 детекторов), что позволяет ускорить обработку данных, т.е. увеличить пропускную способность, а также подстраивать архитектуру системы под нужное число детекторов.

Для уменьшения числа кабелей при передаче информации от аналоговой электроники используется преобразование параллельного кода от 16 детекторов в последовательный код и, соответственно, последовательного кода в параллельный в системе сбора данных. В качестве передающей среды используется кабель «скрученная пара» UTP Cat5, широко используемый в сетевых коммуникациях.

Модули детекторной электроники (предусилители, компараторы, преобразователи кодов и драйверы) размещаются в непосредственной близости от детектора. Количество этих модулей соответствует количеству детекторов.

Система сбора данных состоит (**Рис.4**) из следующих блоков:

- 8 адаптивных кабельных усилителей, к которым подключены 16-разрядные преобразователи последовательного кода в параллельный код;
- двух FPGA-матриц, каждая из которых обрабатывает 64 детекторных сигнала;
- гистограммной памяти емкостью 128 Мбайт;
- интерфейсного модуля USB2.0;
- шины I2C для программирования входных порогов компараторов аналоговой электроники.

Все эти блоки смонтированы в крейте NIM на одной четырехслойной печатной плате с размерами 169 x 182 мм².

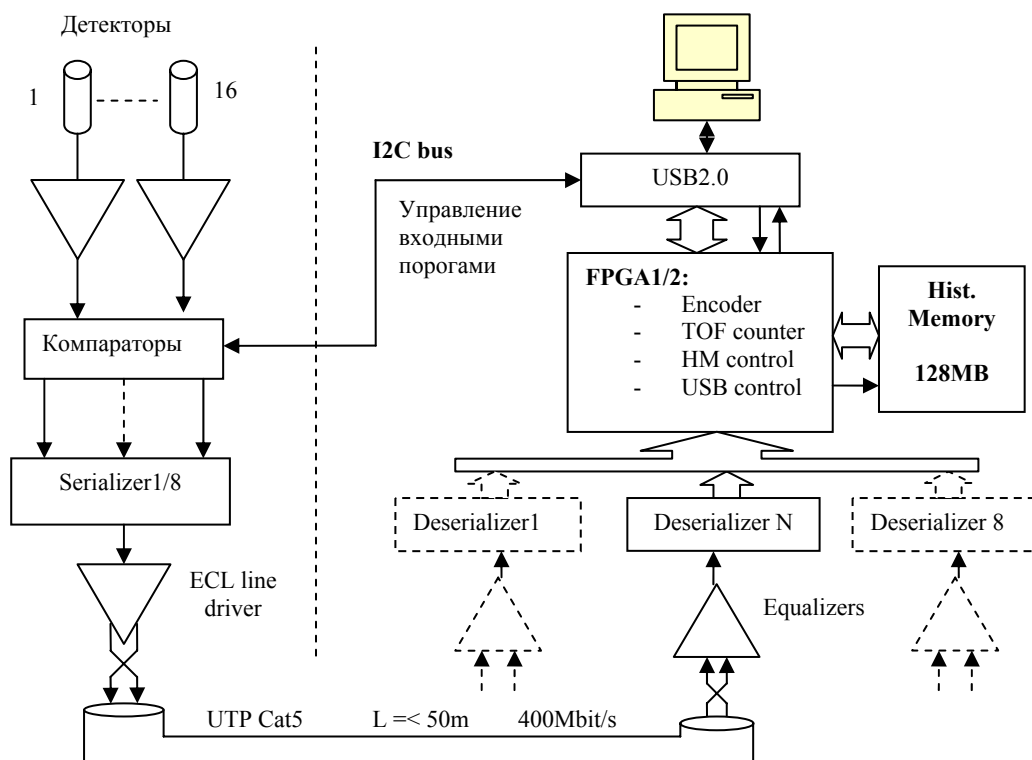


Рис.4. Структурная схема системы сбора и накопления данных

Помимо указанных блоков на плате имеется дополнительная электроника для подключения двух мониторинговых детекторов и один последовательный порт RS-232 с интерфейсом RS-422 для удаленного управления оборудованием окружения образца.

Предусмотрены также сигналы «Старт Реактора/Прерывателя» для работы во времяпролетном режиме и сигнал «Gate» для внешнего запуска и остановки режима накопления.

Микропрограммы (firmware), реализующие все функции и режимы работы системы записываются в FPGA с диска компьютера перед началом эксперимента.

Ожидаемая средняя пропускная способность системы – 100 Ксобытий/сек с каждого детектора в режиме накопления спектров в гистограммной памяти. Скорость обмена данными с персональным компьютером с учётом всех программных задержек составит около 25 Мбайт/сек.

4. Изготовление стеклянных элементов оптического тракта ГЭК-9а на реакторе ПИК. Разработана конструкция и изготовлены 20 штук клиновидных оптических зеркальных элементов (5 комплектов). Проведена их нейтронная аттестация.

Элемент представляет собой набор оптических клиновидных деталей с нанесенным многослойным зеркальным слоем (Ni-Ti) с $m=2$. Клиновидные детали имеют равномерную симметричную сходимост в горизонтальной плоскости в соответствии с расчетом. Изделия предназначены для склейки оптического нейтронного канала с размерами светового окна:

Входной размер 22.92 ± 0.01 мм x 140 ± 0.01 мм

Выходной размер 18.69 ± 0.01 мм x 140 ± 0.01 мм

Технология изготовления предусматривает, что срок службы изделия должен быть не менее 10 лет при комнатной температуре и нейтронных потоках порядка 10^7 н /см²/сек.

Проект 5.2

Повышение безопасности и улучшение параметров высокопоточного реактора ПИК

Руководитель проекта: проф. А.Н. Ерыкалов

I. (Исполнитель М.С. Онегин)

1. Рассчитаны пусковые зоны реактора ПИК (Рис.1). За счет меньшего числа ТВС в зоне (по сравнению с полной загрузкой) в таких конфигурациях можно не использовать выгорающие поглотители. Расчетные коэффициенты размножения приведены на Рис.2. Точность расчета пусковых зон оказывается лучше 0.4%.
2. В конфигурации с 15 ТВС были рассчитаны веса регуляторов (в тяжеловодном отражателе) и шторы. Сравнение расчетных весов с экспериментом приведено на Рис.3 ($\chi^2/n-1=0.94$). Определена эффективная доля запаздывающих нейтронов двумя методами.
3. Рассчитаны плотности потока нейтронов и энерговыделение в канале НЭК-5 реактора ПИК. Учен вклад запаздывающих гамма-квантов.

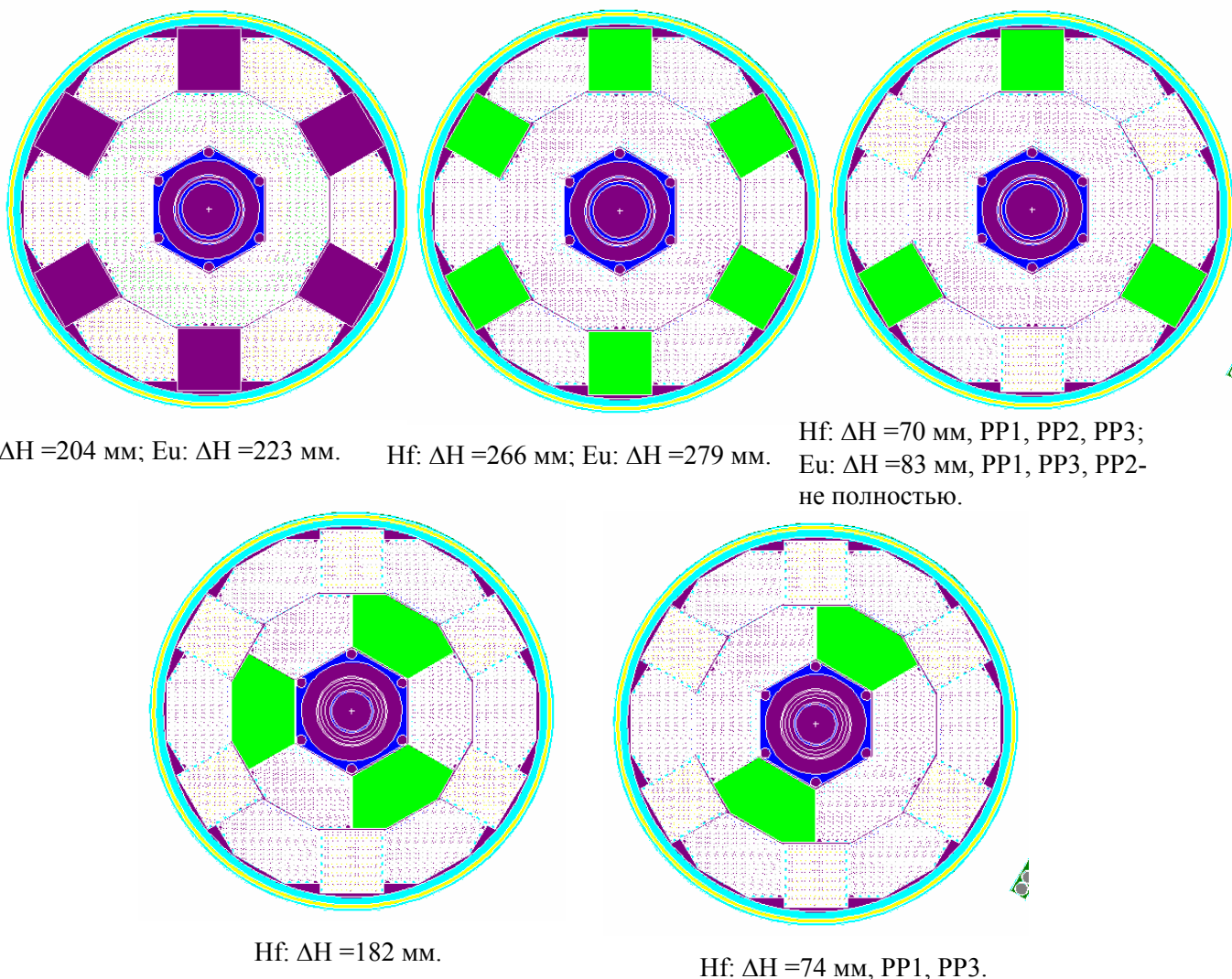
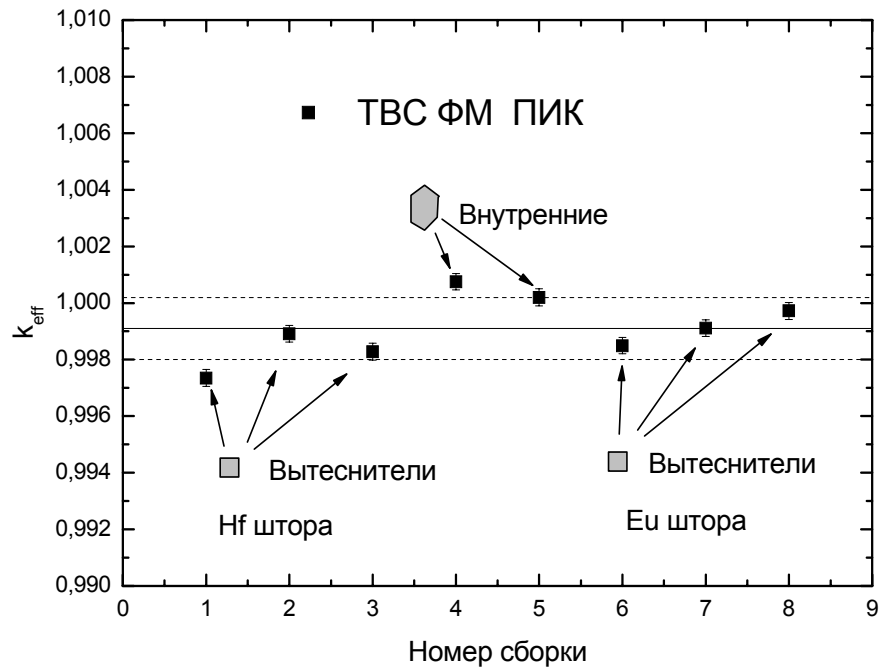


Рис.1. Картограммы загрузки для пусковых активных зон реактора ПИК (компьютерная модель). ΔH – окно шторок выполненных из Hf или Eu.



$$\bar{k}_{эфф}^{MCNP} = 0.9991(11).$$

Рис. 2. Расчетные эффективные коэффициенты размножения пусковых активных зон с алюминиевыми вытеснителями различной формы.

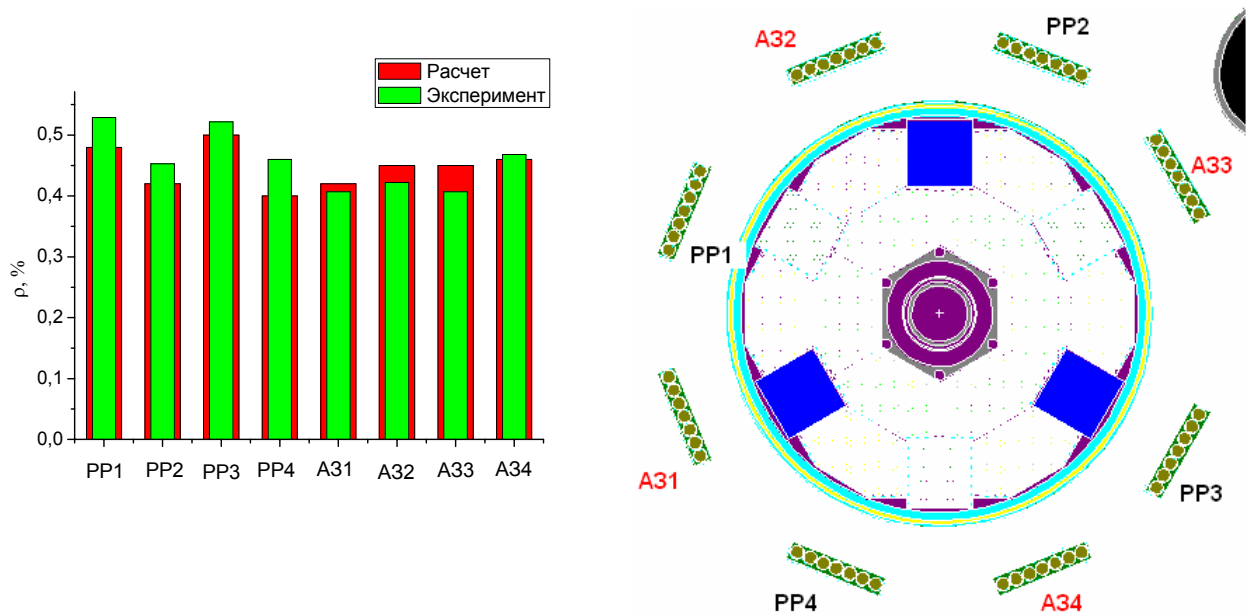


Рис. 3. Сравнение расчетных весов регуляторов с экспериментом (зона с 15 ТВС и 3 алюминиевыми квадратными вытеснителями).

II. (Исполнитель А.Н. Ерыкалов)Продолжено изучение уменьшения роста концентрации трития в тяжеловодном отражателе реактора ПИК путем сдвжки гелия. По этому вопросу сделана публикация в журнале Атомная Энергия и получено положительное решение на выдачу патента на изобретение на способ удаления гелия.

1. А.Н. Ерыкалов. “Замечания к статье Страхова Э.Б. и др. расчетная оценка накопления трития в тяжеловодных реакторах”. Атомная Энергия, 2007, т.102, вып.3, с.195–196.
2. А.И. Егоров, А.Н. Ерыкалов, И.А. Баранов. “Способ удаления ^3He из тяжеловодного контура ядерного реактора”. Решение Федерального института промышленной собственности от 10.09.2007 г.

Проект 5.3.

Проект импульсного нейтронного источника ИН-06 ИЯИ РАН. Оснащение ИН-06 приборной базой

Руководители проекта:

д.ф.-м.н. Э.А. Коптелов (ИЯИ РАН),
к.ф.-м.н. Р.А. Садыков (ИЯИ РАН)

В настоящее время в ИЯИ РАН формируется направление нейтронных исследований конденсированных сред и наносистем. Подготовлен перечень нейтронографических установок первой очереди, монтируемых и планируемых к созданию совместно с РНЦ-КИ, ФИАН, ПИЯФ, ИФВД на готовящемся к научной эксплуатации импульсном источнике тепловых нейтронов ИН-06 и работающем импульсном источнике эпитепловых и тепловых нейтронов РАДЭКС, созданном на основе модернизированной ловушки протонного пучка.

Нейтронографические установки для источника ИН-06:

1. «Горизонт»-рефлектометр с горизонтальной плоскостью рассеяния нейтронов для исследования поверхностей и наноструктур (ПИЯФ).
2. «Геркулес»- дифрактометр- для исследования веществ при высоком давлении до 100 кбар, включая исследования наводораживания образцов *in situ*.
3. «ДИАС» -дифрактометр- для исследования структуры объемных поликристаллов (РНЦ-КИ, ИФВД).
- 4.«МНС» –многоцелевая установка для определения структуры включающая блоки детектирования методом фокусировки по времени пролета, блок дифракции и блок малоуглового рассеяния (ФИАН).
5. «Кристалл»–дифрактометр для исследования структуры монокристаллов при различных температурах и давлениях.

Перечень нейтронографических установок для источника РАДЭКС:

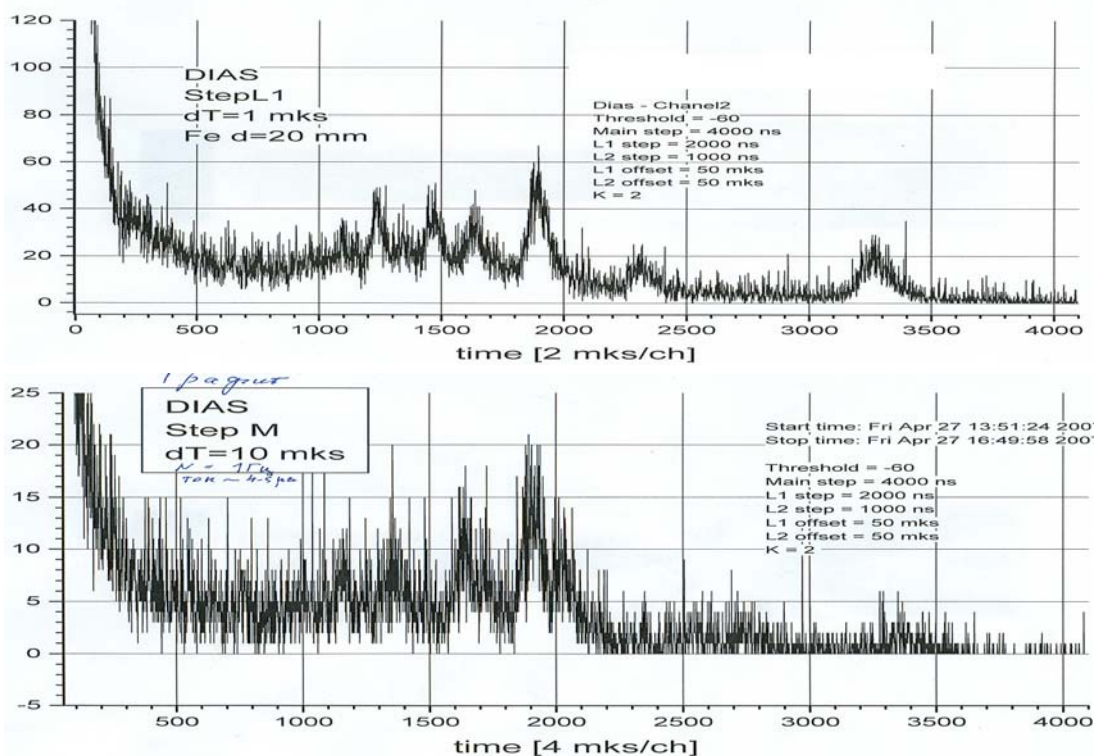
1. Спектрометр глубокого неупругого рассеяния эпитепловых нейтронов для исследования конденсированных сред.
2. Спектрометр-дифрактометр малоуглового рассеяния эпитепловых нейтронов для исследования структуры сильнопоглощающих нейтроны веществ.
3. Дифрактометр –аналог установки «ДИАС».

В 2007г. в рамках подготовки нейтронографических установок для источника тепловых нейтронов ИН-06 проведены измерения нейтронограммы поликристаллического железа на импульсном источнике нейтронов РАДЭКС с использованием макета дифрактометра общего назначения –«ДИАС», предназначенного для исследования структуры и фазового состава объемных поликристаллов. Макет представлял собой один из 32 каналов регистрации нейтронов, в качестве детекторов нейтронов в «ДИАС» используются счетчики тепловых нейтронов СНМ-16, работающие в пропорциональном режиме, эффективность регистрации тепловых нейтронов примерно 70%.

Измерения нейтронограммы поликристаллического железа были выполнены при работе импульсного нейтронного источника в режиме исследования нейтрон-ядерных взаимодействий – энергия 209 МэВ, длительность импульса 1 мкс, частота 50 Гц, импульсный ток – 2,4 мА.

Пролетная база определялась по известному положению пиков железа в d-координатах и составила 22,96 метра. По известной величине некогерентного сечения рассеяния железа был определен поток и спектр тепловых нейтронов на исследуемый образец ($2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2} \text{ сек}^{-1}$) и был отнормирован исходный дифракционный спектр.

Первые нейтронограммы поликристаллических железа и графита полученных на импульсном источнике нейтронов РАДЭКС-ИЯИ РАН с помощью времени пролета с использованием макетного варианта спектрометра ДИАС(ИЯИ РАН-РНЦ КИ) . (27 Апреля 2007г.)



Проект 5.4. Оценка и систематизация ядерных данных, информационное обеспечение исследований по ядерной спектроскопии

Руководитель проекта: д.ф.-м.н. И.А.Митропольский

1. Закончена и опубликована наиболее полная компиляция свойств ядерных состояний, возбуждаемых в реакциях с заряженными частицами, продолжающая соответствующую компиляцию данных из реакций с нейтронами.
2. В стандарте ENSDF проведена оценка ядерных данных для массовых цепочек с $A=135$ и с $A=133$.
3. Завершена разработка методологии анализа больших массивов оцененных данных и опубликованы первые результаты. Файл ENSDF представлен в виде реляционной базы данных, что дало принципиально новые возможности для анализа ядерных данных, проверки их согласованности и исправления неизбежных ошибок.

Проект 5.5. Нейтронные поляризаторы на основе поляризованного гелия-3.

Руководитель проекта: к.ф.-м.н. В.Ф.Ежов

Технология производства поляризованного ^3He достаточно сложна. В России нет постоянно действующих установок и, поэтому, до сих пор, поляризованный ^3He для

поляризации нейтронов на Российских реакторах не применялся. В ПИЯФ РАН создается постоянно действующая установка для производства поляризованного ^3He , который будет использоваться как для создания поляризованных нейтронных пучков на действующем реакторе ВВРМ и строящемся реакторе ПИК, так и для использования его в практической медицине.

Использование поляризованного ^3He в томографии открывает новые широкие возможности для диагностики легочных заболеваний, так как он заполняет внутренние полости в легких и позволяет наблюдать динамику насыщения легких воздухом, что недоступно традиционным методикам. С его помощью можно определить коэффициенты диффузии атомов ^3He , растворенного в крови. Эти коэффициенты отражают геометрию газовых структур внутри легких и дают возможность неповреждающей визуализации изменений в периферийных частях легких, а также ранней диагностики эмфиземы. Кислород разрушает поляризацию ^3He , поэтому измерение пространственного распределения времени релаксации поляризации позволяет определять содержание кислорода в периферийных частях легких. Все эти данные незаменимы при ранней диагностике астмы и хронических легочных заболеваний.

Наблюдение же за распространением в организме ^3He , растворенного в крови, позволяет существенно улучшить контраст и пространственное разрешение кровеносных сосудов, включая мельчайшие сосуды мозга.

На этапе 2007 г. производился монтаж установки для производства поляризованного ^3He . Начаты вакуумные испытания и наладка оборудования для накачки поляризации ^3He .

Координатор Программы

профессор Федоров В.В.