

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Отчет
по программе фундаментальных исследований
Отделения физических наук РАН

Нейтронные исследования
структуры вещества и фундаментальных
свойств материи

Москва
2011

“СОГЛАСОВАНО”

**Зам. академика-секретаря
Отделения физических наук РАН,
руководитель секции ядерной физики**

“УТВЕРЖДАЮ”

**Академик-секретарь
Отделения физических наук РАН**

Академик А. Н. Скринский

Академик В. А. Матвеев

« ____ » _____ 2011 г.

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

**Нейтронные исследования
структуры вещества и фундаментальных
свойств материи**

Головная организация:

ПИЯФ РАН (Гатчина)

Соисполнители Программы:

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

Новое среднемировое значение времени жизни нейтрона и Стандартная Модель

Представлен анализ экспериментов по измерению времени жизни нейтрона. Новый наиболее точный результат измерения времени жизни нейтрона 878.5 ± 0.8 с [1] отличается от среднемирового значения 885.7 ± 0.8 с [2] на 6.5 стандартных отклонений. В связи с этим был произведен анализ и Монте Карло моделирование экспериментов [3] и [4]. Найдены систематические ошибки около -6 с в обоих экспериментах. Новое среднемировое значение для времени жизни нейтрона составляет 879.9 ± 0.9 с [5,6]. Распределение экспериментальных данных после внесения поправок и дополнений новых экспериментальных результатов представлено на рис. 1.

Анализ нейтронного β -распада с новым среднемировым временем жизни нейтрона (879.9 ± 0.9 с) демонстрирует согласие со Стандартной Моделью. На рис. 2 представлены три различных способа извлечения СКМ матричного элемента $|V_{ud}|$: 1) из β -распада нейтрона, 2) из унитарности СКМ матрицы, 3) из сверхразрешенных ядерных $0^+ \rightarrow 0^+$ переходов. Результат определения $|V_{ud}|$ с новым среднемировым значением времени жизни нейтрона хорошо согласуется с другими результатами определения $|V_{ud}|$ в отличие от использования значения времени жизни нейтрона из PDG (2008).

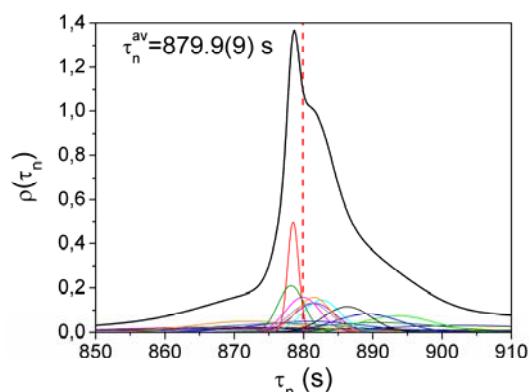


Рис. 1. Распределение результатов измерения времени жизни нейтрона после внесения поправок и дополнений новых экспериментальных результатов. Новое среднемировое значение для времени жизни нейтрона составляет 879.9 ± 0.9 с.

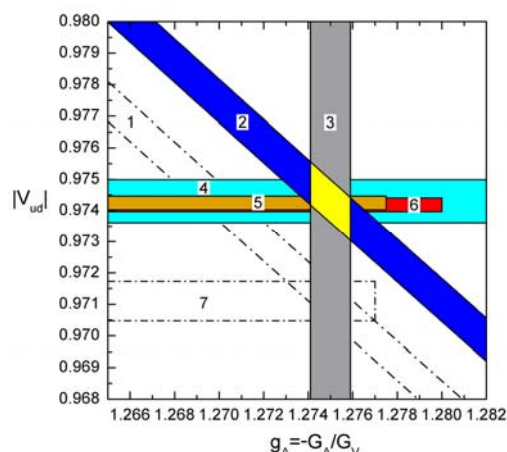


Рис. 2. CKM (Cabibbo-Kobayashi-Maskawa) элемент $|V_{ud}|$ в зависимости от аксиальной константы g_A для времени жизни нейтрона из PDG (2008) (область 1) и для нового среднемирового времени жизни нейтрона (область 2). Пересечение этих зависимостей со значением g_A (область 3) дает значение $|V_{ud}|$ (области 4 и 7 соответственно), 5 и 6 – области определения $|V_{ud}|$ из унитарности CKM и $0^+ \rightarrow 0^+$ ядерных переходов, соответственно.

- [1] A. Serebrov et al., Phys. Lett. B **605**, 72 (2005);
A.P. Serebrov et al., Phys. Rev. C **78**, 035505 (2008).
- [2] C. Amsler et al. (Particle Data Group), Phys. Lett. B **667**, 1 (2008).
- [3] W. Mampe et al., Phys. Rev. Lett. **63**, 593 (1989).
- [4] S. Arzumanov et al., Phys. Lett. B **483**, 15 (2000).
- [5] A.P. Serebrov, A.K. Fomin, JETP Lett. **92**, 271 (2010).
- [6] A.P. Serebrov, A.K. Fomin, Phys. Rev. C **82**, 035501 (2010).

Разработка новой установки для измерения времени жизни нейтрона с точностью 0,2с

- 1) Проведена оптимизация проекта спектрометра с помощью Монте-Карло моделирования на вычислительных кластерах. Выполнено моделирование всего экспериментального процесса с расчетом траектории движения каждого нейтрона. Была сделана экстраполяция ко времени жизни нейтрона, которая показала отсутствие систематической ошибки на уровне 0.13 с.
- 2) Разработана конструкторская документация внутренней криогенной части спектрометра. Дизайн нового гравитационного спектрометра УХН представлен на рис. 3.

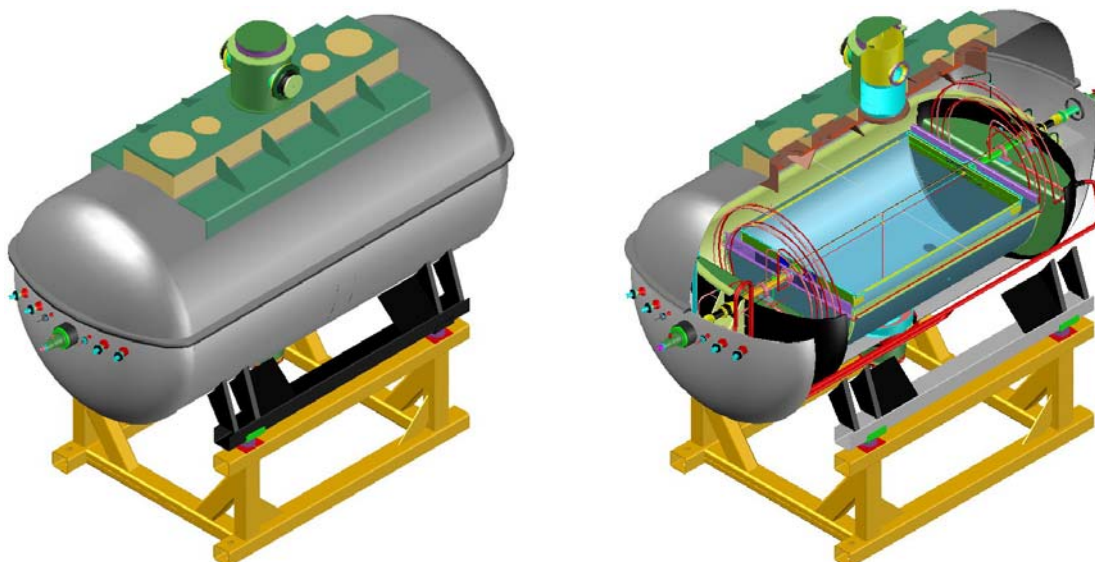


Рис. 3. Дизайн новой установки для измерения времени жизни нейтрона (нового гравитационного спектрометра): внешний вид и вид с разрезом.

Подпроект 1.1.2.

Измерение τ_n методом хранения ультрахолодных нейтронов в магнитной ловушке

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

1. Завершен первый этап эксперимента по измерению времени жизни нейтрона с использованием хранения ультрахолодных нейтронов (УХН) в магнитной ловушке, собранной из постоянных магнитов. Впервые для экспериментов, использующих магнитное хранение нейтронов, достигнута точность измерения 1.9 с., которая сравнима с точностью лучших экспериментов по измерению времени жизни нейтрона. Измеренное время жизни нейтрона составляет 878.2 ± 1.9 с, что подтверждает результат, полученный ранее в ПИЯФ с гравитационной ловушкой, и совпадает с предсказанием Стандартной модели.
2. Впервые реализована механическая система, позволяющая охлаждать ультрахолодные нейтроны непосредственно в процессе наполнения ими сосудов для проведения экспериментов. Создан пакет моделирования процесса охлаждения ультрахолодных нейтронов. Тестовые расчёты показали хорошее совпадение с результатами измерений процесса охлаждения. Полюсные наконечники и детали новой ловушки изготавливаются. Разработана методика сборки новой магнитной ловушки: ловушка собирается из полных секторов ловушки, собранных предварительно. Вакуумная камера разработана и в настоящее время идёт размещение заказа на изготовление.

Проект 1.2:

Поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона

Подпроект 1.2.1.

Поиск ЭДМ нейтрона магнитнорезонансным методом

Мультикамерный ЭДМ спектрометр

Руководители проекта: проф. А.П.Серебров
акад. РАН В.М. Лобашев
к. ф.-м. н. А.Н. Пирожков

Источник высокого напряжения — экспериментальная установка, разработанная и изготовленная в ПИЯФ РАН и предназначенная для получения высокого напряжения ± 200 кВ, что необходимого для проведения эксперимента по поиску ЭДМ нейтрона. Работа источника управляется компьютерной программой, токи утечки и пробой в высоковольтной системе контролируются. Для увеличения электрической прочности высоковольтный каскадный умножитель источника размещен в герметичном кожухе из нержавеющей стали в атмосфере элегаза (SF_6) при давлении $\sim 1,1$ атм. В настоящее время источник транспортирован в ИЛЛ, его работоспособность проверена, проведены испытания высоковольтного кабеля и вакуумного ввода. При этом токи утечки без нагрузки не превышают нескольких наноампер при выходном напряжении источника вплоть до 200 кВ. Испытания с нагрузкой — ситаловыми и кварцевыми изоляторами камер хранения УХН — показали, что для исключения пробоев по изоляторам при напряжении более 100 кВ требуется модификация формы высоковольтных электродов. На Рис. 1 и 2 представлены внешний вид каскадного умножителя и высоковольтный источник в сборе, смонтированный в экспериментальном зале реактора ИЛЛ.

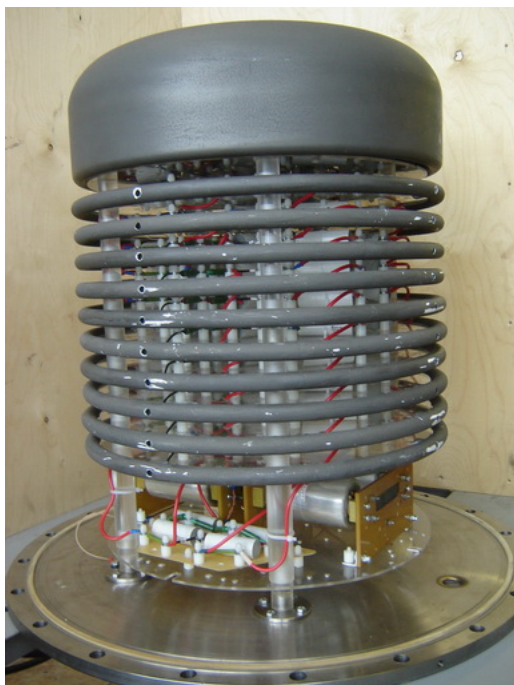


Рис. 1.



Рис.2.

В двухкамерном магнитнорезонансном спектрометре используется магнитометрическая система на основе восьми цезиевых магнитометров, которые окружают камеры хранения УХН. Показания этих магнитометров используются программой стабилизации

магнитного резонанса, позволяющей при длительном хранении УХН автоматически поддерживать резонансные условия. На установке получены резонансные кривые с временами хранения УХН до 50 сек. При имеющейся интенсивности ультрахолодных нейтронов и напряжении на высоковольтных электродах $\sim 150\text{KV}$ чувствительность установки составляет величину $\sim 2 \cdot 10^{-25} \text{e} \cdot \text{cm}$.

В настоящее время завершается разработка программы управления экспериментом, сбора и обработки данных. Для увеличения чувствительности установки требуется модификация высоковольтных электродов камер хранения УХН, что позволит увеличить напряженность электрического поля в рабочем объеме. С целью увеличения времени хранения УХН в ловушках требуется напыление на рабочие поверхности изоляторов и электродов покрытий с высокой граничной скоростью отражения УХН.

Уникальные возможности ЭДМ-установок (способность длительного хранения УХН и чувствительность магнитно-резонансной методики) позволяют использовать их и для решения других задач фундаментальной физики. В частности, мы применили двухкамерный ЭДМ спектрометр для поиска и получения новых ограничений на существование макроскопических псевдомангнитных сил между нуклонами, возможность существования которых обсуждается в теоретических работах (аксион с ненулевой массой). Теория предсказывает величину псевдомангнитного (аксионного) поля, рождаемого нуклонами вещества, пропорциональную плотности вещества, поэтому опыты проводились с алюминиевым (лёгким) и медным (тяжелым) центральным электродом. По результатам выполненных экспериментов сделана публикация (A.P.Serebrov et al., JETP Letters, 2010, vol.91, no.1, pp.6-10). Эти эксперименты требовали периодического реверса направления постоянного магнитного поля в камерах хранения УХН при неизменности его абсолютного значения. Это является очень трудной задачей, а точность этой процедуры и определяет чувствительность данного метода.

Альтернатива - оставить магнитные условия в резонансной области хранения нейтронов неизменными, но тогда требуется заменить «лёгкую» стенку камеры хранения УХН на «тяжелую», не возмущая магнитных условий. Коррелированный с такой процедурой сдвиг резонанса мог бы указывать на наличие искомого взаимодействия поляризованных УХН с псевдомангнитным полем вещества. Однако, механическое перемещение массивных камер хранения УХН внутри магнитных экранов может приводить к возмущениям магнитных условий. Проведенные нами эксперименты показали, что внутри экранов можно перемещать тяжелую платформу (несколько десятков килограммов) с немагнитными материалами (алюминий, чистая медь, пластмассы) по опорам, не нагружающим экраны; при этом с точностью до 0,1 нТ магнитные условия не возмущаются. Из этого следует, что в экранах мультикамерной установки можно еще на порядок, по сравнению с двухкамерным спектрометром, улучшить ограничения на величину псевдомангнитных сил. Такой опыт тоже не прост и требует специальных инженерных разработок для создания прецизионной механики точного перемещения массивных узлов установки в вакуумном объеме магнитных экранов. Возможность и целесообразность такого эксперимента в настоящее время обсуждается.

Подпроект 1.2.2.

Поиск ЭДМ нейтрона кристалл-дифракционным методом (проект ДЭДМ)

Руководитель проекта:
проф. В.В. Федоров

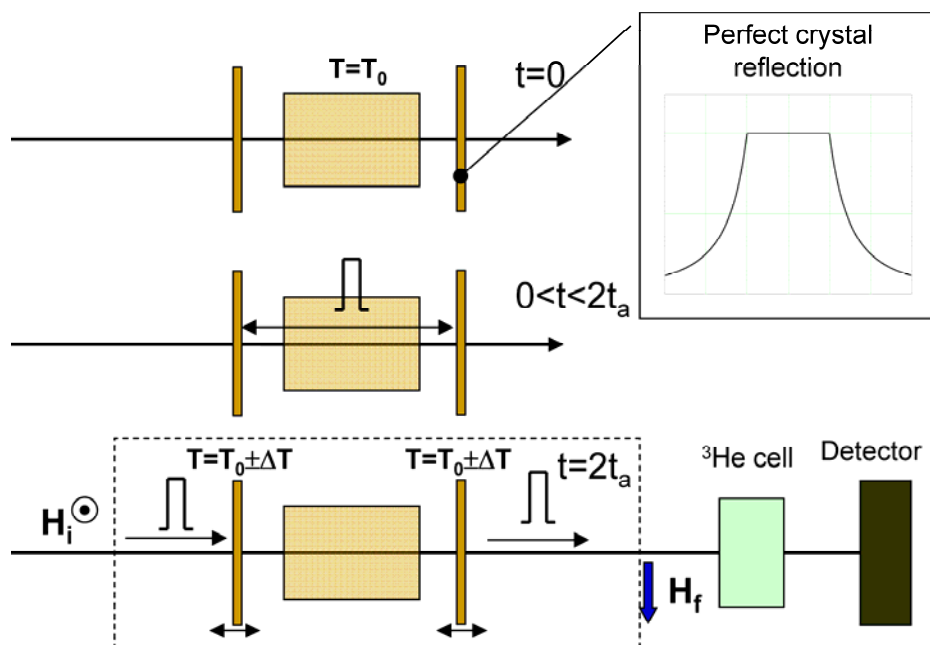
В данном проекте предлагается новый метод поиска электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона, основанный на взаимодействии ЭДМ с сильными внутрикристаллическими электрическими полями, действующим на нейтрон при

дифракции в нецентросимметричном (НЦС) кристалле. Величины этих полей могут достигать 10^9 В/см, что на 5 порядков выше величин, достижимых в лабораторных условиях. Недавно нами была предложена новая оригинальная идея эксперимента, основанная на поиске эффекта вращения спина нейтрона за счет ЭДМ при прохождении через НЦС кристалл. Предлагается выделять при помощи специального кристалла-монокроматора с регулируемым межплоскостным расстоянием нейтроны, прошедшие через кристалл с заданным параметром отклонения от условия Брэгга, т.е. в определенном электрическом поле, что позволяет управлять знаком и величиной этого поля, не подвергая воздействию сам рабочий кристалл.

За 2010г. закончена обработка тестового эксперимента, подготовлена статья и окончательный результат опубликован в журнале Physics Letters.

Были продолжены работы по подготовке к полномасштабному эксперименту, основанному на использовании кристалла кварца.

Подготовлено техническое задание на проектирование полномасштабной системы 3-х мерного анализа поляризации с размером входных и выходных окон $100 \times 100 \text{ мм}^2$ и внутренним диаметром 600мм. Начаты расчеты магнитных полей и криогенного оборудования данной системы.



В качестве развития и возможного улучшения данного метода рассмотрена возможность создания накопительного варианта установки (см. рисунок), позволяющего реализовать многократное прохождение нейтрона через один кристалл для увеличения эффекта, при использовании импульсного источника нейтронов. Показано, что при использовании кристаллов BSO, такой вариант построения эксперимента может дать выигрыш примерно на порядок по сравнению с проточным вариантом, основанным на использовании кристалла кварца.

Проект 1.3: Измерение асимметрий β -распада нейтрона

Руководитель проекта:
проф. А.П. Серебров

Было выполнено моделирование эксперимента, когда детекторы электронный и протонный, работающие в режиме антисовпадений, были расположены по оси соленоида

на таком расстоянии от гелиевого криостата, что напряженность магнитного поля в области положения детекторов была в два раза меньше чем в области распада. Что создавало эффект магнитного зеркала. Так без использования эффекта магнитного зеркала, систематическая ошибка в определении A составила величину порядка 10^{-3} , а использование магнитного зеркала подавляет систематическую ошибку на порядок.

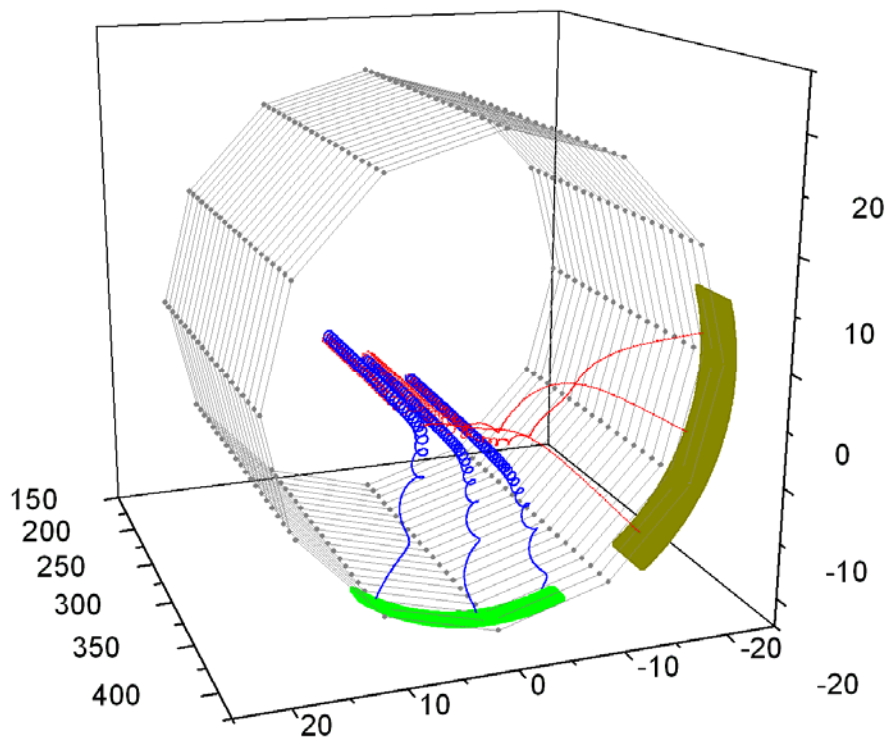


Рисунок 1. Траектории движения заряженных частиц в перекрещенных электрических и магнитных полях.

Для того чтобы снизить фоновую нагрузку на детекторах, было предложено использовать железное ярмо, которое позволяет искривлять силовые магнитные линии таким образом, что заряженные частицы выводятся из области пучка на достаточное расстояние. Помимо этого специальным выбором электростатической системы из-за эффекта дрейфа заряженных частиц в перекрестных электрическом и магнитном полях удаётся разделить протоны и электроны. Это позволяет использовать метод задержанных совпадений для выделения на детекторе сигнала от распада нейтрона. Траектории движения протонов и электронов из области распада на детекторы приведены на рисунке 1.

Была собрана тестовая система (рис.2.) в составе VME крейт 6U с источником питания, адаптер PCI-VME состоящий из PCI карты RI 217.02 и VME мастера модели RV 217.02, модуля задатчика временного интервала и распределителя тактовой частоты RV 217.14, двух измерительных модулей ADC-TDC RV 161.17, двухканального быстрого спектрометрического усилителя RV 165.13, компьютера и другого оборудования.

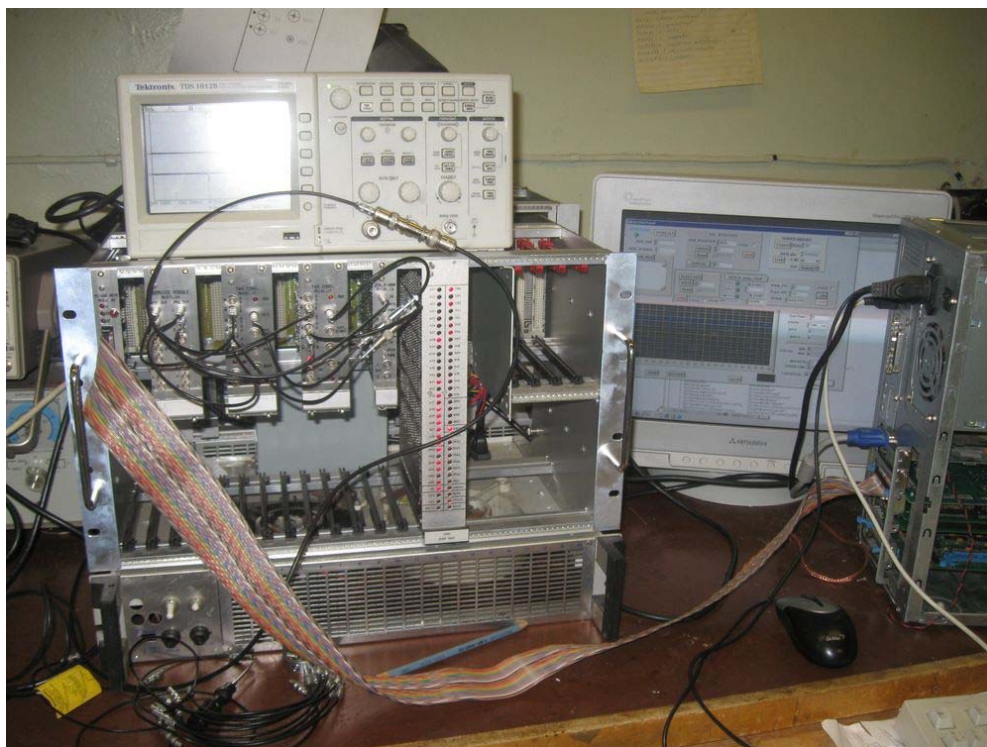


Рисунок 2. Тестовая система для испытаний электронной системы сбора и накопления данных.

Методика работы системы основана на использовании Единой временной шкалы для VCEX модулей ADC-TDC RV 161.17 при их синхронном старте от модуля RV 217.14 и работе встроенных TDC в модуле RV 161.17 от единой тактовой частоты. Каждое событие зарегистрированное модулем ADC-TDC RV 161.17 содержит абсолютное значение времени прихода события и его амплитуду, дальнейшее разборка событий перенесена на программный уровень и может производиться как on-line так и off-line.

Более подробное описание методики разбора событий при использовании Единой временной шкалы описан в препринте ПИЯФ 2354, 2531, 2630, 2751.

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)

Предлагается измерить сечение процесса $e^+e^- \rightarrow n \text{ anti } n$ (e^+e^- аннигиляция в пару нейтрон-антинейтрон) на новом e^+e^- коллайдере ВЭПП-2000 в Новосибирске с детектором СНД. Измерения будут проводится на пороге процесса при энергии до 2000 МэВ в с.ц.м.. По измеренному сечению вычисляется эффективный электромагнитный формфактор F_n нейтрона (комбинация электрического G_E и магнитного G_M формфакторов), а также отношение G_E/G_M электрического и магнитных формфакторов. Сегодня данные по формфактору F_n нейтрона вблизи порога практически отсутствуют и ВЭПП-2000 является единственным в мире местом, где такие измерения будут проводится.

Прошедший 2010 год является важным этапом в осуществлении проекта. В период с января по июнь проводились пробные эксперименты на светимость (рис.1-2)

с двумя детекторами КМД-3 и СНД с интегральной светимостью около 6 обратных пикобарн. Первый цикл – сканирование Ф-мезона и калибровка шкалы энергии коллайдера. Следующий эксперимент с детектором СНД (рис.3) - сканирование области энергии 1 – 2 ГэВ в с.ц.м.

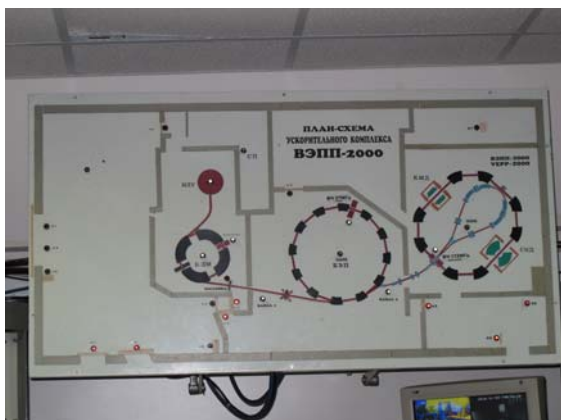


Рис.1 Мнемосхема комплекса ВЭПП-2000. Детектор СНД – в правом нижнем углу.



Рис.2 Пульт управления комплекса ВЭПП-2000.

Коллайдер ВЭПП-2000 в режиме работы на светимость работал с двумя пучками (электронов и позитронов) при выбранной фиксированной энергии (550, 600, 650, 700, 750, 800, 850, 900, 950 МэВ). Параллельно в бустере БЭП (рис.1) проводилось накопление (поочередно) электронов или позитронов. В момент т.н. перепуска запись данных блокировалась и очередная порция электронов или позитронов добавлялась в ВЭПП-2000. Такой режим поддерживался в течение многих часов или даже суток. Мгновенная светимость была порядка $10^{30} \text{ см}^{-2} \text{ сек}^{-1}$ и ограничивалась величиной токов или настройками коллайдера.

В ходе экспериментов проводилась отладка всех систем детектора, прежде всего, электроники и системы ON-LINE. Скорость счета записи составляла до нескольких сотен Герц, около половины из них - запуски от космических частиц. Использовалось 10 масок первичного триггера FLT1-FLT10, в каждую из которых включался набор т.н. аргументов, соответствующих разным детекторным системам. Например, запуск от событий упругого e^+e^- рассеяния включал в себя два сектора дрейфовой камеры, два сектора калориметра и высокий порог энерговыделения в калориметре $\sim 400 \text{ MeV}$. Запись проводилась циклами ("заходами") по 1 млн событий продолжительностью порядка 1 часа. каждый, всего несколько млрд событий. Запись велась на емкий $\sim 1 \text{ Tb}$ диск и далее все копировалось на ленту. Начата работа по созданию системы анализа данных. Сейчас в стадии отладки находятся пакеты SimG4App (моделирование физических процессов в СНД с записью данных в том же формате, что и в экспериментальных данных), SimRecApp (обработка моделирования) и RecApp (обработка эксперимента с записью результатов в Ntuples). В дальнейшем экспериментальные и моделированные данные будут обрабатываться, например, в пакете RAW. Настроена также визуализация анализа в виде гистограмм или картинок событий (рис.4).

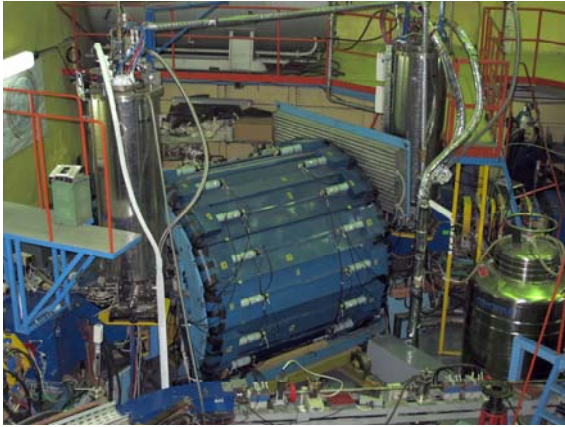


Рис.3 Фотография СНД. Два вертикальных цилиндра – криостаты фокусирующих соленоидов ВЭПП-2000.

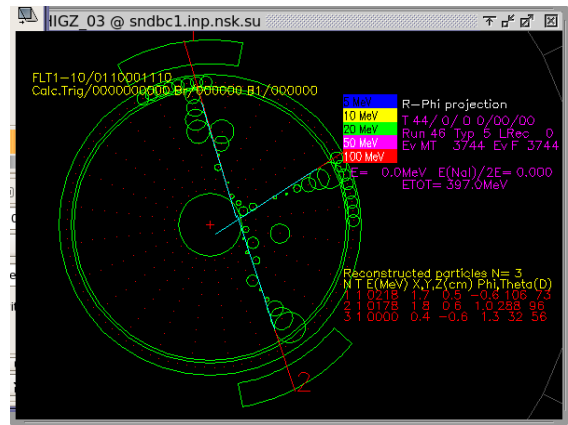


Рис.4. Ожидаемый вид событий $e^+e^- \rightarrow n \bar{n}$, $p \bar{p}$ на пороге процесса. Показана R- ϕ проекция в дрейфовой камере.

Анализ записанных данных реально еще не начат, так как не завершено создание программного обеспечения. Остаются серьезные проблемы в реконструкции треков, как в R- ϕ проекции так и в R-Z – не достигнута пока расчетная пространственная точность. Частично это объясняется неточными калибровками и не адекватным моделированием работы дрейфовой камеры. Также не в рабочем состоянии у нас находится третичный (программный) триггер, задача которого отбирать заведомо ‘хорошие’ кандидаты событий на запись и обрабатывать заведомо ‘плохие’ события. Применение третичного триггера во время эксперимента улучшит качество записываемых событий. Во время анализа – ускорит чтение и обработку данных.

Серьезно тормозит анализ маломощность компьютерной фермы. Сегодня задание на простейший анализ 1 млн записанных первичных событий составляет несколько часов и превышает время их записи. Ускорение здесь будет достигаться как усовершенствованием процедуры задания и увеличением мощности фермы.

Началась подготовка параметров для выделения событий нуклон-антинуклонных пар. Для выделения событий протон-антипротон при предельно низкой энергии, когда обе частицы останавливаются в вакуумной камере (рис.4) будет разработан параметр для выделения событий с вершиной из нескольких треков, выходящих из области вакуумной камеры. При более высокой энергии протоны проходят через дрейфовую камеру с большими ионизационными потерями. Следует отметить, при низкой энергии <10 МэВ нейтрон-антинейтронные события могут давать сигнатуру подобную протонным событиям на рис.4.

Для выделения нейтрон-антинейтронных событий сделано моделирование временной задержки сигнала в разных частях детектора, прежде всего, в калориметре NaI(Tl), а также в аэрогелевом черенковском счетчике. Последняя система уже сегодня имеет временное разрешение 2-3 нсек, что позволяет использовать ее для выделения нейтронов на пороге. К сожалению, специфика нашего эксперимента такова, что только ~50% событий дают сигнал в черенковском счетчике, что вносит большую систематику. В калориметре NaI(Tl) эффективность регистрации близка к 100% (рис.5), однако здесь требуется подавить фоновые запуски детектора, число которых пока на 2 порядка превышает расчетный сигнал. Рис.5 показывает перспективность использования времени пролета в калориметре для выделения нейтрон-антинейтронных событий. Показанные черным цветом пики на рис.5 соответствуют разным точкам аннигиляции антинейтронов – вакуумная камера, аэрогель, первый слой NaI(Tl). Можно заключить, что имеются хорошие возможности для выделения нейтронных событий по времени пролета.

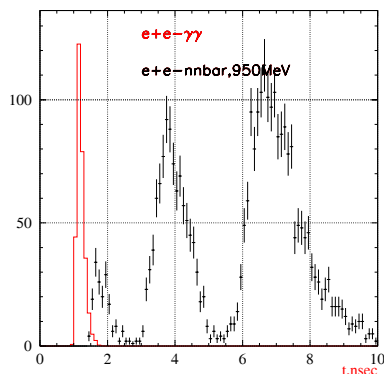


Рис.5 Временная диаграмма задержки срабатывания калириметра СНД в процессе $e^+e^- \rightarrow n \bar{n}$. $E=945$ МэВ.



Рис.6. Начата настройка CO-CO² лазера для калибровки энергии пучков коллайдера ВЭПП-2000.

Для многих экспериментов на ВЭПП-2000, и для измерения нуклонных формфакторов в частности, требуется точное знание энергии пучков коллайдера на уровне 0.3 МэВ или около $1.5 \cdot 10^{-4}$ (относительная точность энергии). Для ВЭПП-2000 можно будет использовать два метода: метод резонансной деполяризации и метод обратного комптоновского рассеяния. Если первый метод хорошо освоен и уже начал тестироваться, то работы по второму методу только начинают разворачиваться. Приобретен CO₂-лазер достаточной мощности и начаты работы по его включению и последующей установке на коллайдер (рис.6). Также получен германиевый детектор для регистрации обратно-рассеянного комптона ~ 1 МэВ.

Таковы вкратце основные результаты работ по данному проекту.

Список докладов и публикаций за 2010 год по теме проекта.

1. Ачасов М.Н., Белобородов К.И., Бердюгин А.В., Богданчиков А.Г., Букин Д.А., Васильев А.В., Голубев В.Б., Димова Т.В., Дружинин В.П., Кооп И.А., Король А.А., Кошуба С.В., Пахтусова Е.В., Середняков С.И., Силагадзе З.К., Скринский А.Н., Шатунов Ю.М., Штоль Д.А., Измерение сечения процесса $e^+e^- \rightarrow \eta \pi^+\pi^-$ в области энергий $\sqrt{s} = 1.04 - 1.38$ ГэВ со сферическим нейтральным детектором на коллайдере ВЭПП-2М., JETP Lett. (2010) Vol. 92 pp 84-88.
2. E.G.Avdeeva *, A.G.Bogdanchikov, A.A.Botov, D.A.Bukin, A.V.Vasiljev, V.M.Vesenev, V.B.Golubev, T.V.Dimova, V.P.Druzhinin, A.A.Korol, S.V.Koshuba, A.E.Obrazovsky1), E.V.Pakhtusova, S.I.Serednyakov, A.A.Sirotkin, I.K.Surin, Yu.V.Usov, P.V.Filatov, and A. G.Kharlamov, New Tracking System of the SND Detector, Phys. Atom. Nucl. (2010) Physics of Atomic Nuclei, 2010, Vol. 73, No. 11, pp. 1931–
3. М.Н. Ачасов, К.И. Белобородов, А.В. Бердюгин, А.Г.Богданчиков, Д.А.Букин, А.В.Васильев, В.Б.Голубев, Т.В.Димова, В.П.Дружинин, И.А.Кооп, А.А.Король, С.В.Кошуба, Е.В.Пахтусова, С.И.Середняков, З.К.Силагадзе, А.Н.Скринский, Ю.М.Шатунов, Поиск процесса $e^+e^- \rightarrow K^+K^-\pi^0$ в экспериментах со Сферическим нейтральным детектором на ВЭПП-2М, ЖЭТФ (2010) ЖЭТФ, т. 134, стр. 33, JETP, vol.110, p.26.
4. M.N.Achasov, K.I.Beloborodov, A.V.Bergyugin, A.G.Bogdanchikov, A.D.Bukin, D.A.Bukin, T.V.Dimova, V.P.Druzhinin, V.B.Golubev, I.A.Koop, A.A.Korol, S.V.Koshuba, A.P.Lysenko, E.V.Pakhtusova, S.I.Serednyakov, Yu.M.Shatunov, Z.K.Silagadze, A.N.Skrinsky, and A. V.Vasiljev, Search for lepton flavor violation process $e^+e^- \rightarrow e\mu$ in the energy region $\sqrt{s}=984-1060$ MeV and $\phi \rightarrow e\mu$ decay, Phys. Rev. D (2010) 81, 057102 .

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

В 2010 году времени для эксперимента по измерению Р-нечетной асимметрии вылета гамма-квантов в реакции $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}^* \Rightarrow \gamma \Rightarrow ^7\text{Li}(o.c.)$ на реакторе ИЛЛ (Гренобль, Франция) не было предоставлено.

В этом году обрабатывались результаты эксперимента 2009 года, одна работа опубликована и еще одна публикация направлена в печать.

Проект 2.2.

Исследование сверхразрешенных β -переходов и определение констант слабого взаимодействия в области нейтронно-избыточных ядер

Руководитель проекта:

д. ф.-м. н. И.А.Митропольский

Конструирование и подготовка спектрометрического комплекса для прецизионного изучения β -спектров нейтронноизбыточных ядер.

План-2010: Произвести доработку магнитных экранов магнитной призмы. Произвести финальную сборку магнитной призмы спектрометра в целом. Продолжить изготовление коллиматорной и фокусирующей частей спектрометра.

Выполнено в 2010г.:

- 1) Проведена доработка и сборка экранов магнитной призмы спектрометра (поз.3 на рис.1). Начата финальная сборка магнитной призмы (поз.2, рис.1) Определена необходимость доработки полюсов (поз.1, рис.1) призмы (шлифовка).
- 2) Продолжено изготовление коллиматорной и фокусирующих линз и прилегающих узлов вакуумного тракта (поз.4,5,6 на рис.1).

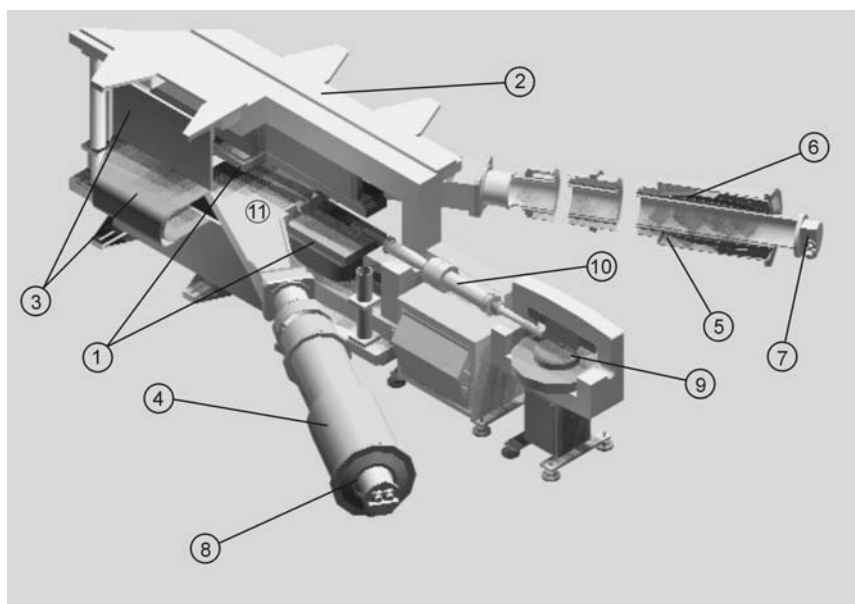


рис.1

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 №7 реактора ВВР-М полностью подготовлена экспериментальная установка для исследований угловых и энергетических распределений нейтронов деления ^{239}Pu тепловыми нейтронами. Выполнена пробная серия измерений и обработка полученных данных.

На тепловом пучке №1 реактора ВВР-М завершены систематические исследования эмиссии пар нейтронов при делении ^{239}Pu в зависимости от энергетических порогов их регистрации и относительных углов их разлета. Выполненная обработка полученных экспериментальных данных в рамках теоретических предположений, использовавшихся ранее для обработки аналогичных данных при делении ^{233}U , ^{235}U показала, что примесь нейтронов, испускаемых делящейся системой составляет в этом случае около 14%. Полученные результаты принципиально важны для изучения динамики процесса деления при низких энергиях возбуждения и были представлены и обсуждены на Международном семинаре ISSIN-18 (ОИЯИ).

Проект 3.2:

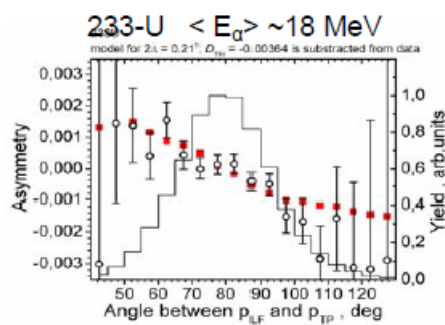
Экспериментальные исследования тройной Т-нечетной корреляции эмиссии легких заряженных частиц и нейтронов в делении $^{233,235}\text{U}$ и ^{239}Pu холодными поляризованными нейтронами

Руководитель проекта:

проф. Г.А. Петров

В 2010 году в рамках широкого международного сотрудничества завершены исследования нового физического эффекта Т-нечетной асимметрии эмиссии легких

заряженных частиц (LCP) в тройном делении $^{233,235}\text{U}$ и ^{239}Pu (высоко поточный реактор ИЛЛ, Гренобль, Франция) и Т-нечетного эффекта асимметрии эмиссии γ -квантов в бинарном делении ^{235}U (реактор ВВР-М ПИЯФ РАН), вызванном холодными поляризованными нейтронами. Все полученные к настоящему времени экспериментальные данные позволили разработать и обосновать модель формирования так называемых TRI и ROT-эффектов Т-нечетной асимметрии при делении тяжелых поляризованных ядер. Основные предположения этой модели заключаются в возникновении вращения делящейся ядерной системы вблизи вершины барьера деления вокруг направления ее поляризации и его сохранении вплоть до разрыва. На этапе ускорения образовавшихся осколков (за времена $\sim 10^{-21}$ сек) это вращение практически прекращается из-за быстрого роста момента инерции. Однако, поворот оси симметрии уже разделившихся систем $^{234,236}\text{U}^*$ и $^{240}\text{Pu}^*$ приводит к небольшому, но экспериментально наблюдаемому, сдвигу угловых распределений заряженных частиц в тройном делении (ROT-эффект) (в случае деления $^{236}\text{U}^*$ это смещение составляет $\sim 0,22^\circ$, а в случае деления $^{234}\text{U}^*$ - только $\sim 0,02^\circ$). В дополнение к этому, образовавшиеся при разрыве LCP кроме ядерных и кулоновских сил испытывают совместное действие центробежных сил, сил Кориолиса и инерционных сил при замедлении вращения. Их совместное действие приводит к появлению асимметрии эмиссии LCP относительно плоскости, образованной осью деления и направлением поляризации (TRI-эффект). Результаты расчетов для деления $^{234}\text{U}^*$ в сопоставлении с экспериментом (2010 г.) показаны ниже.



ROT-эффект Т-нечетной асимметрии эмиссии LCP

2010 год
 $\sigma(J=3)/\sigma(J=3)=1.5$
 $\text{DTRI} = -0.0036(1)$
 $2\Delta \text{exp} = 0.021(4)$

	J = 2	K = 0	K = 1	K = 2
J = 3				
= 0		0.032	0.050	0.102
= 1		0.021	0.038	0.090
= 2		-0.013	0.004	0.056
= 3		-0.070	-0.053	0.0006

Расчет величин ROT-эффекта для различных возможных комбинации (J,K):
 $J = (5/2 \pm 1/2)$

Анализ результатов исследований ROT-эффекта для γ -квантов деления $^{236}\text{U}^*$ (реактор ВВР-М ПИЯФ РАН) полностью подтверждает предположение о вращении поляризованных делящихся систем. При этом полученная оценка угла поворота оси деления очень близко совпадает с соответствующей оценкой для LCP.

Однако было показано, что в отличие от LCP, ROT-эффект для γ -квантов при делении никак не связан с существованием «мгновенного» излучения вблизи момента разрыва делящейся поляризованной ядерной системы (как это утверждалось в первой работе Г.В. Данильяна и др.). Он является прямым следствием закона сохранения ориентированного углового момента, возникающего у осколков деления при разрыве делящегося ядра и приводящего к угловой анизотропии эмиссии квантов из осколков относительно их оси разлета. Как показывает впервые выполненный теоретический анализ, аналогичный эффект возможен и для нейтронов, сопровождающих деление поляризованных тяжелых ядер. Получена оценка величины соответствующего эффекта Т-нечетной асимметрии и его угловая зависимость.

Проект 3.3:

Спектрометрия по времени замедления нейтронов в свинце

Руководитель проекта:

В ИЯИ РАН совместно с ГНЦ РФ-ФЭИ (г. Обнинск) проводилась обработка данных измерений сечений деления резонансными нейтронами всех изотопов америция (^{241}Am , ^{243}Am) и кюрия (^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{246}Cm , ^{247}Cm , ^{248}Cm), полученных на спектрометре третьего поколения по времени замедления нейтронов в свинце СВЗ-100 в ноябрьском сеансе 2009 года. Точные данные об этих сечениях необходимы для решения проблемы трансмутации младших актинидов – наиболее радиотоксичных отходов ядерной энергетики. Интерес к ядрам этой группы также связан с нерешенными проблемами физики переходных состояний при делении сильно деформированных ядер.

В качестве детекторов осколков деления использовались быстрые ионизационные камеры с делящимися слоями массой от 4 до 20 мкг. Причем, использовались специально разработанные по конструкции и компоновке камеры деления, с целью увеличения быстродействия и лучшей адаптацией к условиям работы в интенсивных нейтронных полях СВЗ-100.

Для мониторингирования потока нейтронов и калибровки временной шкалы СВЗ-100 использовались камеры деления со слоями ^{235}U , ^{239}Pu и ^{240}Pu .

В настоящий момент на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце (СВЗ-100) ИЯИ РАН:

1. Завершена обработка результатов измерений сечения деления ядер ^{236}U ; результаты измерения сечения деления ядер $^{242\text{m}}\text{Am}$ и ^{245}Cm (в области энергии нейтронов $E_n = 0,03 \text{ эВ} - 20 \text{ кэВ}$) занесены в международную базу данных (<http://www.nndc.bnl.gov>) Брукхейвенской лаборатории США. Динамический диапазон спектрометра класса СВЗ расширен до области эпитепловых энергий нейтронов (анализируемая область времен замедления нейтронов до 6 мс).
2. Завершена обработка результатов измерений сечения деления для ядра $^{246, 247, 248}\text{Cm}$ в области энергии нейтронов $E_n = 0,1 \text{ эВ} - 20 \text{ кэВ}$. Получены значения параметров площади резонанса A_f и делительной ширины Γ_f для нижних s-нейтронных резонансов.
3. Продолжается обработка экспериментальных данных для первичной калибровки СВЗ-100. В качестве детекторов применялись пропорциональные счетчики с образцами Al, Sb, Ag, Cu, Fe.
4. Продолжается работа по анализу экспериментальных данных по ^{240}Pu с целью сравнения их с данными, полученными на других спектрометрах.
5. Получены новые экспериментальные данные с использованием детекторов СВЗ (пропорциональные счетчики с образцами Sb, Ag и камеры деления со слоями ^{235}U и ^{240}Pu) на 30-метровой зоне времяпролетного нейтронного спектрометра импульсного источника РАДЭКС.

Публикации:

1. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "Исследования подбарьерного деления ядер на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце (СВЗ-100): $^{244}\text{Cm}(n, f)$ ". Препринт ИЯИ 1212/2009 март 2009.
2. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "Нейтронные сечения деления ядер $^{242\text{m}}\text{Am}$ и ^{245}Cm ". *Атомная энергия*, т.106, вып.2, февраль 2009г.
3. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "Исследования деления ядер на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце (СВЗ-100): $^{243}\text{Cm}(n, f)$ ". Препринт ИЯИ 1231/2009 август 2009.
4. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "Нейтронное сечение деления ^{243}Cm ". *Атомная энергия*, т.107, вып.2, август 2009г.
5. A. A. Alekseev, A. A. Bergman, A. I. Berlev, E. A. Koptelov, B. F. Samylin, A. M. Trufanov, B. I. Fursov, and V. S. Shorin. " ^{243}Cm NEUTRON FISSION CROSS SECTION", *Atomic Energy*, Vol. 107, No. 2, 2009, UDC 621.039.51.
6. A.A. Alekseev, A.A. Bergman, A.I. Berlev, E.A. Koptelov, B.F. Samylin, A.M. Trufanov, B.I. Fursov, V.S. Shorin "Neutron-Induced Fission Cross Section of Uranium, Americium and Curium Isotopes", *International Atomic Energy*

- Agency INDC(CCP)-0451 Distr. MN, INDC International Nuclear Data Committee. Progress report - Research Contract 14485 Coordinated Research Project on Minor Actinide Neutron Reaction Data (MANREAD) December 2009
7. А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "Исследования подбарьерного деления ядер на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце СВЗ-100: $^{246}\text{Cm}(n, f)$ ". Препринт ИЯИ 1248/2010 март 2010.
 8. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М. Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "СЕЧЕНИЕ ПОДБАРЬЕРНОГО ДЕЛЕНИЯ ^{246}Cm ". "Ядерная физика" (январь 2010 г.).
 9. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов "Нейтронный комплекс ИЯИ РАН. 1. Спектрометр нейтронов по времени замедления в свинце (СВЗ-100)" Препринт ИЯИ РАН 1288/2010, ИЮЛЬ 2010 МОСКВА.
 10. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, Б.Ф. Самылин, А.М., М.И. Свирин, Труфанов, Б.И. Фурсов, В.С. Шорин. "СЕЧЕНИЕ ПОДБАРЬЕРНОГО ДЕЛЕНИЯ ^{244}Cm ". *ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА*, 2010, том 73, №9, с. 1533–1544
 11. А.И. Берлев, В.М. Климаков, Е.В. Кузнецова, В.Л. Кузнецов, И.В. Мологин, В.И. Разин "Исследование спектра нейтронов на поверхности спектрометра нейтронов по времени замедления в свинце (СВЗ-100)". Препринт ИЯИ РАН 1263/2010, ИЮЛЬ 2010 МОСКВА.
 12. А.А. Алексеев, А.А. Бергман, А.И. Берлев, Э.А. Коптелов, А.С. Егоров, Б.Ф. Самылин, А.М., Б.И. Фурсов, В.С. Шорин "Исследования деления ядер на нейтронном спектрометре по времени замедления в свинце СВЗ-100 ИЯИ РАН: $^{246}, ^{247}, ^{248}\text{Cm}(n, f)$ ". Препринт ИЯИ РАН 1270/2010, ОКТЯБРЬ 2010 МОСКВА.
 13. Алексеев А. А., Бергман А. А., Берлев А. И., Коптелов Э. А. (ИЯИ РАН, г. Москва), Егоров А. С., Самылин Б. Ф., Фурсов Б. И., Шорин В. С. (ГНЦ РФ "ФЭИ им. А.И. Лейпунского", г. Обнинск). "Параметры S — резонансов в сечениях деления $^{246} - ^{248}\text{Cm}$ ". Журнал *Атомная энергия* 2010 г. (в печати).
 14. Алексеев А. А., Бергман А. А., Берлев А. И., Коптелов Э. А. (ИЯИ РАН, г. Москва), Егоров А. С., Самылин Б. Ф., Фурсов Б. И., Шорин В. С. (ГНЦ РФ "ФЭИ им. А.И. Лейпунского", г. Обнинск). "Нейтронные сечения деления и резонансные интегралы $^{246} - ^{248}\text{Cm}$ ". Журнал *Атомная энергия* 2010 г. (в печати).

Проект 3.4: Нейтронно-избыточные ядра

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

В 2010 г. произведен запуск новой универсальной лазерной ионизационно-спектроскопической системы "в линию" с масс-сепаратором ИРИС на пучке протонов синхроциклотрона ПИЯФ. С использованием новой универсальной лазерной ионизационно-спектроскопической системы (УЛИСС) в режиме "on-line" проведены первые измерения изотопических сдвигов радиоактивных изотопов ^{119}In и ^{121}In . Данная система с установкой ИРИС на пучке синхроциклотрона ПИЯФ представляет собой уникальный комплекс, позволяющий исследовать ядра вблизи границ нейтронной и протонной устойчивости, а также получать интенсивные пучки радиоактивных изотопов высокой чистоты для исследований по физике твердого тела и медицины. Полученные значения величин изотопических сдвигов для стабильных изотопов Tl, а также для радиоактивных изотопов ^{119}In и ^{121}In совпадают в пределах погрешности с величинами, известными из литературных данных. На рис. 1 показан лазерный резонансный сигнал, а на рис. 2 приведена измеренная сверхтонкая структура радиоактивного изотопа ^{119}In . Проведенные эксперименты показали, что использование новой лазерной системы не вносит систематических ошибок в измерения изотопических сдвигов и сверхтонкой структуры и что она может быть использована для исследования формы ядер длинных цепочек изотопов.

Установку УЛИСС также планируется использовать в экспериментах на одном из нейтронных пучков реактора ПИК для изучения формы крайне удаленных нейтронно-избыточных нуклидов.

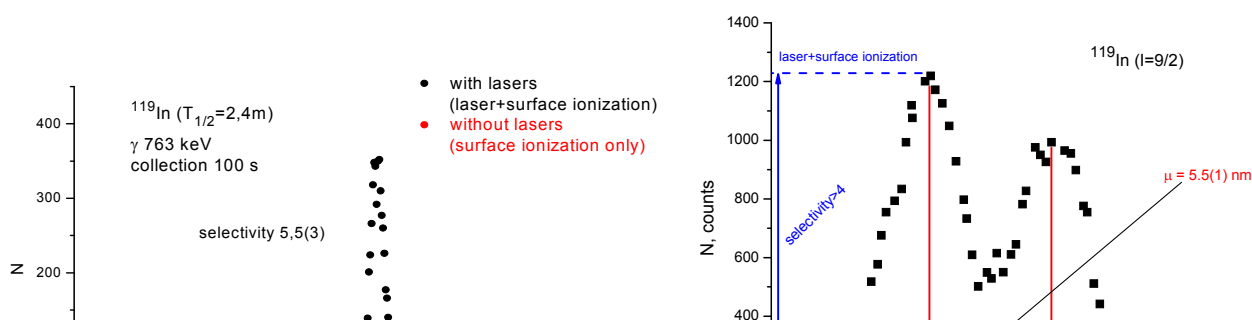


Рис. 1. Лазерно-резонансная (черные точки) и поверхностная (красные точки) ионизация ^{119}In .

Рис. 2. Сверхтонкая структура ^{119}In .

В рамках коллаборации ПИЯФ - LNL - GANIL – ISOLDE для получения нейтронно-дефицитных изотопов Tl на установке ИРИС разработана мишень из карбида урана высокой плотности и проведены первые on-line исследования прототипа мишени с толщиной мишенного вещества около 5 г/см². Измерен выход изотопа ^{190}Tl . Толщина изготавливаемой рабочей мишени будет в 10 раз больше (54 г/см²), что обеспечит высокие выходы, достаточные для проведения эксперимента по измерению изотопических сдвигов и сверхтонкой структуры изотопов таллия удаленных от полосы бета-стабильности.

Публикации:

1. T.E. Cocolios, A.N. Andreyev, S. Antalic, A. Barzakh, B. Bastin, J. Bauscher, I.G. Darby, W. Dexters, D.V. Fedorov, V.N. Fedosseev, K.T. Flanagan, S. Franchoo, G. Huber, M. Huyse, M. Keupers, U. Köster, Yu. Kudryavtsev, E. Man'ek, B.A. Marsh, P. Molkanov, R.D. Page, M.D. Seliverstov, A.M. Sjoedin, I. Stefan, J. Van de Walle, P. Van Duppen, M. Venhart, S. Zemlyanoy, *Structure of ^{191}Pb from α - and β -decay spectroscopy*, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **37**(2010) 125103.
2. B.A. Marsh, L.-E Berg, D.V. Fedorov, V.N. Fedosseev, O.J. Launila, M. Lindroos, R. Losito, F.K. Osterdahl, T. Pauchard, I. Pohjalainen, U. Sassenberg, M.D. Seliverstov, A.M. Sjoedin, G. Tranström, *The ISOLDE RILIS pump laser upgrade and the LARIS Laboratory*. Hyperfine Interactions (2010) **196**:129–141.

Проект 3.5

Исследование влияния резонансного окружения на значения наблюдаемых периодов полураспада возбужденных состояний атомных ядер

Руководитель проекта:
к. ф.-м. н. Ю.Е. Логинов

Получено модельное описание измеренного нами ранее (“Письма в ЖЭТФ, т.87, вып.1, с. 7-9, 2008 г.”) увеличения наблюдаемого значения периода полураспада изомера $^{119\text{m}}\text{Sn}$ в условиях резонансного окружения. Опубликовано в ”Ядерная Физика”, 2010, т. 73, №1, с. 36-40.”

Проект 3.6

Ядерно-физические методы элементного и изотопного анализа

Руководители проекта:
к. ф.-м. н. Ю.Е.Логинов, к. ф.-м. н. В.Г.Зиновьев

Разработана методика расчета распределения нейтронного потока в объемных жидких образцах органического происхождения с целью увеличения точности и воспроизводимости результатов НАА нефти и нефтепродуктов. Опубликовано статья «Нейтронно-активационный анализ больших образцов сырой нефти» в сборнике трудов девятой международной научно-практической конференции «Высокие технологии, исследования, промышленность», 22-23 04 2010, Ст. Петербург т.4 стр.228-234

Разработана методика и программное обеспечение для расчета эффективности планарного детектора для регистрации гамма спектров объемных образцов.

Разработан электронный справочник для извлечения характеристик аналитических нуклидов для НАА из файлов ENSDF.

Направление 4:

Исследование структуры, динамики и неординарных свойств вещества нейтронными методами

Проект 4.1.

Исследование сильно коррелированных фермионных систем, мультиферроиков с магнито-электрическими свойствами с помощью дифракции нейтронов.

к.ф.-м.н. Ю.П. Черненко
к.ф.-м.н. О.П. Смирнов
к.ф.-м.н. В.И. Федоров
к.ф.-м.н. С.В. Гаврилов
д.ф.-м.н. И.В.Голосовский

4.1.1. Исследования мультиферроиков RMn_2O_5 методом рассеяния поляризованных нейтронов. кфмн С.В. Гаврилов, кфмн И.А.Зобкало

Методом трехмерного анализа поляризации рассеянных нейтронов обнаружены две системы магнитных дифракционных отражений в EuMn_2O_5 при температурах $5 < T < 35$ К. Это свидетельствует о том, что в температурном интервале, где существует ферроэлектрическое упорядочение, магнитная структура описывается двумя волновыми векторами $(1/2 \ 0 \ 1/3)$ и $(1,2 \ 0 \ \tau)$, а не одним, как в других RMn_2O_5 . Результаты готовятся к публикации.

4. 1.2 . Завершение исследований магнитной структуры мультиферроика $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ Проведение измерений магнитной восприимчивости. Публикация результатов.

д.ф.-м.н. Голосовский И. В.

Проведенные в 2010 году измерения магнитной восприимчивости (SQUID) в мультиферроике $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$, показали отсутствие спонтанного ферромагнитного момента. Однако обнаружено сильное отклонение от закона Кюри-Вейсса в области высоких температур. В связи с вновь открывшимися обстоятельствами приготовленная для публикации статья (нейтронография и резонансное магнитное рассеяние), была задержана. Краткое содержание первой версии опубликовано в трудах 43-ей Зимней школы ПИЯФ, 2009. Готовится к публикации статья с новыми результатами.

4.1.3. Нейтронодифракционные исследования монокристаллов смешанных мультиферроиков $\text{Nd}_x\text{Tb}_{(1-x)}\text{Fe}_3(^{11}\text{BO}_3)_4$. д.ф.-м.н. Голосовский И. В.

Проведены измерения на SQUID'e на 4 кристаллах смешанных мультиферроиков $\text{Nd}_x\text{Tb}_{(1-x)}\text{Fe}_3(^{11}\text{BO}_3)_4$. Обнаружены максимумы восприимчивости на постоянных полях ниже критического поля около 0.9 Т, однако ожидаемая особенность в окрестности критического поля обнаружена. Эти результаты отчасти согласуются с литературными данными. Основной вопрос – является ли наблюдаемый магнитный порядок в редкоземельной подрешетке собственным или индуцированным не решен. В этой связи проведены первые эксперименты по нейтронной дифракции (ILL, D15, D20). Результаты обрабатываются

4.1.4. Исследование взаимодействий, приводящих к температурной эволюции геликоидального магнитного порядка в соединении $^{160}\text{Gd}_2\text{BaCuO}_5$.
кфмн Зобкало И.А.

Результаты обработки экспериментальных данных, полученных для $^{160}\text{Gd}_2\text{BaCuO}_5$ в интервале температур 1,3 – 30 К, позволяют сделать вывод, что магнитные моменты ионов Cu упорядочиваются при $T = 12$ К. Это приводит к поляризации магнитных моментов ионов Gd. Наблюдаемая несоразмерная магнитная структура с волновым вектором $(0\ 0\ \tau)$ возникает в результате конкуренции нескольких взаимодействий. При температуре 5.1 К обменное взаимодействие Gd-Gd становится доминирующим и приводит к стабилизации соразмерной магнитной структуры с волновым вектором $[0\ 0\ 1/2]$. Результаты готовятся к публикации.

4.1.5. Рентген-дифракционные исследования спин-фонного взаимодействия в парамагнитной фазе гольмия. кфмн Черненко Ю.П.

Киральность играет важную роль в физике. Например, она является необходимой предпосылкой существования мультиферроиков. В металлическом гольмии киральность $\mathbf{C} = [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]$, где $\mathbf{S}_i$ и $\mathbf{S}_j$ спины ближайших соседних атомов в направлении волнового вектора $\mathbf{k}_s$, проявляется как спиральная магнитная структура (право- и левовинтовая) с $\mathbf{k}_s = [001]$. Магнитоупругое взаимодействие должно приводить к взаимодействию киральности с фононами. Обычно это взаимодействие очень слабое, однако вблизи точки фазового перехода (в гольмии $T_N = 131$ К) и при импульсе фонона $\mathbf{q} = \mathbf{k}_s$ киральные флуктуации должны сильно влиять на энергию фонона. Теория предсказывает смягчение поперечных акустических фононов. Цель работы как раз и состояла в том, чтобы экспериментально подтвердить предсказание. На синхротроне ESRF (Гренобль, Франция) измерялись температурные зависимости энергии поперечного акустического фонона в небольшом диапазоне импульсов $\mathbf{q}$ вблизи $\mathbf{k}_s$ и интервале температур 120 – 140 К. К сожалению, точности измерений за выделенное на эксперимент в ESRF время не хватило для получения убедительного подтверждения теоретического предсказания.

Проект 4.2.

**Исследование спиновой киральности в интерметаллидах,
спиновой структуры многослойной системы,
магнитного рассеяния в тяжелофермионных соединениях,
мезоструктуры функциональных материалов**

ПИЯФ РАН при участии Самарского ГУ
Проф. А.И. Окорочков

4.2.1. Изучение магнитных спиральных структур методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

кф-мн Москвин Е.В.

Этапы 2010 г. :

Исследования спиновой спиральной структуры в системе FeGe методом малоуглового рассеяния нейтронов

Интерметаллическое соединение FeGe кристаллизуется в три полиморфные формы с моноклинной, гексагональной и кубической кристаллическими структурами соответственно. В исследованиях использовался кубический полиморф, изоструктурный хорошо известному соединению MnSi. Исследования проводились в магнитном поле с помощью малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.

В ходе экспериментов установлено, что два из исследованных образцов имеют противоположную киральность: один — правовинтовой ($T_N = 278.6\text{K}$), а другой — левовинтовой ($T_N = 278.5\text{K}$). Полученные значения температур Нееля для обоих образцов находятся в хорошем согласии с литературными данными [1,2].

В случае, когда магнитное поле направлено вдоль вектора рассеяния, появляется пик от спирали с волновым вектором $k = 0.009\text{\AA}$. Было проведено сканирование в поле при разных температурах $T = 272.7, 274.7$ и 276.7K в поисках А-фазы [3]. Было установлено, что при $T = 276.69\text{K}$ пик переходит в перпендикулярное направление при $H = 23\text{мТ}$ и затем появляется на прежнем месте в поле 40мТ . Такое поведение является типичным для А-фазы в MnSi [3].

Если внешнее магнитное поле направить вдоль пучка нейтронов, то вместо одного пика, соответствующих той же длине спирали k Появление этих пиков происходит при значениях температуры и поля, соответствующих области А-фазы для поперечной геометрии. Похожее поведение наблюдалось в работе [4]. Такая картина рассеяния трактовалась авторами вышеупомянутой работы как проявление скирмионной решетки. Однако нам видится такое явление следствием линейной интерференции от трех видов доменов с коллинеарной ориентацией спиралей внутри доменов при ориентации самих доменов под углом 120° друг относительно друга. Для более точного установления истины требуются дополнительные, более точные измерения.

Литература:

- [1] B Lebech, J Bernhard, and T Freltoft, J. Phys. Condens. Matter **1**, 6105-6122 (1989).
- [2] P Pedrazzini, H Wilhelm, D Jaccard, T Jarlborg, M Schmidt, M Hanfland, L Akselrud, H Q Yuan, U Schwarz, Yu. Grin, and F Steglich, Phys. Rev. Lett. **98**, 47204 (2007).
- [3] Y Ishikawa and M Arai, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 2726-2733 (1984).
- [4] S Mühlbauer, B Binz, F Jonietz, C Pfleiderer, A Rosch, A Neubauer, R Georgii, and P Böni, Science **323**, 915-919 (2009).

4.2.2. Продолжение исследования взаимосвязи структурной и магнитной киральности в кубических магнетиках без центра инверсии (с взаимодействием Дзялошинского – Мория). Рост серии левых и правых кристаллов системы MnSi и $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$.

Дядькин В.А., Григорьев С.В..

Для проверки гипотезы того зависит ли кристаллографическая киральность от концентрации металла-допанта в соединениях моносилицидов переходных металлов, или же она определяется кристаллом — зародышем в методиках роста кристаллов, использующих зародыш, на первом этапе мы синтезировали несколько серий монокристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с использованием зародышей с правой киральностью и концентрациями $x = 0.08$ и $x = 0.10$ и зародыша с левой киральностью и концентрацией $x = 0.25$. Киральность зародышей была определена до процесса синтеза. Так же для того, чтобы определить возможность существования кристаллов MnSi с правой киральностью мы синтезировали моносилицид марганца с использованием вышеуказанных образцов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ в качестве правого зародыша $x=0.08$ и левого зародыша $x = 0.25$. Этот последний синтез оказался возможным благодаря тому факту, что соединения имеют ту же самую кристаллографическую структуру и очень близкие постоянные решетки зародышей и выращиваемых кристаллов. Для роста кристаллов использовался метод Чохральского и были приготовлены стехиометрические смеси из компонент высокой чистоты. После этого соединения были расплавлены в медной подставке с водяным охлаждением в аргоновой атмосфере с давлением 0.6 бар и 2.5 бара для соединений $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ и MnSi , соответственно. Нагрев обеспечивался трехарковой электрической дугой. Осуществлялось вращение кристалла по часовой стрелке, в то время как медная чашка с расплавом вращалась в противоположном направлении. Синтезируемый кристалл медленно вытягивали из расплава со скоростью 12 мм/ч.

В качестве зародышей использовали заранее аттестованные кристаллы $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ с $x=0.08$ и 0.25 , которые определены как структурно правый и структурно левый, соответственно. Они обозначены на Рис. 1.. как кристаллы первого поколения (parental generation, P). В дальнейшем были выращены кристаллы второго поколения (F1) с концентрациями кобальта $x=0.08$ и 0.50 , которые использовались в качестве зародышей для кристаллов третьего поколения (F2). Нужно отметить, что все исследуемые кристаллы демонстрируют совершенную кристаллографическую структуру. Схематически процедура выращивания кристаллов показана на рисунке 1. Эксперименты показали, что метод Чохральского производит

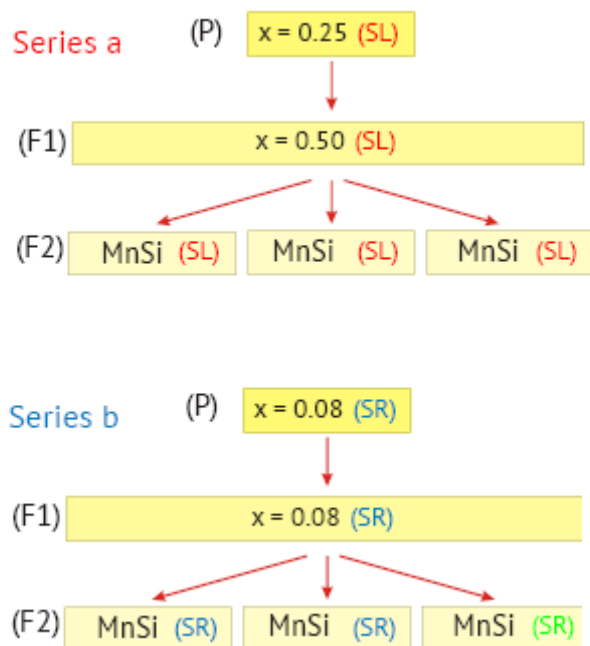


Рис.1. Две серии кристаллов MnSi , выращенных (а) - из кристаллографически левого кристалла (P) (серия а) и (б) - из кристаллографически правого кристалла (P) (серия б). Для удобства правые кристаллы обозначены голубым цветом, а левые – красным.

кристаллы той же киральности как и киральность зародыша. Важно отметить, что из множества серий последовательного выращивания образцов с $x = 0, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30$, и 0.50 наблюдался случай сбой киральности и случаи рацематности с $\sim 20\%$ вклада кристаллитов иной киральности как кристаллографической, так и магнитной. Иными словами, наследственная передача такого свойства как киральность от поколения к поколению иногда может перебиваться в ходе синтеза из-за неустановленных причин. Примером может служить третье поколение (F2) серии b на рисунке. Только два чистых право-киральных кристалла MnSi были получены, а один из кристаллов оказался рацематным, т.е. правым с небольшой примесью левого кристаллита (обозначен зеленым цветом).

На основании проведенных экспериментов можно заключить, что киральность кристаллов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ не зависит от концентрации кобальта, но определяется киральностью кристалла-зародыша, и таким образом киральность является наследственным свойством в этих кристаллах, выращенных с использованием зародыша. Мы также впервые показали, что кристаллы MnSi могут реализоваться не только с левой, но и с правой киральностью. В то же время некоторые неконтролируемые условия синтеза способны изменить киральность кристалла в процессе роста, но это легко выясняется проверкой киральности. Использование наследственности дает возможность нацеленного роста кристаллов требуемой киральности. Схематический вид решетки MnSi разной киральности показан на рисунке 2.

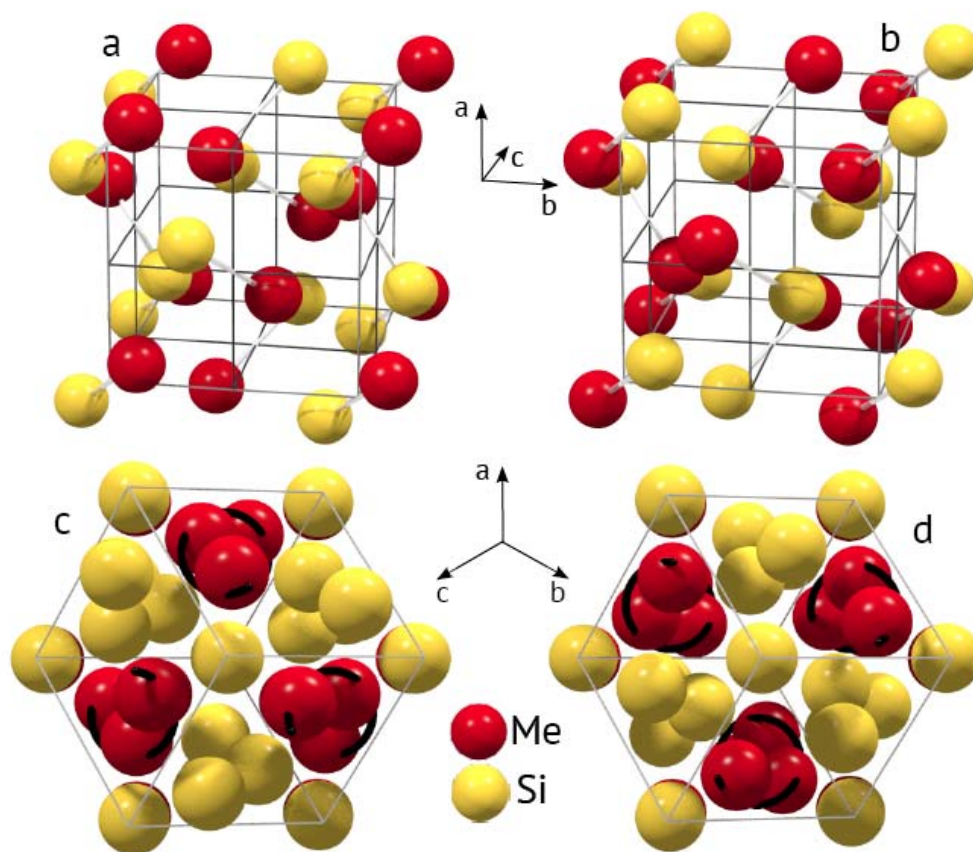


Рис.2. Вид на элементарную ячейку MnSi кубического кристалла Б-20 (пространственной группы $P2_13$) с произвольной точки пространства (a, b) и вдоль одной из осей $\langle 111 \rangle$ (c, d) для двух киральных структур: (a, d) левой с $u_{\text{Mn}} = 0.138$ и $u_{\text{Si}} = 0.846$ и (c, d) правой с $u_{\text{Mn}} = 0.865$ и $u_{\text{Si}} = 0.155$, где u - параметр в системе векторов, заданных их выражением. Красные шары - атомы марганца, желтые - атомы кремния. Внутри ячейки находится по четыре атома Mn и Si.

4.2.3. Исследование спонтанной и наведенной полем киральности спиновой спирали в Dy пленке методом рефлектометрии поляризованных нейтронов.

Четвериков Ю.О.

Методом рефлектометрии поляризованных нейтронов исследовано взаимодействие Дзялошинского-Мория на поверхности в многослойной системе Y/Dy. Металлические итрий-диспрозиевые многослойные системы упорядочиваются в магнитном смысле в когерентную спиновую спираль, проникающую через всю многослойную структуру. В нашем исследовании определялась средняя киральность такой магнитной структуры для нескольких образцов с различной толщиной слоев Dy и Y, причем в работе использовался метод рефлектометрии поляризованных нейтронов. Оказалось, что магнитное поле, прикладываемое в плоскости многослойной системы, приводит к ненулевой киральности в системе, которая по-видимому сцеплена с нескомпенсированной магнитной спиралью внутри одного слоя. Величина киральности имеет сложное поведение в зависимости от температуры и магнитного поля. Можно показать, что она определяется конкуренцией взаимодействий – РККИ взаимодействия внутри слоя диспрозия и РККИ взаимодействия между соседними слоями диспрозия. Вся совокупность экспериментальных данных позволяет провести реконструкцию и схематическую визуализацию спиновой структуры в такой многослойной системе. Несмотря на сложную зависимость средней киральности от температуры и магнитного

поля, можно показать, что угол поворота между интерфейсными плоскостями спинов двух соседних слоев имеет один и тот же знак для всех образцов и всех экспериментальных условий. Мы предполагаем, что именно антисимметричное взаимодействие Дзялошинского-Мория проявляется через знак угла поворота, что в результате и приводит к ненулевой средней киральности системы.

Эксперименты по рефлектометрии поляризованных нейтронов проводились на установке NERO реактора FRG-1 исследовательского центра ГКСС, Геестхахт (Германия). Использовался пучок поляризованных нейтронов с начальной поляризацией $P_0=0.975$, длиной волны $\lambda = 0.435$ нм, отношением $\Delta\lambda / \lambda = 0.02$ и расходимостью пучка 2.5 мрад. Ось c образца-многослойки была установлена перпендикулярно падающему пучку (Рис.1.) Рассеянные нейтроны регистрировались двух-координатным позиционно-

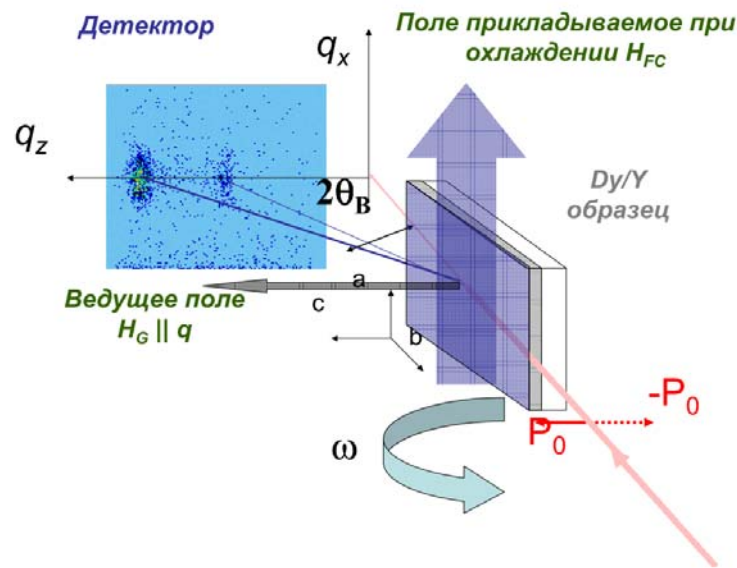


Рис. 1. Схема эксперимента по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов на многослойной системе. Ведущее магнитное поле H направлено перпендикулярно к падающему пучку k_i вдоль оси (c). Дополнительное поле (до 900 мТл) прикладывалось вертикально в плоскости многослойной системы при охлаждении (FC режим).

чувствительным детектором с 128×128 ячеек. Интенсивность рассеяния измерялась в температурном диапазоне от 30 до 190 К с точностью лучшей, чем 0.1 К. Внешнее магнитное поле 1 мТл было приложено перпендикулярно падающему пучку и поляризация пучка адиабатически следовала направлению магнитного поля. Дополнительное поле (до 900 мТл) прикладывалось вертикально и в плоскости многослойной системы при охлаждении (FC режим). В такой конфигурации с поляризацией, направленной вдоль малого магнитного поля ($P_0 \parallel Q$), соответствующие интенсивности рассеяния, ($\Gamma^+ = I(Q, +P_0)$ и $\Gamma^- = I(Q, -P_0)$), связаны с рассеянием на правых и левых доменах, соответственно. Средняя киральность, пропорциональная разнице числа левых и правых спиралей, измерялась как поляризационно зависящая асимметричная часть магнитного рассеяния [1]. Так мы вводим параметр киральности, прямо связанный с измеряемыми интенсивностями и разницей между числом левых и правых доменов: $\gamma = (\Gamma^+ - \Gamma^-) / (\Gamma^+ + \Gamma^-)$.

Образец был расположен таким образом (Рис.1.), что ось c находилась почти перпендикулярно падающему пучку т.е. в так называемой скользящей геометрии. Волновой вектор сверхрешетки и несоразмерной спиральной структуры ориентирован перпендикулярно плоскости сверхрешетки, т.е. вдоль оси c . Из-за несовершенства поверхности слоев существует небольшая разориентация различных объемов сверхрешетки порядка 1-5 градусов. Таким образом условие Брэгга могло быть выполнено

в диапазоне малоуглового рассеяния для нескольких углов сразу. В нашем случае эта особенность позволяет в каждом измерении наблюдать несколько пиков, образованных взаимодействием нейтронов со спиновым геликоидом и сверхрешеткой.

В заключение следует отметить, что нами установлен механизм связи магнитного поля, приложенного в плоскости, и знака средней киральности системы для D_y/Y образцов с различными толщинами D_y и Y слоев. Далее, мы предполагаем, что спиновая киральность обусловлена взаимодействием ДМ, которое, в свою очередь, появляется в системе из-за нарушения инверсионной симметрии на магнитно-немагнитных интерфейсах, подобно явлениям, наблюдаемым на поверхности слоистых систем в работах [2,3]. Мы также приводим экспериментальные доказательства наличия ДМ взаимодействия на интерфейсах D_y/Y многослойной структуры. Обнаруженные явления способны существенно поменять концепцию магнетизма в наноструктурах, поскольку они вводят в рассмотрение новое важное взаимодействие для всех наноструктур, включая сносослойные системы. В частности, ДМ взаимодействие представляет фундаментальный вклад в теоретические рассуждения в многослойных системах, приводящие к неколлинеарному расположению спинов на поверхностях и интерфейсах [4].

Литература:

- [1] S.V.Grigoriev, Yu.O. Chetverikov, D.Lott, A. Schreyer, Phys. Rev. Lett. 100
- [2] M.Bode, M. Heide, K. von Bergmann, P. Ferriani, S. Heinze, G. Bihlmayer, A. Kubetzka, O. Pietzsch, S. Blugel, R. Wiesendanger, Nature 447 (2007) 05802
- [3] E.Y.Vedmedenko 21, L.Udvardi, P.Weinberger, R. Wiesendanger, Phys.Rev. B 75 (2007) 104431.
- [4] J.T. Haraldson, R.S. Fishman, Phys.Rev.B 81 (2010) 020404 (R).

4.2.4. Исследование мезоструктуры и спиновой динамики в системах со структурными фазовыми переходами методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов:

кф-мн Рунов В.В

Этап 2010

Обработка данных по температурной зависимости дисперсии спиновых волн в аустенитной и мартенситной фазах в сплаве Гейслера $Ni_{2+x+y}Mn_{1-x}Ga_{1-y}$ с $x=-0.18$, $y=0.14$. Публикация результатов.

Сплавы Гейслера $Ni_{2+x+y}Mn_{1-x}Ga_{1-y}$ относятся к функциональным материалам с магнитной памятью формы. В системе существует сильное взаимодействие магнитных и структурных подсистем, определяющее функциональные свойства материала и привлекающее исследователей. Получена обширная информация по атомарной структуре, механическим и магнитным свойствам, надатомной структуре (наши работы по SAPNS, ПИЯФ РАН), фононным возбуждениям. Однако спиновая динамика в этих материалах практически не исследована, т.к. в мартенситной фазе, из-за поливариантности, монокристаллические образцы превращаются в поликристаллы и возникают значительные технические трудности в измерениях на трехосных нейтронных спектрометрах. Ранее нами методом SAPNS (Рунов и др. Письма в ЖЭТФ, 74(12), (2001), 668; Physica B 335, (2003)109) было показано, что в данном сплаве термомагнитной обработкой в мартенситной фазе может быть реализовано состояние близкое к моновариантному и, следовательно, возможны прямые измерения температурной зависимости дисперсии спиновых волн на трехосных нейтронных спектрометрах. В этих же работах были даны оценки константы спин-волновой жесткости в мартенситных фазах, полученные SAPNS методом по измерениям в наклонных магнитных полях лево-правой асимметрии рассеяния нейтронов поляризованных по и против магнитного поля (Рис. 1). Спин-волновая динамика в ферромагнетиках описывается выражением:

$$\hbar\omega(q)=\Delta + D\cdot q^2 + \dots \quad (1),$$

где Δ – щель в спектре спиновых волн, D – константа спин-волновой жесткости. В свою очередь, параметр D может быть определен из измерений угла отсечки Θ_0 малоуглового

рассеяния нейтронов из выражения $\Theta_0 = E/Dk^2$, где E – энергия нейтронов, k – волновой вектор падающих на образец нейтронов.

Подготовительный эксперимент по терромагнитной обработке сплава $\text{Ni}_{49.1}\text{Mn}_{29.4}\text{Ga}_{21.5}$ с целью получения моновариантного мартенситного состояния был выполнен на установке «Вектор» (ВВР-М, ПИЯФ РАН). После термообработки были проведены измерения на трехосном спектрометре TASP в PSI, которые подтвердили, что образец более чем на 90% является моновариантным в мартенситной фазе. В результате, **впервые** выполнены измерения дисперсионных соотношения для спиновых волн в монокристалле $\text{Ni}_{49.1}\text{Mn}_{29.4}\text{Ga}_{21.5}$ в аустенитной и мартенситных фазах. Измерения подтвердили оценки константы спин-волновой жесткости, полученные в SAPNS экспериментах, Рис. 2.

Работа опубликована:

V. Runov, U. Stuhr Neutron spectroscopy of magnons in the austenite and martensite phases of a Ni-Mn-Ga Heusler alloy JMMM v.323, p.244 (2011).

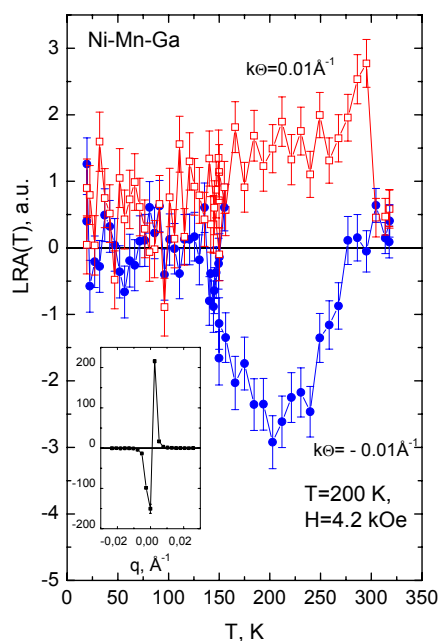
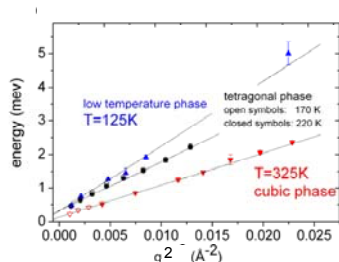


Рис.1. Температурная и импульсная (вставка) зависимости рассеяния поляризованных нейтронов в сплаве $\text{Ni}_{49.1}\text{Mn}_{29.4}\text{Ga}_{21.5}$ (SAPNS – измерения).

Спиновая динамика в сплаве Гейслера $\text{Ni}_{49.1}\text{Mn}_{29.4}\text{Ga}_{21.5}$

Runov, Stuhr :JMMM v.323, p.244 (2011)



Results:

	SAPNS ($\text{meV}\text{\AA}^2$)	TASP
Austenite:		$D = (97 \pm 2)$ Δ about 0.1 meV
HT martensite	$D \approx 140$	(149 ± 4) Δ about 0.2 meV
LT martensite	$D > 150$	(198 ± 7) Δ about 0.2 meV

Рис.2. измерения дисперсионных соотношения для спиновых волн в монокристалле $\text{Ni}_{49.1}\text{Mn}_{29.4}\text{Ga}_{21.5}$ в аустенитной и мартенситных фазах.

4.2.5. Измерение малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов при углах между направлением магнитного поля и скоростью нейтронов $\alpha=90^\circ$ и с $\alpha=45^\circ$ в окрестности температуры фазового превращения $T=28$ К. Цель- определение относительных вкладов спин- волнового, магнитно- ядерного интерференционного рассеяния и рассеяния на возможных винтовых флуктуациях.

Гордеев Г.П.

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

Этап 2010.

Обработка результатов проведенных ранее измерений. Проверка воспроизводимости результатов повторением измерений.

Кфмн Г.П.Гордеев

Предложение эксперимента о проведении этих измерений на установке SANS-2 реактора FRG-1 (GKSS) был принят с датой выполнения 2-9 мая 2010 г. Однако эксплуатация реактора была закончена ранее установленного срока и совпала с датой данного эксперимента, поэтому он был отменен и эксперимент не состоялся. Провести такой эксперимент на другом реакторе было невозможным из-за отсутствия специального экспериментального оборудования, аналогичного имеющемуся на установки SANA-2.

Проект 4.3

Исследование корреляций между структурными особенностями и аномалиями функциональных свойств оксидов и интерметаллоидов редкоземельных элементов, манганитов со свойствами колоссального магнитосопротивления.

Нейтроннографическое исследование кристаллической и магнитной структуры диэлектрических кристаллов.

ПИЯФ РАН: проф. В.А. Трунов,

ИФ СО РАН: проф. Г.А. Петраковский

4.3.1. Продолжение исследования строения кислородной подрешетки супериоников на основе титаната иттербия, легированных Са в диапазоне концентрации (0.1 – 0.2), методом нейтронной дифракции в более широком диапазоне легирования и температурном диапазоне (20-800) $^\circ$ С.

Этап 2010 года.

Исследование структуры $(Yb_{0.925}Ca_{0.075})_2Ti_2O_7$ в температурном интервале (20 – 820) $^\circ$ С. к.ф.м.н. Соколов А.Е.

На 48-детекторном нейтронном дифрактометре (9-й канал реактора ВВР-М) были продолжены исследования супериоников на основе титанатов РЗЭ со структурой пирохлора (рис.1).

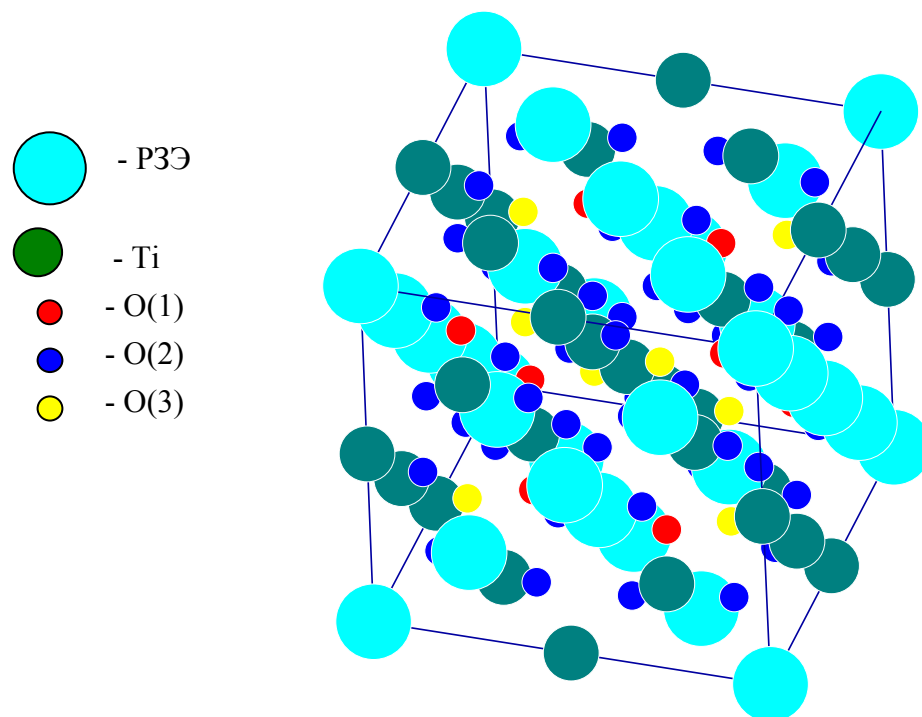


Рис.1. Структура пирохлора

Ранее нами было показано (на образцах вида $(Yb_{1-x}Ca_x)_2Ti_2O_7$), что процессы кислородного переноса в пирохлорах носят вакансионный характер, а величина кислород-ионной проводимости в таких соединениях существенным образом зависит от строения кислородной подрешетки. Проведенные на данном этапе исследования $(Yb_{1-x}Mg_x)_2Ti_2O_7$, $(Er_{1-x}Ca_x)_2Ti_2O_7$ и $(Er_{1-x}Mg_x)_2Ti_2O_7$ при различных температурах (комнатная, 750°C, 820°C) подтвердило общий характер этого явления. Вместе с тем было обнаружено, что структура кислородной системы (и, соответственно, величина проводимости) определяется не только степенью легирования, но и входящими в состав исследованных соединений атомами РЗЭ и легирующих элементов, причём при этом наблюдаются отличные друг от друга температурные зависимости.

В настоящий момент результаты исследований обрабатываются и готовятся к публикации.

4.3.2. Построение электронной, магнитной и структурной фазовой диаграммы $Sm_{1-x}Sr_xMnO_3$ ($0.16 \leq x \leq 0.63$) перовскитных манганитов на основе систематических исследований методом порошковой нейтронной дифракции высокого разрешения, температурных магнитных и транспортных измерений.

дфмн. А.И.Курбаков.

Завершены исследования, направленные на построение структурной, магнитной и электронной фазовой диаграммы $Sm_{1-x}Sr_xMnO_3$ ($0.16 \leq x \leq 0.67$) манганитов на основе их систематических исследований методом нейтронной порошковой дифракции высокого разрешения (рис.1). Основным результатом работы является демонстрация того, что реальная картина физических явлений в Sm-Sr манганитах значительно богаче, чем это следовало из измерений электросопротивления и намагниченности, и поэтому трактовка физических процессов в сложных сильнокоррелированных системах только по результатам макроизмерений, без привлечения структурных данных адекватного качества, оказывается недостаточно глубокой.

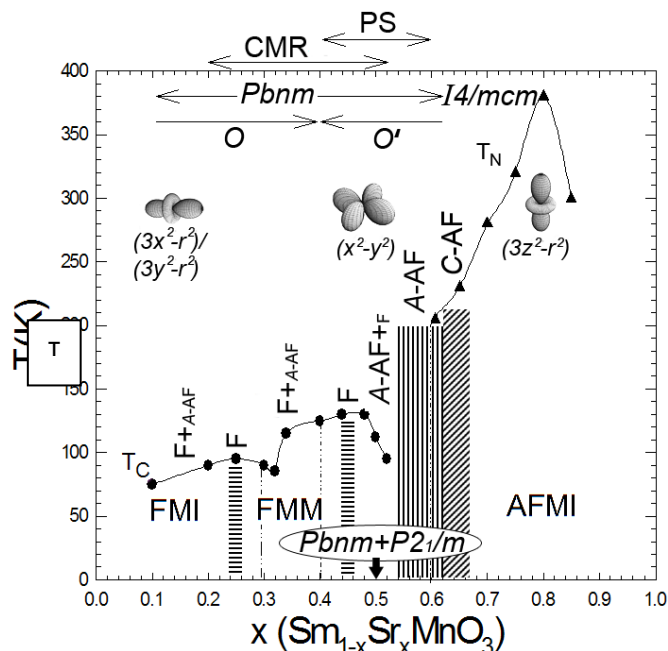


Рис.1. Электронная, магнитная и структурная фазовая диаграмма $\text{Sm}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ серии.
 • $-T_C$, ▲ $-T_N$ из [C. Martin, A. Maignan, M. Hervieu and B. Raveau, Phys. Rev. B 60, 12191 (1999)].

Области существования колоссального магнитосопротивления (CMR) и фазового разделения (PS) отмечены сверху стрелками. Горизонтальные надписи указывают тип основного состояния, предполагаемый из макроизмерений (FMI – ферромагнитный диэлектрик, FMM – ферромагнитный металл и AFMI – антиферромагнитный диэлектрик). Вертикальные надписи соответствуют нейтронным данным: F – однородный ферромагнетик, A-AF – однородный

антиферромагнетик A-типа, C-AF – однородный антиферромагнетик C-типа, $F+A-AF$ и $A-AF+F$ – фазо-разделенные магнитные системы со смесью ферромагнетизма и антиферромагнетизма, при доминировании ФМ или АФМ, соответственно. Заштрихованные зоны демонстрируют области однородного магнитного состояния: горизонтальная штриховка – ФМ, вертикальная – A-AFM, диагональная – C-AFM. Показаны также области разного типа кристаллического строения $Pbnm$ (O и O') и $I4/mcm$ (при всех температурах) и смесь $Pbnm+P2_1/m$ (только при низких температурах). Схематично представлены предполагаемые виды орбитального упорядочения e_g электронов Mn^{3+} в АФМ фазах.

Результаты опубликованы в виде 2-х статей:

1. A.I. Kurbakov «Electronic, structural and magnetic phase diagram of $\text{Sm}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ manganites» *J. Magn. Mater.* **322**, 967-972 (2010).
2. A.I. Kurbakov, A.V. Lazuta and V.A. Ryzhov «Phase diagram of $\text{Sm}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ perovskite manganites» *J. Phys. Conf. Ser.* **200**, 012099 (5p.) (2010).

и доложены на Международной конференции по сверхпроводимости и магнетизму:

A.I. Kurbakov «Crystal and electronic structures and magnetic properties of the unique colossal magnetoresistive $\text{Sm}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ manganites». International Conference on Superconductivity and Magnetism - ICSM 2010, Antalya, Turkey, 2010, Abstract Book. p.378.

4.3.3. Исследования состояний выше и ниже фазового перехода парамагнетик – ферромагнетик в кобальтитах:

Этап 2010г.

Нейтронографические исследования порошковых соединений кобальтитов лантана в широком температурном интервале в ферромагнитной и парамагнитной областях.

дфмн. А.И.Курбаков, кфмн. В.А.Рыжов, кфмн. В.А.Ульянов, А.Л.Малышев

На суперпозиционном нейтронном порошковом дифрактометре ПИЯФ проведены измерения дифракционных спектров соединений $\text{La}_{0.82}\text{Sr}_{0.18}\text{CoO}_3$ и $\text{La}_{0.80}\text{Sr}_{0.20}\text{CoO}_3$ в широком температурном интервале в ферромагнитной и парамагнитной областях при $T=3, 120, 180$ и 300 К. Представленные на рисунке 1. нейтронограммы наглядно демонстрируют разницу в кристаллической структуре обоих соединений при комнатной температуре (см., например, участок нейтронограмм в районе $2\theta = 50^\circ$) и появление магнитного упорядочения при низких температурах. Проводится ритвельдовская обработка экспериментальных данных методом полнопрофильного анализа.

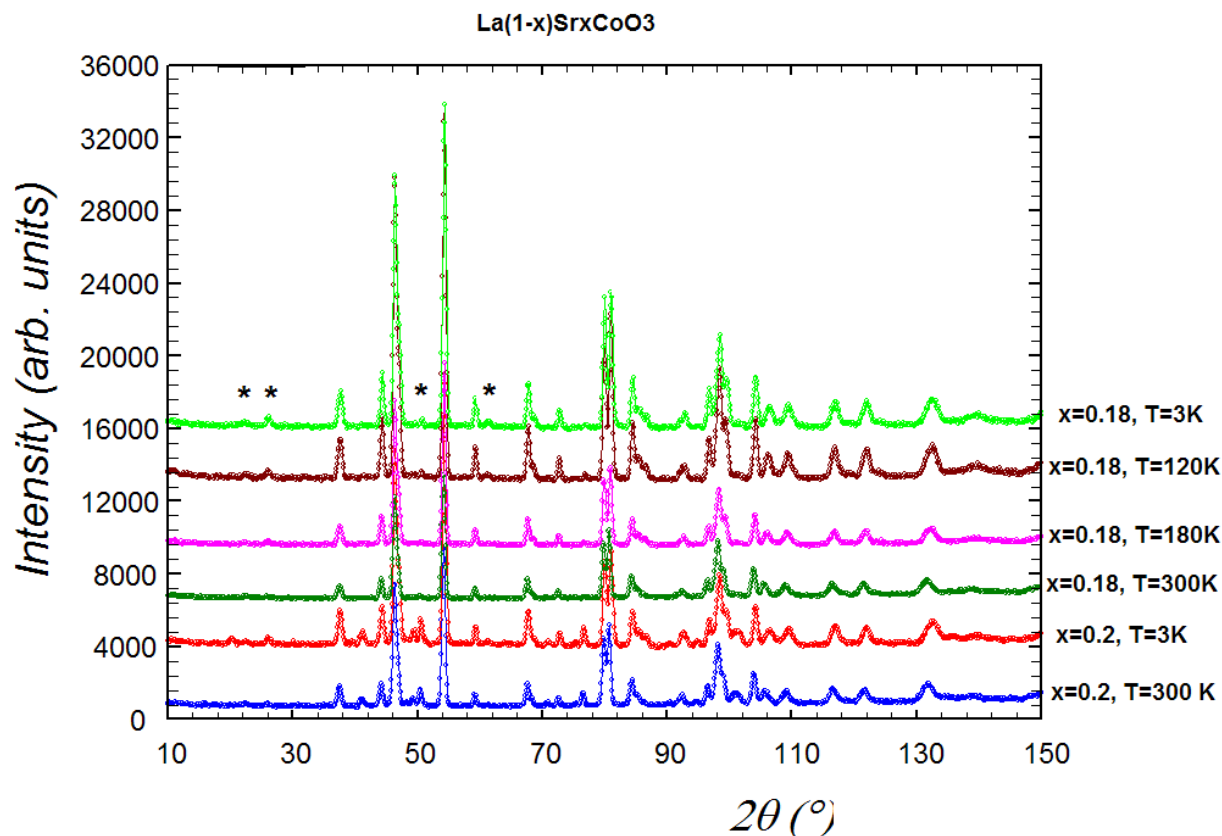


Рис.1. Экспериментальные нейтронограммы $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_3$ соединений, измеренные на суперпозиционном нейтронном порошковом дифрактометре ПИЯФ при нескольких температурах. Наиболее сильные магнитные рефлексы отмечены звездочками.

4.3.4. Особенности структуры и взаимные превращения катион-упорядоченных перовскитоподобных слоистых фаз, как основа создания новых функциональных материалов.

Этап 2010г.

Рентгенографическое и нейтронографическое исследование ферроэлектриков типа двухслойных фаз Ауривиллиуса с магнитными моментами.

дфмн. А.И.Курбаков, кфмн. В.А.Ульянов, А.Л.Малышев

Были синтезированы образцы ферроэлектриков, относящихся к полностью упорядоченным фазам Раддлсдена-Поппера, Диона-Якобсона и Ауривиллиуса. Основное внимание было уделено синтезу и исследованию двухслойных фаз Ауривиллиуса $\text{Bi}_2\text{LnNbTiO}_9$, где $\text{Ln} = \text{Nd-Gd, Bi}$. Кроме того, были синтезированы и исследованы образцы с $\text{Ln}=\text{Bi}$, в которых проведено частичное замещение в позиции (Nb,Ti) марганцем. Получено, что такое замещение гомогенно только до $x=0.2$. На всех синтезированных образцах проведены рентгеноструктурные исследования при комнатной температуре. На образце $\text{Bi}_2\text{NdNbTiO}_9$ проведены нейтронографические исследования на суперпозиционном нейтронном порошковом дифрактометре ПИЯФ при комнатной температуре и $T = 820^\circ\text{C}$. На рис.1. представлена структура двухслойной фазы Ауривиллиуса $\text{Bi}_2\text{NdNbTiO}_9$ при комнатной температуре, построенная на основе структурных параметров, полученных в результате разностного рентген-нейтроны ритвельдовского анализа дифрактограмм (рис.2).

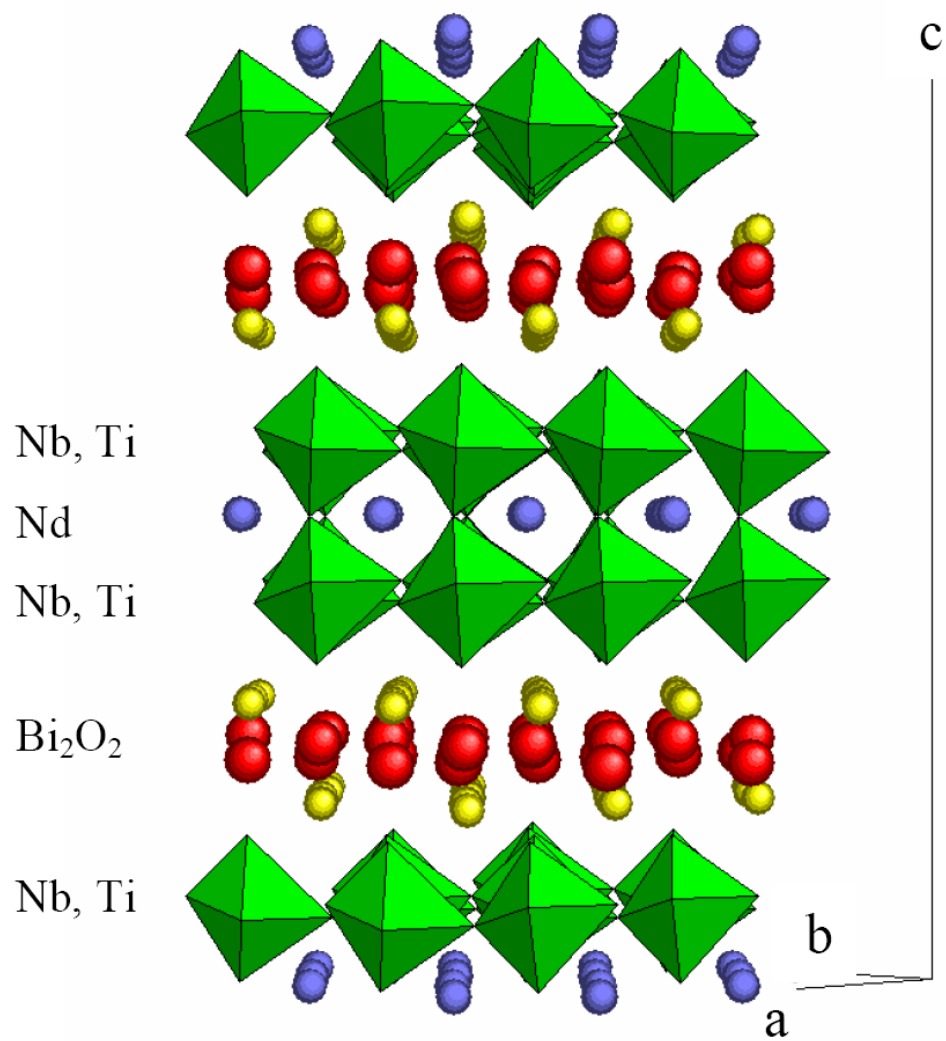


Рис.1. Структура $\text{Bi}_2\text{NdNbTiO}_9$ при комнатной температуре.

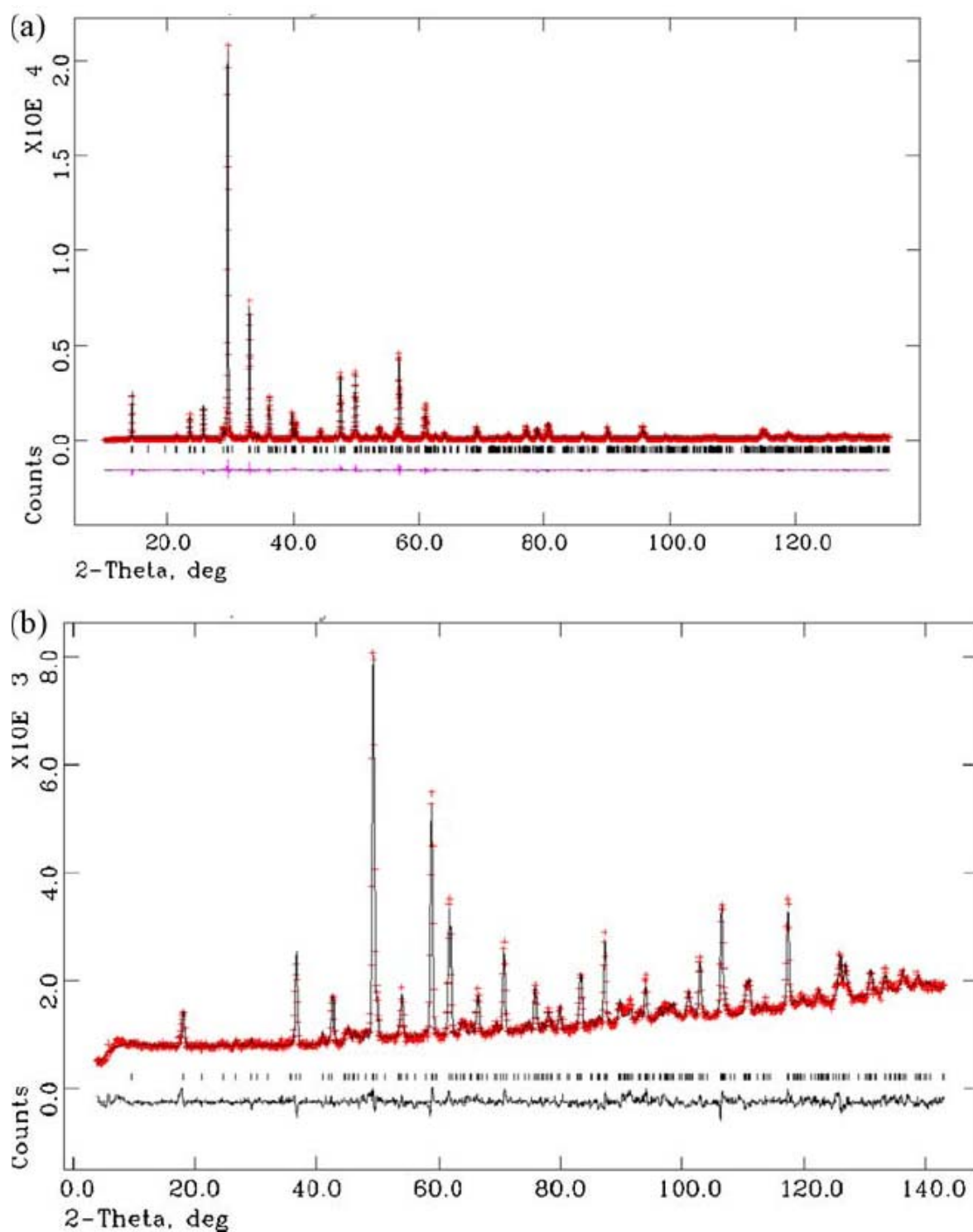


Рис.2. Экспериментальные, расчетные и разностные дифрактограммы $\text{Bi}_2\text{NdNbTiO}_9$. (a) данные рентгеновской дифракции, (b) данные нейтронной дифракции.

Результаты опубликованы в виде статьи:

1. A.B. Missyul, I.A. Zvereva, T.T.M. Palstra, A.I. Kurbakov «Double-layered Aurivillius-type ferroelectrics with magnetic moments» *Mat. Res. Bull.* **45**, 546-550 (2010).

4.3.5. Исследование структуры материалов, альтернативных хлориду цезия, пригодных для изготовления радиоактивных источников, структура которых устойчива к высокой влажности среды и её температуре.
Этап 2010 года.

Изучение низкотемпературного структурного перехода в соединение CsMgPO_4 , предлагаемого в качестве матрицы для хранения изотопных атомов церия
 к.ф.м.н. Ульянов В.А., к.ф.м.н. Соколов А.Е.

На 48-детекторном нейтронном дифрактометре (9-й канал реактора ВВР-М) были продолжены исследования соединения CsMgPO_4 . При комнатной температуре это вещество предположительно имеет структуру Pnma (рис.1), при охлаждении наблюдается структурный фазовый переход.

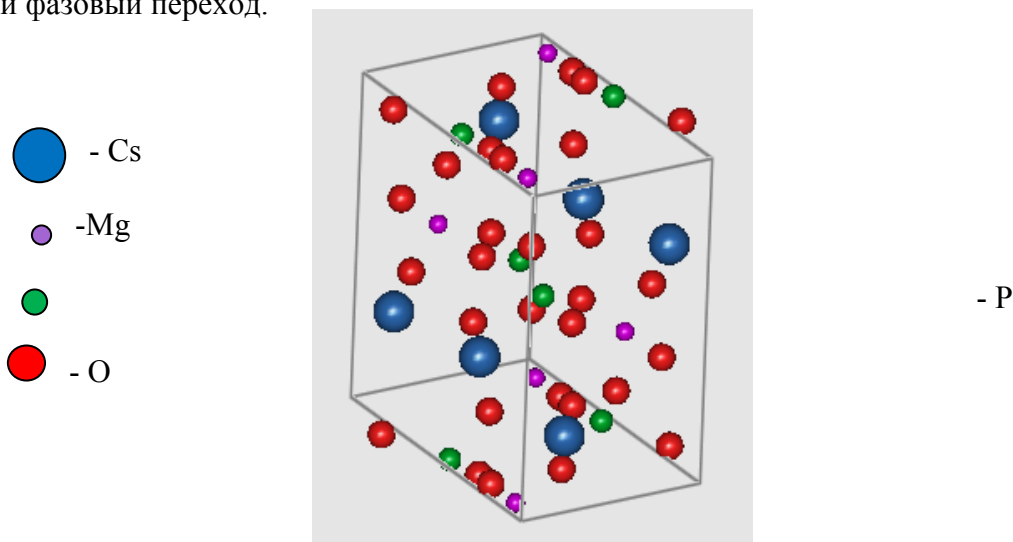


Рис.1. Структура соединения CsMgPO_4 при комнатной температуре

Исследования при комнатной температуре подтвердили указанную модель (рис.2). Были также проведены измерения при температуре 2.5 К. В литературе предлагается несколько структурных моделей родственных соединений при низкой температуре. Пока удовлетворительного совпадения полученных данных ни с одной из этих моделей не обнаружено. В настоящее время ведётся обработка в рамках дополнительных гипотез.

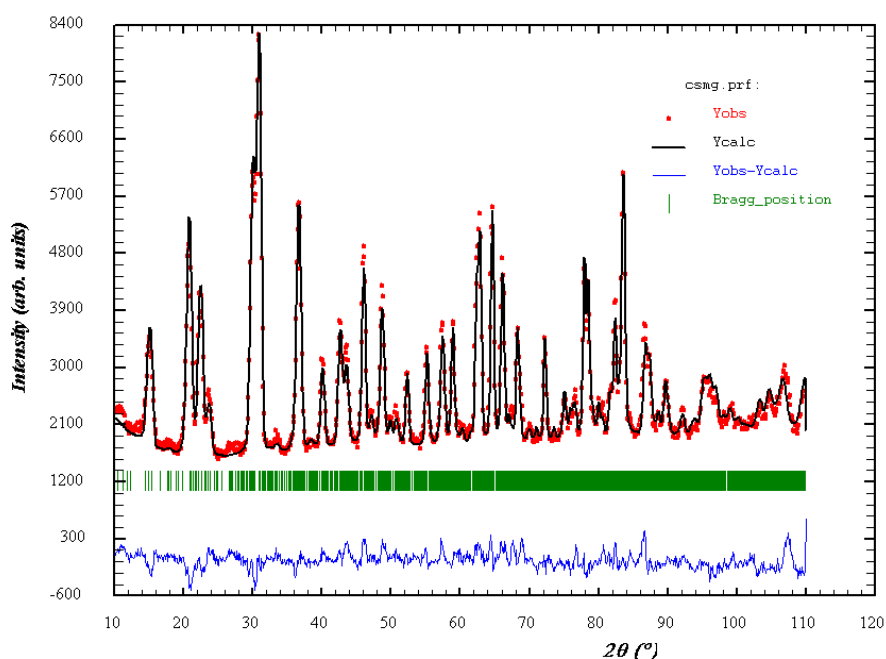


Рис. 2 Результаты исследований при комнатной температуре

4.3.5. Магнитная структура боратов железа $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{Er}, \text{Pr}$): нейтронная дифракция и магнитные измерения.

Нейтронная дифракция, измерения магнитной восприимчивости и намагниченности были выполнены с целью детального исследования кристаллической структуры,

низкотемпературных магнитных структур и переходов и определения роли магнитной анизотропии редкоземельных ионов. $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$, с пространственной группой $R32$, становится антиферромагнетиком при температуре Нееля $T_N=32$ К с $\tau = [0\ 0\ 3/2]$, тогда как $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$ имеет симметрию $P3_12_1$ в исследуемом диапазоне температур ($1.5\text{ К} < T < 520\text{ К}$), температуру Нееля $T_N=40$ К и $\tau = [0\ 0\ 1/2]$. Оба вектора магнитного распространения приводят к удвоению кристаллографической ячейки вдоль с-оси кристаллов. Благодаря сильному поляризационному влиянию подрешетки железа, магнитное упорядочение редкоземельных подрешеток происходит одновременно с подрешеткой железа при T_N . Направления магнитных моментов в магнитоупорядоченных фазах определяются анизотропией редкоземельных ионов: легкая ось вдоль с-оси для $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$ и легкая плоскость а-б для $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Спин-переориентационных переходов не наблюдается для обоих соединений, однако при $T=10$ К в $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$ появляется небольшая по количеству фаза со 120° ориентацией магнитных моментов Er.

На рисунке 1 представлена температурная зависимость дифрактограммы $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$.

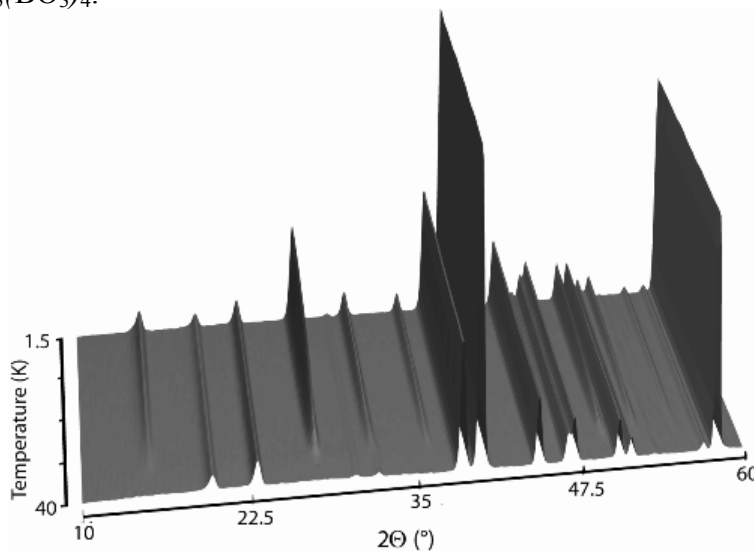


Рисунок 1. Температурная зависимость дифрактограммы $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$ при температурах 1.5 – 40 К, показывающая появление магнитных Брэгговских пиков при $T=32$ К;

$$\lambda = 1.91 \text{ \AA}.$$

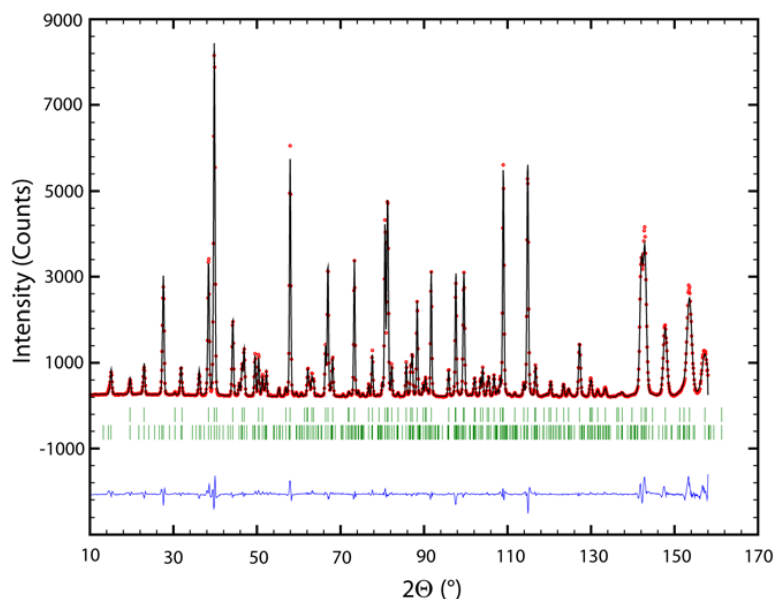


Рисунок 2.

Рисунок 2 представляет экспериментальный (красные точки), теоретический (черная линия) и разницу спектров (синяя линия) $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$ при $T=1,5$ К для группы $R32$.

Полосками обозначены вычисленные позиции ядерных (первая колонка) и магнитных (вторая колонка) пиков.

На рисунке 3 представлена магнитная структура $\text{PrFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Магнитные моменты Pr – голубые стрелки, Fe – красные. Путь прямого обмена Fe-Fe показан голубыми линиями.

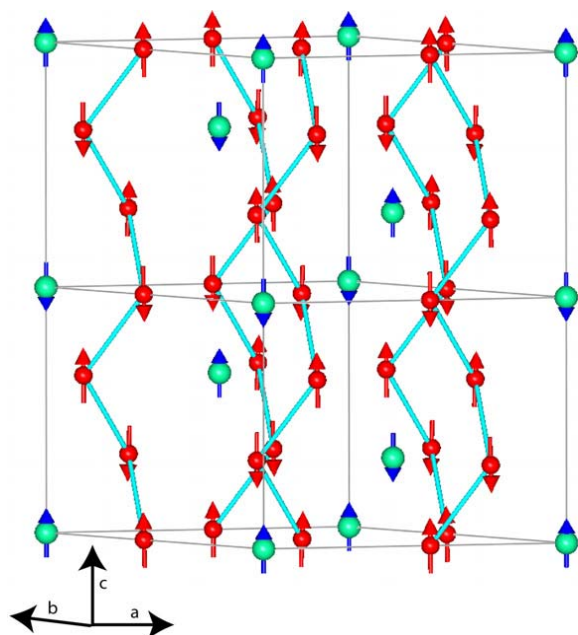


Рисунок 3

На рисунке 4 представлена температурная зависимость дифрактограммы $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$.

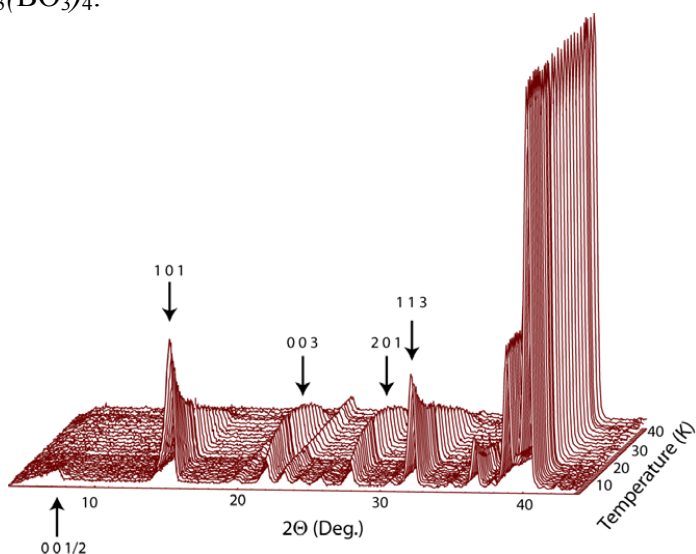


Рисунок 4. Температурная зависимость дифрактограммы $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$ при температурах 1.5 – 43 К, показывающая появление магнитных Брэгговских пиков при $T=32$ К, ослабление (0 0 3) и (2 1 0) пиков при $T=15$ К и появление пика (0 0 $\frac{1}{2}$) при $T=10$ К; $\lambda = 1.91 \text{ \AA}$.

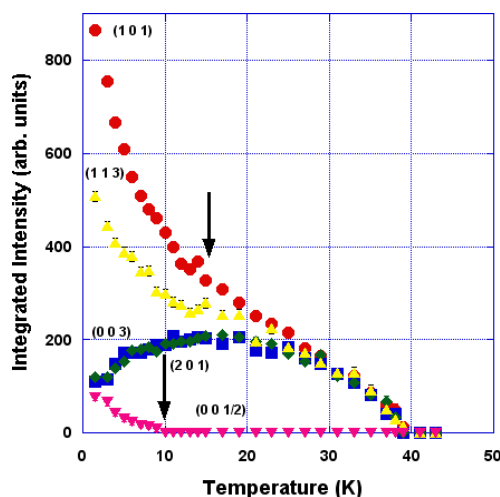


Рисунок 5. Температурная зависимость интегральной интенсивности некоторых характерных магнитных Брэгговских пиков. Стрелки показывают появление $(0\ 0\ \frac{1}{2})$ пика при $T=10$ К изменение наклона кривой при $T=15$ К.

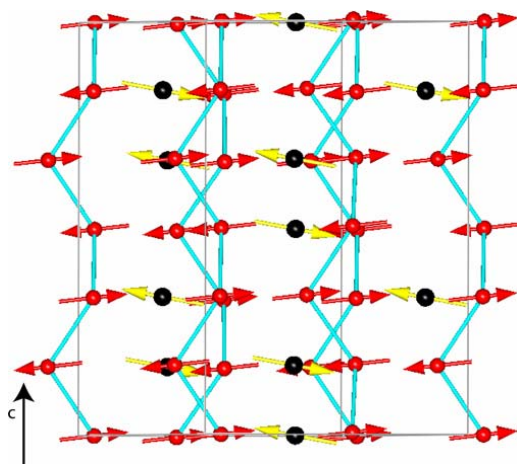


Рисунок 6. Основная магнитная структура $\text{ErFe}_3(\text{BO}_3)_4$. Er-момент—желтые стрелки Fe-момент—красные. Показан вид вдоль c-оси одной магнитной ячейки.

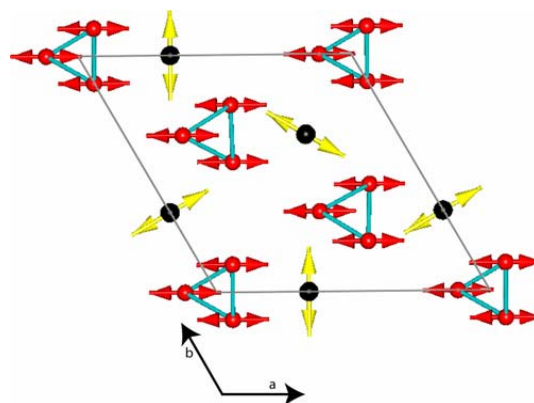


Рисунок 7. 120° структура подрешетки Er, принадлежащая около 10% объема образца при $T=1,5$ К.

Публикации:

1. C Ritter, A Vorotynov, A Pankrats, G Petrakovskii, V Temerov, I Gudim and R Szymczak. Magnetic structure in iron borates $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($\text{R} = \text{Er}, \text{Pr}$): a neutron diffraction and magnetization study. J. Phys.: Condens. Matter 22 (2010) 206002 (8pp)

Проект 4.4

Исследование функциональных свойств материалов и методика специального облучения образцов

Проф. А.И. Окорочков, д. ф.-м. н. В.Т. Лебедев,
проф. Р.Ф. Коноплева, к. ф.-м. н. С.П. Беляев,
к. ф.-м. н. В.А. Чеканов, к. ф.-м. н. И.В. Назаркин,
Е.Е. Дамаскинская, Г.В. Колобанов

4.4.1. Исследовать кинетику мартенситных превращений в наноструктурированных аморфных сплавах Ti-Hf-Ni-Cu с нано- и микроструктурой в исходных образцах и после облучения быстрыми нейтронами.

*Коноплева Р.Ф., Беляев С.П., Чеканов В.А., Колобанов Г.В. Накин В.А.,
Этап 2010*

Выполнены измерения температурных зависимостей электросопротивления аморфно-кристаллического сплава Ti-Hf-Ni-Cu с нано- и микроструктурой до и после нейтронного облучения. Получены дозовые зависимости температур мартенситных превращений и электросопротивления. Установлено, что электросопротивление и характер фазовых переходов изменяются немонотонно с ростом флюенса нейтронов. Такое поведение связывается с последовательным развитием процессов аморфизации и кристаллизации, индуцируемых облучением.

Ранее было установлено, что в аморфно-кристаллических сплавах на основе композиции TiNi температурная кинетика фазовых переходов мартенситного типа определяется содержанием кристаллической фазы в аморфной матрице. Такое влияние обусловлено зависимостью температур превращений от величины зерна, которая связана с объемной долей кристаллической фазы. Нейтронное облучение может способствовать как аморфизации кристаллического сплава TiNi, так и кристаллизации аморфного материала. Таким образом, радиационное воздействие является фактором, модифицирующим структуру и макроскопические свойства сплавов на основе TiNi, в частности, величину и характер проявления эффекта памяти формы. Целью работы является изучение влияния нейтронного облучения на фазовые превращения в аморфно-кристаллическом сплаве на основе TiNi.

Методом сверхбыстрой закалки из расплава с последующей контролируемой кристаллизацией в калориметре изготовлены образцы сплава $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$, структура которых представляет собой аморфно-кристаллический композит с размером кристаллитов от 20 до 500 нм в зависимости от содержания кристаллической фазы. Образцы облучены в реакторе ВВР-М различными фленсами до $4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$. Выполнены измерения температурных зависимостей электросопротивления аморфно-кристаллического сплава Ti-Hf-Ni-Cu с нано- и микроструктурой в необлученном состоянии и после нейтронного облучения. Типичный пример полученных температурных зависимостей электросопротивления представлен на рисунке 1 для сплава с содержанием кристаллической фазы 42 об.%. При изменении температуры необлученный образец демонстрирует характерный гистерезис сопротивления, отражающий кинетику фазового перехода в кристаллической составляющей. С нарастанием флюенса нейтронов гистерезисная фигура смещается сначала вверх по шкале сопротивления, затем вниз и снова вверх. Температуры превращения при этом понижаются.

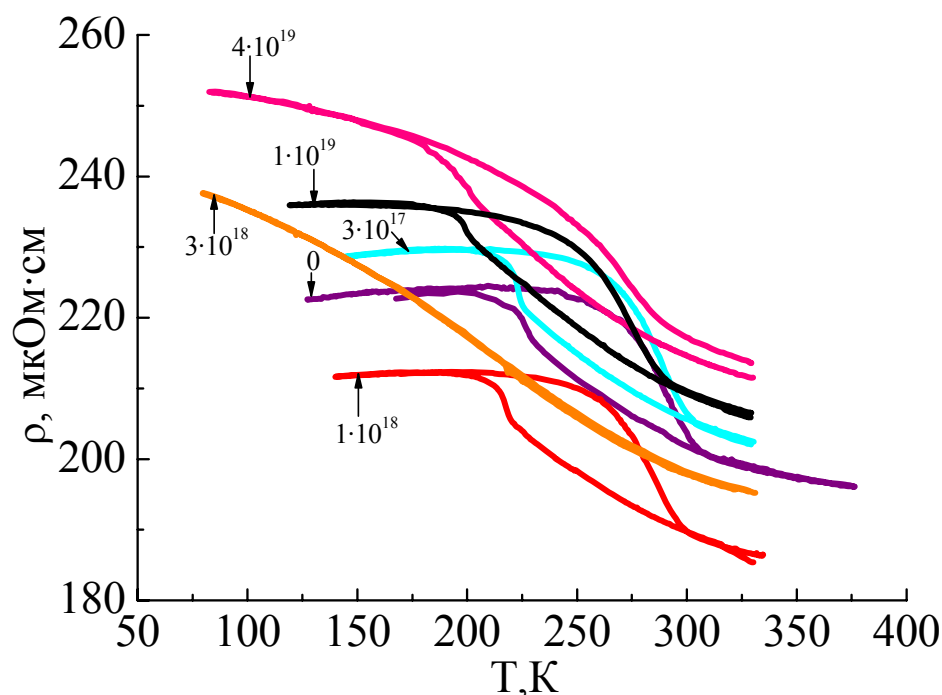


Рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления сплава $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$, содержащего 42 об.% кристаллической фазы в необлученном состоянии и после облучения нейтронами. Флюенс указан цифрами у кривых.

Важнейшей особенностью оказался тот факт, что при флюенсе $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$ гистерезис на температурной зависимости не наблюдается, а температурный коэффициент сопротивления становится отрицательным в широком интервале температур. Такое поведение характерно для аморфных металлических материалов, в которых фазовый переход не происходит просто по причине отсутствия дальнего порядка в расположении атомов.

Из анализа всей совокупности данных следует, что в процессе облучения при некоторых флюенсах нейтронов происходит аморфизация кристаллической фазы, а при дальнейшем нарастании интегральной дозы в аморфном материале вновь возникают кристаллиты. Это видно из наличия гистерезиса на зависимостях «сопротивление-температура», соответствующих флюенсам, превышающим $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}$.

Таким образом, в результате исследования получены дозовые зависимости температур мартенситных превращений и электросопротивления сплава $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$ с нано- и ультрамелкозернистой структурой. Установлено, что сопротивление изменяется немонотонно с ростом флюенса нейтронов. Немонотонно изменяется и характер фазовых переходов. Впервые показано, что подобное поведение материала может быть связано с циклически повторяющимся процессом «аморфизация $\leftrightarrow$ кристаллизация», происходящим в ходе облучения.

4.4.2. Исследовать влияние облучения быстрыми нейтронами реактора на электрофизические параметры наноалмазов с пироуглеродом с различным содержанием пироуглерода.

Коноплева Р.Ф., Чеканов В.А., Колобанов Г.В.

Показано, что рост содержания пироуглеродной компоненты в исследованных образцах приводит к уширению пиков на спектрах неупругой релаксации и уменьшению температурного сдвига при облучении.

4.4.3. Провести исследование внутреннего трения и модуля Юнга образцов наноалмазов с пироуглеродом с различной объемной долей (X) пироуглерода (NDC-X), облученных различными флюенсами быстрых нейтронов реактора.

Коноплева Р.Ф., Назаркин И.В.

Проведено измерение коэффициента внутреннего трения и модуля Юнга компактированных образцов наноалмазов с различной объемной долей пироуглерода (NDC-X), облученных быстрыми нейтронами реактора.

Установлено, что облучение быстрыми нейтронами реактора приводит к увеличению внутреннего трения образцов с различной долей (X) пироуглерода, а также смещению пиков поглощения ультразвука в низкотемпературную. На основе предложенной физической модели вакансионного залечивания радиационных дефектов при повторяющихся термических циклах, выполнено компьютерное моделирование процесса исчезновения дислокационных петель вакансионного и межузельного типов, распределенных в пространстве. Установлено, что для полного исчезновения дислокаций требуется порядка 10000 термоциклов, что близко к экспериментально установленной величине.

4.4.4. Исследование строения и физической природы радиационных дефектов в аморфно-кристаллических материалах методами рассеяния холодных нейтронов.

Этап 2010 г.

Исследование надатомной структуры облученных образцов реакторных конструкционных материалов на основе сплавов алюминия методом малоуглового рассеяния нейтронов с использованием аппарата пространственных корреляционных функций.

Дфмн Лебедев В.Т., кфмн Лебедев В.М.

Проведено исследование надатомной структуры облученных нейтронами реактора (флюенс $2 \cdot 10^{21}$ н/см²) образцов реакторных конструкционных материалов на основе сплавов алюминия (САВ-1) методом малоуглового рассеяния нейтронов с использованием аппарата пространственных корреляционных функций. Показано, что наблюдаемые высокие значения сечений рассеяния связаны с наличием в материале наноразмерных пор радиусами $R \sim 5-50$ нм. В результате облучения произошло более чем двукратное уменьшение объемной доли рассеивающих объектов (пор) радиусом 40–50 нм, что в значительной мере компенсировалось ростом общей доли частиц радиусами 5–8 нм и 20–25 нм при увеличении на 40% суммарной площади поверхности рассеивающих объектов, которое объясняется фрагментацией крупных областей.

Проект 4.5

Фазовые переходы в материалах с колоссальным магнетосопротивлением

К. ф.-м. н. В.А. Рыжов, В.П. Хавронин,
к. ф.-м. н. Ю.П.Черненко, к. ф.-м. н. А.В.Лазута,
к. ф.-м. н. О.П.Смирнов, д. ф.-м. н. С.М.Дунаевский,
к. ф.-м. н. С.В. Григорьев

4.5. . Комплексное изучение фазовых переходов в манганитах, обладающих свойством КМС, со структурой, близкой к кубической.

кфмн В.А. Рыжов, кфмн И.А. Киселев, снс В.П. Хавронин, кфмн Ю.П. Черненко, кфмн А.В. Лазута, кфмн О.П. Смирнов, кфмн В.В. Рунов

Этапы 2010 г.

4.5.1. Обработка полученных на псевдокубическом манганите $\text{La}_{0.82}\text{Ca}_{0.18}\text{MnO}_3$ экспериментальных данных для линейной и нелинейной восприимчивостей,

электронного магнитного резонанса, окончание исследования рассеяния поляризованных нейтронов (не законченного на этапе 2009 г. из-за необходимости модернизации блока детекторов), обработка его результатов и подготовка публикации.

Закончена обработка данных линейной и нелинейной восприимчивостей, электронного магнитного резонанса для псевдокубического КМС манганита $\text{La}_{0.82}\text{Ca}_{0.18}\text{MnO}_3$. Переход парамагнетик-ферромагнетик в нем происходит по обнаруженному ранее сценарию с образованием ниже $T^* > T_C$ ферромагнитных кластеров с металлическими свойствами (ФМ кластеры) в парамагнитной матрице, что подтверждает его универсальность. Результаты доложены на конференции: 7th Meeting “NMR in Heterogeneous Systems”. June 28 – July 2, 2010, Saint Petersburg, Russia. Заканчивается подготовка статьи.

4.5.2. Модернизация техники развертки постоянного магнитного поля, H , и приемной части установки измерения второй гармоники намагниченности, M_2 , продольного нелинейного отклика (частота возбуждения 15.7 МГц) для расширения диапазона частот развертки H и полосы пропускания приемного тракта в область низких частот (до 10^{-3} Гц).

Выполнена модернизация установки измерения второй гармоник и намагниченности, $M_2(H, T)$ продольного нелинейного отклика, диапазон частот развертки постоянного магнитного поля H и полосы пропускания приемного тракта в область низких частот (до 10^{-3} Гц).

4.5.3. Исследования полевых и температурных зависимостей $M_2(H, T)$ $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в диапазоне медленных частот развертки H ($1 - 10^{-3}$ Гц) для проверки гипотезы о причинах трансформации симметричной петли H -гистерезиса в несимметричную в зависимостях восприимчивости второго порядка от H , обнаруженной на этапе 2008 г., в температурной области от T^* - температуры возникновения ферромагнитных (Ф) кластеров в парамагнитной матрице в процессе развития перехода второго рода до T_C . Выполненные на этапе 2009 г. исследования $M_2(H, T)$ при изменении частоты развертки H от 10 до 1 Гц не показали изменения эффекта.

Дополнительные исследования полевых и температурных зависимостей $M_2(H, T)$ $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в диапазоне медленных частот развертки H ($1 - 10^{-3}$ Гц) не выявили заметной частотной зависимости эффекта трансформации симметричной петли H -гистерезиса в несимметричную в $M_2(H)$ зависимостях (появление “магнитной памяти”) в области образования ФМ кластеров $T^* > T > T_C$. Найдено, что максимальная величина эффекта достигается при температуре перехода диэлектрик-металл, $T_{DM} > T_C$.

4.5.4. Исследование малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в критической области $T^* \geq T \geq T_C$, где образуется неоднородное состояние (ферромагнитные кластеры в парамагнитной матрице), для поиска физических причин трансформации симметричной петли гистерезиса в несимметричную в зависимостях восприимчивости второго порядка от H . Эти исследования не были закончены на этапе 2009 г. из-за необходимости модернизации блока детекторов нейтронов.

Исследование малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в критической области $T^* \geq T \geq T_C$ из-за проблем с блоком детекторов планируется завершить в конце 2010 года.

4.5.5. Исследование нейтронной дифракции $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в критической области $T^* \geq T \geq T_C$, где образуется неоднородное состояние (ферромагнитные кластеры в парамагнитной матрице), для контроля структуры и магнитного состояния с целью поиска физических причин трансформации симметричной петли гистерезиса в несимметричную в зависимостях восприимчивости второго порядка от H .

Исследование нейтронной дифракции $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в области образования ФМ кластеров $T^* \geq T \geq T_C$ показало, что кристалл остается структурно однофазным и его параметры меняются слабо. Из совокупности структурных, $M_2(H, T)$ и транспортных данных эффект трансформации симметричной петли H -гистерезиса в несимметричную в $M_2(H)$ зависимостях был объяснен существенным увеличением температуры блокировки, T_{bl} , переворота момента кластера относительно оси анизотропии при изменении направления H вследствие процесса образования перколяционного проводящего кластера при развитии Д-М перехода (вследствие увеличения эффективного размера Φ кластера и его момента), сопровождающегося существенным увеличением времени релаксации (переворота) момента (в приближении одноосной анизотропии $\tau_{\parallel} = \tau_0 \exp(\Delta U/kT)$, $\tau_0 - \text{const}$, $k - \text{постоянная}$ Больцмана, энергетический барьер $\Delta U \propto T_{bl}$).

Результаты доложены на конференциях: (i) 7th Meeting “NMR in Heterogeneous Systems”. June 28 – July 2, 2010, Saint Petersburg, Russia; (ii) IV Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” Nanospintronics. June 28 – July 2, 2010, Ekaterinburg, Russia.

Направлена в печать статья: V. A. Ryzhov, A. V. Lazuta, O. P. Smirnov, V. P. Khavronin, P. L. Molkanov, Ya. M. Mukovskii, V. I. Chichkov. Behavior of Clustered State above the Curie Temperature in $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ Single Crystal. Presented to Journal “Solid State Phenomena”, 2010.

4.5.6. Комплексное исследование фазового перехода из парамагнитного (П) в ферромагнитное (Ф) состояние в псевдокубическом манганите $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$ с Ф металлическим основным состоянием для проверки универсальности найденного в псевдокубических $\text{Nd}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.23, 0.25$), $\text{La}_{0.88}\text{MnO}_{2.91}$ и $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.18, 0.2, 0.22$) манганитах с Ф диэлектрическим основным состоянием сценария необычного П-Ф перехода с образованием гетерофазного магнитного состояния (Ф кластеров в парамагнитной матрице) выше T_C :

В.А.Рыжов.

Исследование нейтронной дифракции $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ манганита в области образования ФМ кластеров $T^* \geq T \geq T_C$ показало, что кристалл остается структурно однофазным и его параметры меняются слабо. Из совокупности структурных, $M_2(H, T)$ и транспортных данных эффект трансформации симметричной петли H -гистерезиса в несимметричную в $M_2(H)$ зависимостях был объяснен существенным увеличением температуры блокировки, T_{bl} , переворота момента кластера относительно оси анизотропии при изменении направления H вследствие процесса образования перколяционного проводящего кластера при развитии Д-М перехода (вследствие увеличения эффективного размера Φ кластера и его момента), сопровождающегося существенным увеличением времени релаксации (переворота) момента (в приближении одноосной анизотропии $\tau_{\parallel} = \tau_0 \exp(\Delta U/kT)$, $\tau_0 - \text{const}$, $k - \text{постоянная}$ Больцмана, энергетический барьер $\Delta U \propto T_{bl}$).

Результаты доложены на конференциях: (i) 7th Meeting “NMR in Heterogeneous Systems”. June 28 – July 2, 2010, Saint Petersburg, Russia; (ii) IV Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism” Nanospintronics. June 28 – July 2, 2010, Ekaterinburg, Russia.

Направлена в печать статья: V. A. Ryzhov, A. V. Lazuta, O. P. Smirnov, V. P. Khavronin, P. L. Molkanov, Ya. M. Mukovskii, V. I. Chichkov. Behavior of Clustered State above the Curie Temperature in $\text{La}_{0.78}\text{Ca}_{0.22}\text{MnO}_3$ Single Crystal. Presented to Journal “Solid State Phenomena”, 2010.

Проект 4.6

Исследования надмолекулярной структуры композиционных полимерных и неорганических материалов

ФИАН им.П.Н. Лебедева: к. ф.-м. н. С.П. Кузнецов

ПИЯФ РАН Дфмн Лебедев В.Т.

Целью данного проекта является разработка методов определения параметров надмолекулярной структуры (НМС) с помощью рассеяния очень холодных нейтронов (ОХН) и определение параметров структуры новых полимерных композиционных материалов в процессе разработки технологии их создания. При реализации данного проекта в 2010 году было выполнено:

1. Получены аналитические выражения для зависимостей сечений рассеяния ОХН на структурах фрактального типа, включая поверхностные фрактальные структуры.
2. Разработана методика измерений дифференциального сечения рассеяния ОХН с помощью изменения углового размера детектора.
3. Методом рассеяния очень холодных нейтронов определены параметры НМС композиционного материала алюминий/полиэтилен (Al/PE), средние размеры частиц нанопорошков Al, Fe₂O₃ в глицерине.

1. Аналитические выражения для зависимостей сечений рассеяния ОХН на структурах фрактального типа, включая поверхностные фрактальные структуры.

Дифференциальное сечение рассеяния ОХН на структурах с размерами порядка ξ созданных из дискретных рассеивателей с размерами порядка $R < r < \xi$ в первом Борновском приближении может быть описано [1] с помощью корреляционной функции: $K(r) = (\text{Tau } D) (R/r)^{3-D} \exp(-r/\xi)$

Здесь $\text{Tau} = 4\pi(N_0b_0 - Nb)$ разность рассеивающих плотностей на границе рассеиватель- матрица, D – размерность фрактала.

Для дифференциального сечения рассеяния на одном фрактале получаем $d\sigma/d\Omega = \text{Tau}^2 V R^{3-D} \{ (D\Gamma(D-1)\sin[(D-1)\theta]) / \{ (4\pi)^2 q [q^2 + \xi^{-2}]^{(D-1)/2} \} \}$.

Здесь $V = \xi^3 (R/\xi)^{3-D}$, $\Gamma(x)$ – гамма функция, $q = 2\pi k \sin(\theta/2)$, k – волновой вектор ОХН θ – угол рассеяния. Тогда после интегрирования по всем θ кроме θ_D (угловой размер детектора) получаем:

$$\Sigma_{\text{SMS}} = (32\pi/k^2) \phi \text{Tau}^2 D R [\Gamma(D-2)] (\xi/R)^{D-2} \left\{ \left[\cos((D-2)\text{atan}(2k\xi\sin\theta/2)) / [(2k\xi\sin\theta/2)^2 + 1]^{(D-2)/2} \right] - \left[\cos[(D-2)\text{atan}(2k\xi)] / [(2k\xi)^2 + 1]^{(D-2)/2} \right] \right\} \quad (1)$$

Аналогично для корреляционной функции поверхностных фракталов применяемых для описания пористых поверхностей получаем:

$$\Sigma_{\text{SMS}} = -(4\pi)^2 \phi \text{Tau}^2 [(\xi)^{D_s-3} / (k)^{6-D_s}] \left\{ \left[\Gamma(4-D_s) \cos(D_s\pi/2) [(1/2\sin\theta_D)^{4-D_s} - (1/2)^{4-D_s}] \right] \right\} / 8 \quad (2)$$

D_s – размерность поверхностного фрактала, $2 \leq D_s \leq 3$. При этом если $D_s=3$ сечение рассеяния равно 0, если $D_s=3$, то сечение (2) по порядку величины совпадает с (1), так как в этом случае фрактальная поверхность превращается в гладкую.

2. Методика измерений дифференциального сечения рассеяния ОХН с помощью изменения углового размера детектора.

Как было показано ранее [2], конструкция спектрометра ОХН позволяет проводить измерения коэффициента отражения ОХН от исследуемого образца и выделять дифференциальное сечение рассеяния ОХН на НМС.

Дифференциальное сечение рассеяния на сферических рассеивателях можно также оценить, изменяя угловой размер детектора за счет уменьшения линейных размеров образца и детектора (l) и за счет изменения расстояния между образцом и детектором (H) (Рис.1). В этом случае

$$d\Sigma_{\text{SMS}}/d\Omega \cong [\Sigma_{\text{SMS}}(\Omega_1) - \Sigma_{\text{SMS}}(\Omega_2)] / (\Omega_1 - \Omega_2) \quad (3)$$

Дифференциальное сечение рассеяния ОХН на частицах карбоната кальция в полипропиленовой (PP) матрице было измерено для образца диаметром 14 мм путем изменения расстояния между образцом и детектором. Объемная концентрация частиц CaCO_3 составила 5%. На рис.2 представлен ТЕМ снимок НМС исследуемого образца. Ранее методом пропускания ОХН [3] , было показано, что при этой концентрации доля изолированных частиц (ϕ_1) составляет порядка 90%. Аналогичные результаты были получены и при анализе ТЕМ снимков (Рис.3). Теоретические и измеренные зависимости $d\Sigma_{\text{SMS}}/d\Omega(\mathbf{k})$ представлены на рис.4.

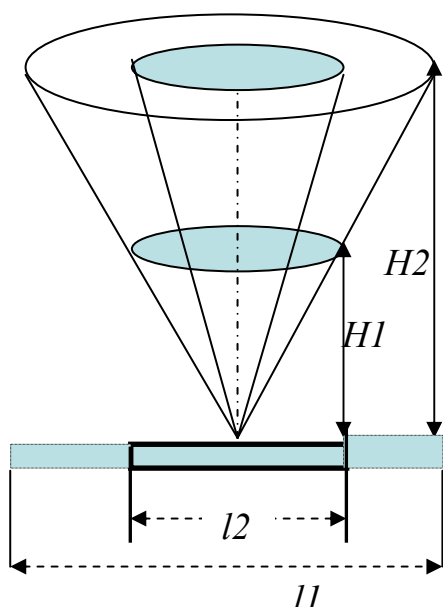


Рисунок 1. Схема эксперимента

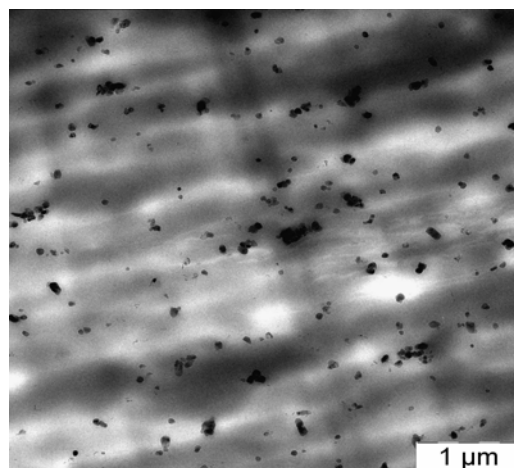


Рисунок 2. ТЕМ исследуемого образца PP/CaCO_3

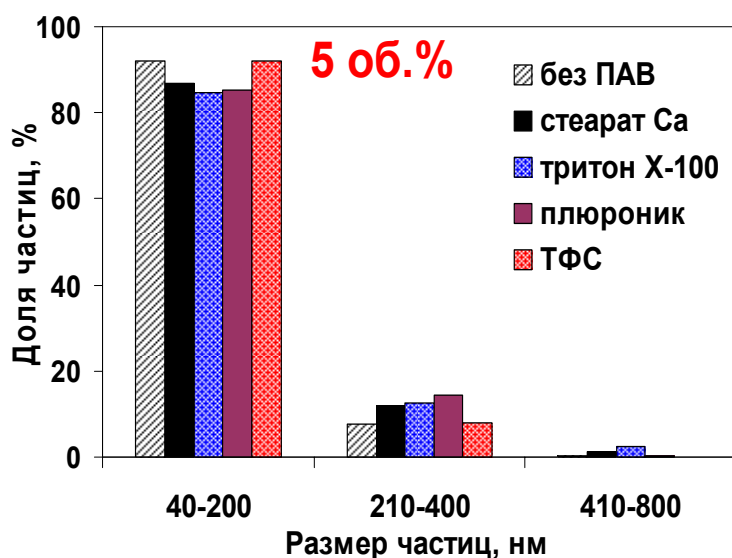


Рисунок 3 Распределение частиц CaCO_3 по размерам (данные ТЕМ). – исследуемый образец

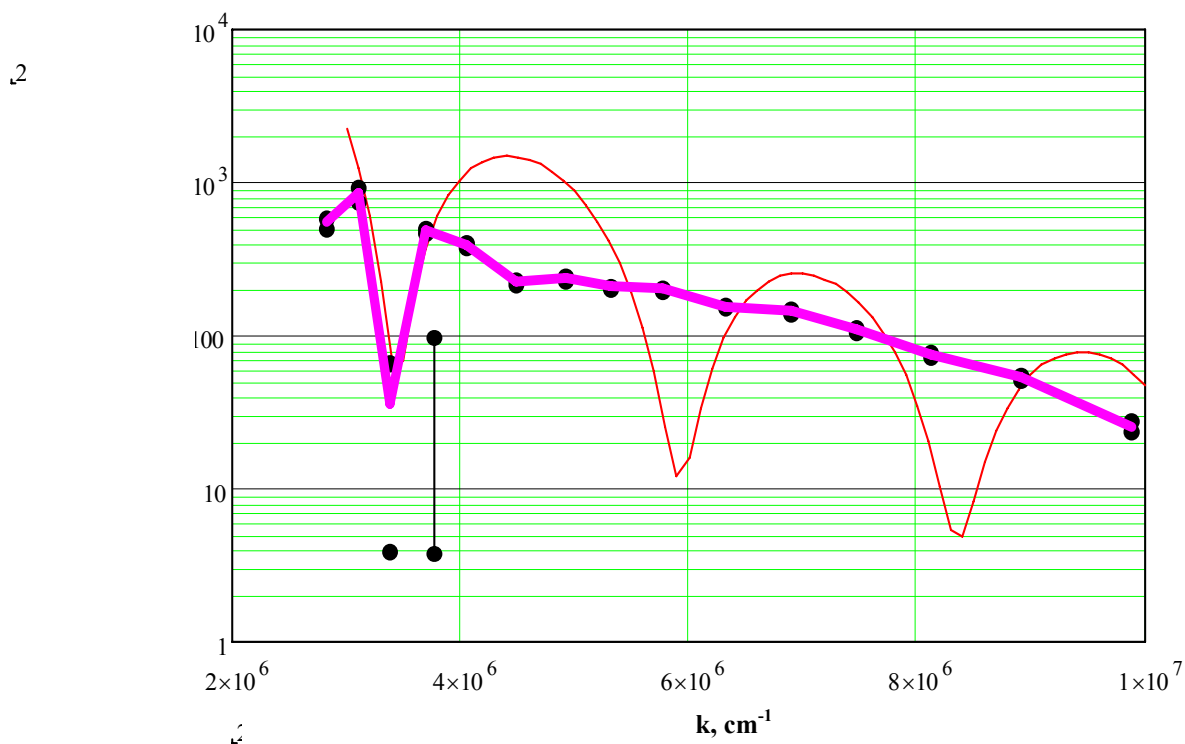


Рисунок 4. $[\Sigma_{SMS}(\Omega_1) - \Sigma_{SMS}(\Omega_2)] / (\Omega_1 - \Omega_2)$, $\bullet$ статистическая ошибка, — теоретическая зависимость $d\Sigma_{SMS}/d\Omega(k)$ для рассеяния ОХН на сферической частице ($R=68\text{nm}$) для идеального точечного детектора, — эксперимент.

3. Определение средних размеров и других параметров НМС взвеси частиц нанопорошка Fe_2O_3 в глицерине НМС и композиционного материала алюминий/полиэтилен (Al/PE).

При исследовании наноструктур различной природы с помощью рассеяния ОХН приходится контролировать условия применимости Борновского приближения. Условие применимости Борновского приближения $((U/E)kR \ll 1)$ может быть нарушено (поскольку $U \approx E$), в частности, с ростом размеров рассеивателя (R). Здесь $U = (2\pi\hbar^2/m)\text{Tau}^2$, m – масса нейтрона, E – энергия нейтрона.

Раствор частиц окиси железа (со средним диаметром около 100nm) в глицерине был получен путем перемешивания с применением ультразвукового диспергирования для уменьшения агломерации наночастиц наполнителя. Объемная доля частиц Fe_2O_3 составила для данного образца 2.6%. На рисунке 5 представлены рассчитанные зависимости полных сечений рассеяния ОХН на изолированной сфере Fe_2O_3 в глицериновой матрице в Борновском приближении (—) и по формуле Факсена-Хольтсмарка (—) [2]. Показано, что в диапазоне $kR > 15$ и $R < 45\text{ nm}$, Борновское приближение может быть применено для описания рассеяния ОХН. На рисунке 6 представлены экспериментальная и теоретическая зависимости

$\Sigma_{SMS}(kR)$ для данного образца. Показано [4], что доля изолированных частиц не превышает 23%.

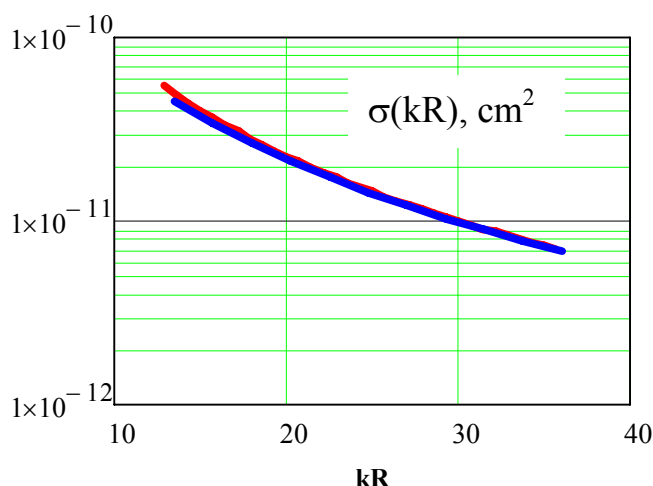


Рисунок 5. Точетические зависимости полных сечений $\sigma(kR)$ рассеяния ОХН на частицах окиси железа ($R = 45$ nm) в глицерине полученные в первом Борновом приближении (—) и по формуле Факсена-Хольтсмарка (—) для идеального точечного детектора

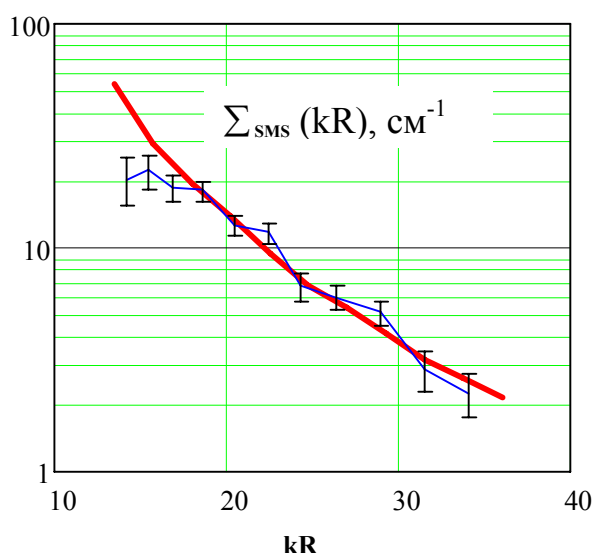


Рисунок 6.

Экспериментальная (—) и теоретическая (—) зависимости $\Sigma_{SMS}(kR)$ сечений рассеяния ОХН на частицах окиси железа в глицерине, полученные для углового размера детектора ОХН $\Omega = 0.43$. Теоретическая зависимость получена с использованием корреляционных функций изолированной сферы ($R = 45$ nm) и функции структуры рактального типа ($D = 2.85$, $\phi_1 = 0.006$, $\phi_2 = 0.02$) в первом Борновском приближении. Здесь ϕ_1 и ϕ_2 – объемные доли изолированных частиц и фракталов соответственно.

Образец композиционного материала Al/PE был получен методом полимеризационного наполнения. Частицы нанопорошка алюминия были покрыты катализатором и помещены в химический реактор, который был, затем, заполнен этиленом. Из образовавшихся гранул термо - прессованием была получена пленка композита толщиной около 250 микрон с полной объемной долей наполнителя 20%. На рисунке 7 представлены рассчитанные зависимости полных сечений рассеяния ОХН на изолированной Al сфере в PE матрице. Показано, что в диапазоне $R < 50$ nm, Борновское приближение может быть

применено для описания рассеяния ОХН. На рисунке 8 представлены экспериментальная и теоретическая зависимости $\Sigma_{SMS}(k)$ для данного образца. Показано[4], что доля изолированных частиц составляет около 70% а фрактальная размерность агломератов $D = 2.25$.

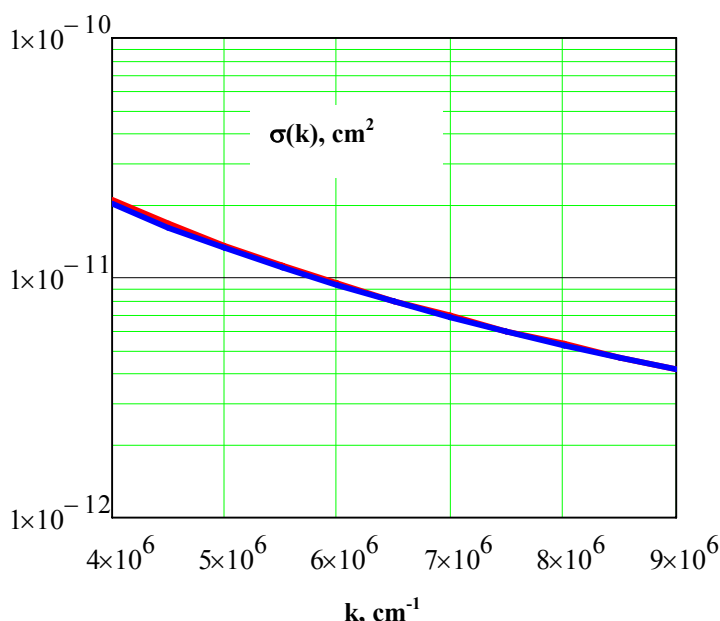
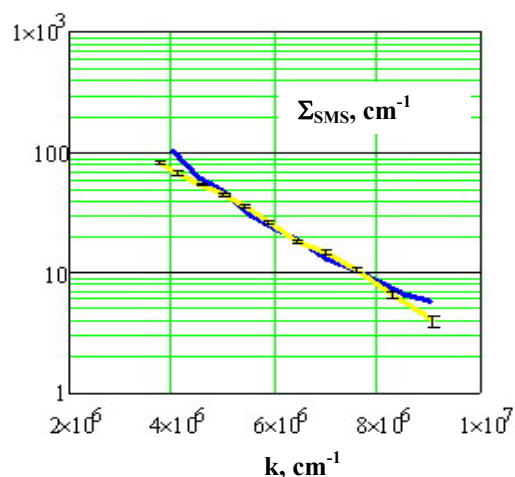


Рисунок 7. Теоретические зависимости полных сечений $\sigma(kR)$ рассеяния ОХН на частицах AL ($R = 50$ nm) в глицерине полученные в первом Борновском приближении (—) и по формуле Факсена-Хольтсмарка (—) для идеального точечного детектора

Рисунок 8.

Экспериментальная — и теоретическая — (сферы + фрактал) зависимости $\Sigma_{SMS}(k)$ для Al частиц в полиэтиленовой матрице. Хорошее согласие с экспериментом достигается при $R = 50$ nm, $D = 2.25$, $R_1 = 2.5$ nm, $\phi_1 = 0.14$. Фрактальная корреляционная функция была использована для описания рассеяния ОХН на пористой поверхности Al частиц, R_1 – радиус пор.



4. Заключение.

Полученные аналитические выражения для зависимостей сечений рассеяния ОХН на структурах фрактального типа, включая поверхностные фрактальные структуры, позволят упростить процесс обработки экспериментальных результатов исследований рассеяния ОХН на НМС различных материалов, а также позволят определять параметры шероховатой и пористой поверхности образца и частиц наполнителя.

Разработанная методика измерений дифференциального сечения рассеяния ОХН с помощью изменения углового размера детектора была применена для определения параметров НМС нанокomпозиционного материала PP/CaCO₃. Определен средний размер частиц, который совпадает с размером, полученным в результате обработки ТЕМ снимка. Чувствительность данного метода, очевидно, напрямую связана с угловым размером детектора и интенсивностью источника ОХН.

С помощью рассеяния ОХН определены параметры частиц нанопорошка Fe_2O_3 в глицериновой матрице и частиц Al в РЕ матрице. Показано, что метод полимеризационного наполнения позволяет получать образцы нанокомпозитов с равномерным распределением частиц наполнителя по объему, что особенно важно при прогнозировании макросвойств нового материала.

5. Литература.

[1] S.V. Maleev, Phys.Rev. B, 52, 13163 (1995)

[2] Отчет по программе ОФН РАН «Нейтронные исследования структуры и фундаментальных свойств материи» за 2007 год Проект 4.6. Исследования надмолекулярной структуры композиционных полимерных материалов и сегнетокерамик нового поколения СС. 34-35, (2007)

[3] S.P. Kuznetsov, I. L. Dubnikova, V. S. Litvin, I.V. Meshkov, A.V. Shelagin, A. I. Udovenko, Acta Physica Polonica A, Vol.117, No.5, 727 (2010)

[4] С.П. Кузнецов, В.Г. Гринев, И.Л. Дубникова, О.Н. Кудинова, И.В. Мешков, Л.А. Новокшонова А.В. Шелагин «РАССЕЯНИЕ ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ» Тезисы XXI Совещания по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010), Москва 16 – 19 ноября 2010

[5] S.P. Kuznetsov, V.G. Grinev, I.L. Dubnikova, O.I. Kudinova, I.V. Meshkov, L.A. Novokshonova, A.V. Shelagin, Very cold neutrons scattering by nanostructures of various nature, X International Conference on Nanostructured Materials (NANO 2010) Abstract book, p.47, Roma, Italy – September 13-17, 2010

4.6.1. Исследование механизмов самоорганизации ассоциирующих полимеров в растворах методами молекулярной гидродинамики и рассеяния холодных нейтронов.

Этап 2010 г.

Исследования явлений агрегирования иономеров в растворах при низкой диэлектрической проницаемости растворителей в зависимости от химической природы и содержания полярных ионогенных групп в макромолекулах методами молекулярной гидродинамики и рассеяния холодных нейтронов.

Дфмн Лебедев В.Т., Орлова Д.Н., Кульвеллис Ю.В.

Методами вискозиметрии, изотермической диффузии, динамического рассеяния света, рассеяния нейтронов изучена самоорганизация иономеров ПС при высокой и низкой степенях полимеризации (1000, 50-100) с ионогенными группами SO_3Na , SO_3Li , SO_3H в средах с диэлектрической постоянной $\epsilon = 2-19$ (бензол, толуол, четыреххлористый углерод, хлороформ (ХФ), тетрагидрофуран (ТГФ)). Анализ данных рассеяния нейтронов в растворах иономеров позволил расшифровать многоуровневую структуру систем, выявить конформационные свойства иономеров, особенности внутри- и межмолекулярных взаимодействий, вызванных ионогенными группами, и самоорганизации иономеров в средах различного химического строения и полярности. Установлено, что поведение иономеров в умеренно полярном окружении (ХФ) описывается теорией самоорганизации сильно ассоциирующих полимеров, однако в слабо полярной среде (толуол, бензол) характер их самоорганизации резко отличается от поведения иономеров в среде умеренной полярности (ХФ) и не соответствует общим классическими моделям открытой (закрытой) ассоциации

4.6.2. Дополнительно к плану:

Димеризация молекул в солевых растворах

Этап 2010

С.н.с. Сибилёв А.И.

Методом оптической спектроскопии в видимой и ультрафиолетовой областях спектра исследовали димеризацию молекул комплексона -индикатора тяжёлых металлов "Торон-1" в разбавленных водных и водно-солевых (солей лития) растворах: фторида-, хлорида- и углекислого лития.

Определены концентрационные интервалы начала димеризации в бессолевых водных и тяжеловодных растворах. При этом обнаружены спектральные проявления изотопного состава растворителя (лёгкой и тяжёлой воды).

В солевых растворах выявлено преобладание анион-комплексонных взаимодействий.

Проект 4.7

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

к.ф.м.н. В.В. Исаев-Иванов, к.ф.м.н. М.В. Филатов,

д.ф.м.н. М.Г. Петухов, к.ф.м.н. Д.В. Лебедев

Этапы 2010

Аннотация. Реакция гомологичной рекомбинации ДНК (обмен гомологичными участками) является одной из основных молекулярных реакций у высших, включая человека, и у бактерий. У высших она важна для репродуктивной функции, а у бактерий отвечает за репарацию повреждений у ДНК. Ответственным за проведение этой реакции является класс белков, называемый ДНК-трансферазами (RecA-подобные белки). Одной из самых непонятных стадий этой реакции является поиск гомологии, когда на спиральном филаменте RecA белка находится комплекс из одностековой и двустековой ДНК и после поиска гомологии происходит обмен гомологичными нитями. Предполагается, что поиск гомологии возможен при наличии крупномасштабных движений этого комплекса. В отчетный период нами впервые была предпринята попытка разработки методов анализа крупномасштабных движений ДНК-трансфераз (RecA из *E. coli* и *D. Radiodurans*) из траекторий молекулярной динамики (МД) этих комплексов. Для тримера RecA из *D. Radiodurans* было показано, что крупномасштабная динамика RecA мономера может быть описана в терминах относительного движения 7 субдоменов. Опираясь на эти движения был сконструирован филамент RecA белка (50-мер) для которого были рассчитаны спектры малоуглового нейтронного рассеяния для каждой структуры из траектории МД (с шагом 10 псек).

4.7.1. - Исследование структурных различий в упаковке хроматина в составе целых ядер эритроцитов курицы, лейкоцитов селезенки крыс, которые являются неактивными и умеренно активными ядрами нормальных клеток и ядер клеток человека HeLa и линии A238 хомяка, которые являются аномально пролиферирующими, злокачественно трансформированными клетками, используя возможности нейтронного и рентгеновского малоуглового рассеяния, а также атомной силовой микроскопии;

Ранее в работе [1] с помощью малоуглового рассеяния нейтронов нами было показано, что спектры МУРН ядер клеток эритроцитов кур и ядер клеток выделенных из перевиваемой культуры клеток аденокарциномы шейки матки человека HeLa, в области рассеянных векторов Q , соответствующих нуклеосомной структуре хроматина, имеют существенные отличия. Сравнительный анализ этих спектров позволил нам сделать предположение, что в аномально пролиферирующих и злокачественно трансформированных клетках упаковка нуклеосомной структуры, в среднем по ядру менее плотная, чем в ядрах эритроцитов кур, клетки которых находятся в стадии G0 и делиться не могут. Чтобы убедиться насколько это предположение распространяется на другие типы клеток необходимо было провести измерения на ядрах выделенных из других клеток. Однако для некоторых типов клеток выделение ядер в количествах необходимых для исследований методом МУРН сталкивается с существенными препаративными процедурами. Гораздо меньшее количество материала для проведения измерений необходимо при использовании малоуглового рентгеновского рассеяния МУРР. При этом получаемая информация аналогична МУРН, за исключением возможностей контрастирования.

В отчетный период была отработана методика измерения МУРР на ядрах клеток выделенных из перевиваемой культуры клеток аденокарциномы шейки матки человека HeLa,

аденокарциномы молочной железы человека MCF-7, и из трансформированных клеток эндотелия человека ECV. Измерения проводились на установке NANOSTAR фирмы «Брюкер», в области величин рассеянных векторов Q , соответствующих нуклеосомной структуре хроматина исследуемых ядер. В качестве контрольных ядер использовались ядра клеток эритроцитов кур, которые приготавливались в соответствии с методикой опубликованной в [2]. Выделение ядер клеток MCF-7 и ECV проводилось аналогично ядрам клеток HeLa, с последующим фиксированием глютаровым альдегидом, как описано в [1].

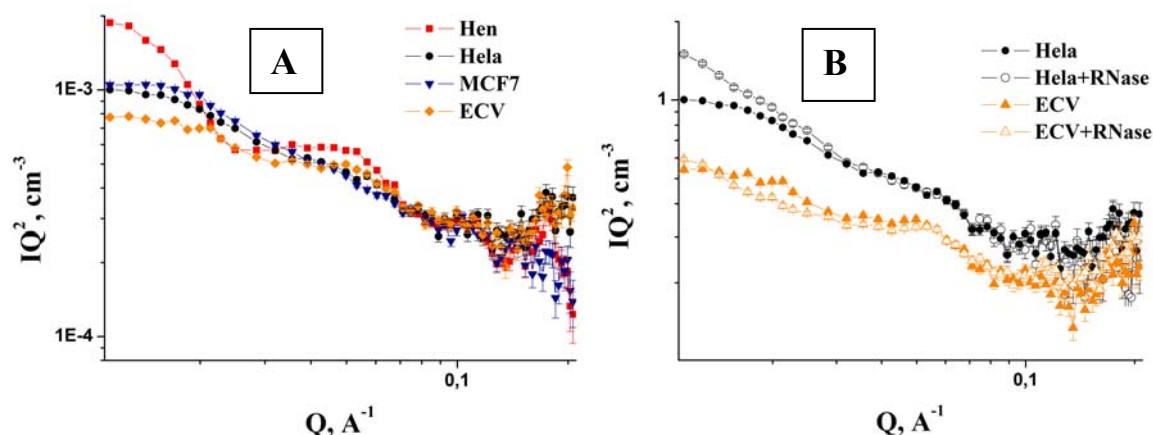


Рис.1 Кривые рентгеновского рассеяния исследуемых ядер, представленные в координатах Кратке; А - кривые рассеяния ядер курицы, HeLa, MCF-7 и ECV, после выделения и фиксации глютаровым альдегидом, В – кривые рассеяния ядер клеток HeLa и ECV, подвергнутых обработке RNA-зой.

Кривые МУРН, которые были получены на ядрах эритроцитов курицы (ЯЭК) и ядрах лейкоцитов крыс (ЯЛК) и приведены в [1], по своей форме демонстрировали признаки существования нуклеосомной структуры в составе хроматина этих ядер. Это пик в области $Q \sim 0.06 \text{ \AA}^{-1}$, ондуляция в области $Q \sim 0.03 \text{ \AA}^{-1}$ и спад кривой в области больших Q по закону близкому к Породу. Сравнение экспериментальных кривых МУРН, полученных на этих ядрах с модельными кривыми на основе рентгеноструктурных данных для моонуклеосомы, давало совпадение по форме этих кривых в области Q от 0.03 до $0.15 \text{ \AA}^{-1}$. Это совпадение говорило о том, что на уровне организации моонуклеосом структура нуклеосом в составе хроматина этих ядер близка к данным рентгеноструктурного анализа. Абсолютно противоположный результат был получен в этой же работе на ядрах из аномально пролиферирующих клеток человека HeLa и китайского хомячка A238. Форма кривых МУРН для этих ядер в том же диапазоне рассеянных векторов, который соответствует нуклеосомной структуре, не содержал признаков характеризующих наличие нуклеосомной структуры. Не было пика, отсутствовала ондуляция. Спад кривой в области больших Q был более близок к Гауссовой зависимости (особенно у A238), чем к зависимости Порода.

На рис. 1А приведены кривые малоуглового рентгеновского рассеяния для ядер выделенных из клеток эритроцитов курицы (ЯЭК), HeLa, MCF-7 и ECV. Из рисунка видно, что на кривой принадлежащей ЯЭК, как и на кривых МУРН [1], присутствует пик в области $Q \sim 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ и ондуляция в области $Q \sim 0.03 \text{ \AA}^{-1}$, которые являются признаками нуклеосомной структуры. На кривой рассеяния принадлежащей ядрам клеток HeLa, также как и на кривых МУРН для этих ядер, пик и ондуляция, как признаки нуклеосомной структуры, отсутствуют. Таким образом, для этих ядер данные МУРН и МУРР совпадают. Кривая МУРР для ядер из клеток MCF-7, приведенная на рис 1А, по форме очень близка к аналогичной кривой для ядер клеток HeLa. Кривая МУРР для ядер из клеток ECV по форме зависимости от Q носит промежуточный характер.

На рис. 2В приведены кривые МУРР для ядер из клеток HeLa и ECV, из которых видно, что обработка этих клеток RNA-зой, которая удаляет RNA, не влияет на форму кривой рассеяния в области соответствующей нуклеосомной структуре.

Работы в этом направлении будут продолжены.

Цитированная литература:

1. Исаев-Иванов В.В., Лебедев Д.В., Лаутер Х., Пантина Р.А., Куклин А.И., Исламов А.Х., Филатов М.В. Сравнительный анализ нуклеосомной структуры клеточных ядер - малоугловое нейтронное рассеяние.// ФТТ, 2010, №5
2. Lebedev DV, Filatov MV, Kuklin AI, Islamov AKh, Kentzinger E, Pantina R, Toperverg BP, Isaev-Ivanov VV. Fractal nature of chromatin organization in interphase chicken erythrocyte nuclei: DNA structure exhibits biphasic fractal properties. FEBS Lett. 2005 Feb 28;579(6):1465-8.

4.7.2.- Сравнительный анализ структур нуклеопротеидных комплексов трансфераз RecA (*E.coli* и *D.radiodurans*), и RadA (*T.termophilus*) в различных функциональных состояниях методом атомно-силовой микроскопии и малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния.

- Молекулярное моделирование нуклеопротеидных комплексов RecA подобных трансфераз и супернуклеосомной структуры хроматина эукариот высших

Реакция гомологичной рекомбинации ДНК (обмен гомологичными участками) является одной из основных молекулярных реакций у высших, включая человека, и у бактерий. У высших она важна для репродуктивной функции, а у бактерий отвечает за репарацию повреждений у ДНК. Ответственным за проведение этой реакции является класс белков, называемый ДНК-трансферазами (RecA-подобные белки). Одной из самых непонятных стадий этой реакции является поиск гомологии, когда на спиральном филаменте RecA белка находится комплекс из одностандартной и двунитевой ДНК и после поиска гомологии происходит обмен гомологичными нитями. Предполагается, что поиск гомологии возможен при наличии крупномасштабных движений этого комплекса. В отчетный период нами впервые была предпринята попытка разработки методов анализа крупномасштабных движений ДНК-трансфераз (RecA из *E. coli* и *D. Radiodurans*) из траекторий молекулярной динамики (МД) этих комплексов.

4.7.3. Моделирование молекулярной динамики белков RecA.

Существующие методы анализа спектров малоуглового рассеяния макромолекул, реализованные в популярных программных пакетах, таких как, например, ATSAS, работают в предположении, что рассеиватели монодисперсны и имеют фиксированную форму. Реальные белковые молекулы в растворе могут как обладать значительной внутренней подвижностью, так и иметь несколько устойчивых конформационных состояний.

Моделирование молекулярной динамики (МД) белков RecA из *E. Coli* и *D. radiodurans* проводилось с помощью пакета GROMACS в поле GROMOS96 версии 53а6 в периодическом водном боксе. Для моделирования МД филаментов белков RecA использовалась минимальная единица, описывающая взаимодействие мономеров в филаменте — белковый тример, сконструированный на основе ранее опубликованных результатов рентгеноструктурного анализа. Структура построенного тримера белка RecA из *D. radiodurans* приведена на Рис. 1.

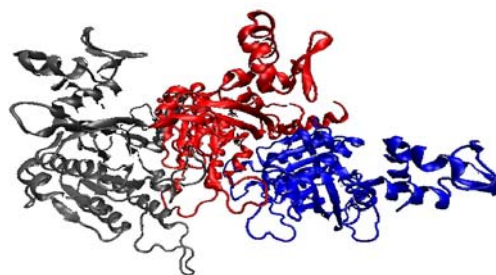


Рис.1 Тример белка RecA из *D. Radiodurans*.

В результате были получены молекулярно-динамические траектории, описывающие движение атомов в тримере, длительностью 10 нс и с шагом 10 пс для белков RecA из *E. Coli*, *P. aeruginosa* и *D. radiodurans*, а также их комплексов с АТФ.

4.7.4. Анализ МД траекторий различных белков RecA.

По результатам моделирования МД были построены карты подвижности мономеров белка RecA в составе тримера (Рис. 2), показывающие отклонение C_{α} атомов аминокислотных остатков в зависимости от времени. Основной вклад в подвижность мономера обусловлена движением С-концевого домена и регионов, соответствующим неструктурированным метлям L1 и L2. Подвижность С-концевого домена белка из *D. radiodurans* была заметно выше, чем в других исследованных белках этого семейства, при этом во всех случаях связывание кофактора (АТФ) приводило к значительному ограничению подвижности.

Для дальнейшей характеристики конформационных изменений в белке RecA из *D. radiodurans* был проведен анализ всех структур, составляющих МД траекторию, методом принципиальных компонент (Principal Component Analyses PCA) в пространстве координат C_{α} атомов. Проекция траектории на первую принципиальную ось (Рис. 3) подтверждает, что основные конформационные изменения в мономере белка связаны с поворотом С-концевого домена. Кроме того, первая принципиальная компонента траектории включает в себя движение N-концевой спирали белка и деформацию бета-структур в центральном домене. Наблюдаемая корреляция движения пространственно удаленных друг от друга N- и С-концевых доменов может иметь важное функциональное значение. В филаменте N-концевая спираль образует интерфейс с соседними мономерами, и ее конформационная подвижность напрямую связана с крупномасштабными изменениями геометрии филамента при связывании субстрата и переходе белка из неактивного в активное состояние.

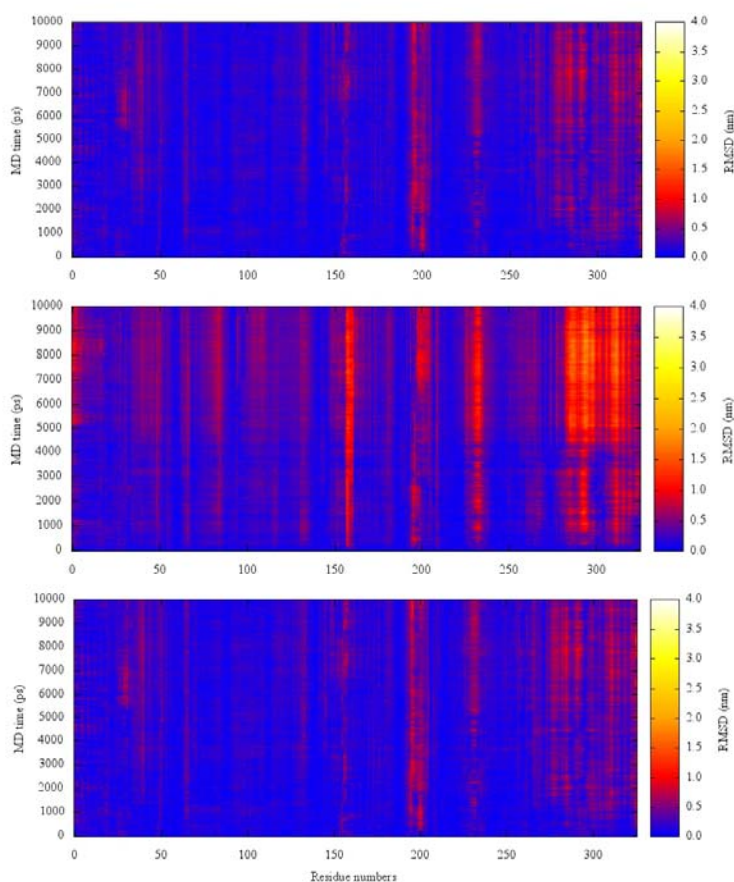


Рис. 2. Карты подвижности белков RecA по данным моделирования МД: *E. Coli*, *D. Radiodurans* и *D. Radiodurans*, комплекс с АТФ.

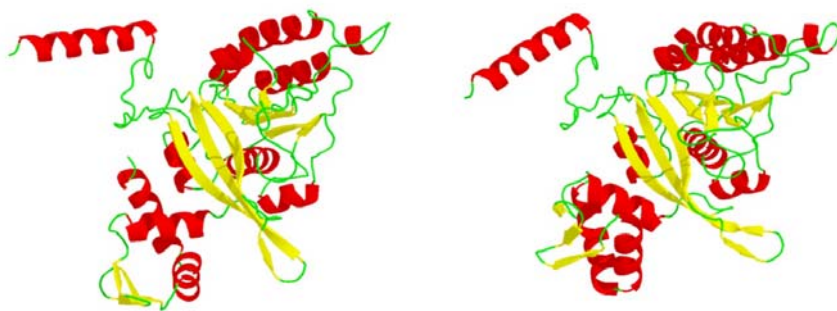


Рис. 3.
Конформационные изменения в мономере RecA из *D. radiodurans*, обусловленные движением вдоль первой принципиальной оси.

Для дальнейшего анализа подвижности отдельных доменов белка RecA был проведено разбиение белкового мономера на жесткие домены, при котором динамика белка может быть описана как сумма небольших конформационных изменений внутри доменов и движения этих доменов как целого. Для этого использовался итеративный алгоритм, в котором на каждом шаге для каждого домена U_i методом наименьших квадратов ортогональным преобразованием $U_i \rightarrow \tilde{U}_i$ осуществлялась подгонка к начальной структуре

этого домена, рассчитывалось среднеквадратичное отклонение $r_i = \frac{1}{Nn_i} \sum_{j,k} \|ref_{ij} - U_{ijk}\|^2$, где N — число структур в траектории, n_i — число атомов в домене, ref_i — начальная структура домена. В процессе работы алгоритма находилось оптимальное разбиение белка на домены, при котором минимизировалась сумма r_i по всем доменам.

Результат разбиения мономера белка RecA из *D. radiodurans* на 7 доменов показан на Рис.4. Как видно из Рис.4, подвижность как С-концевого, так и N-концевого (за исключением участка с 18 по 32 аминокислотный остаток) домена белка описывается как поворот и смещение участков неизменной структуры относительно центрального домена белка, который не претерпевает значительных конформационных изменений.

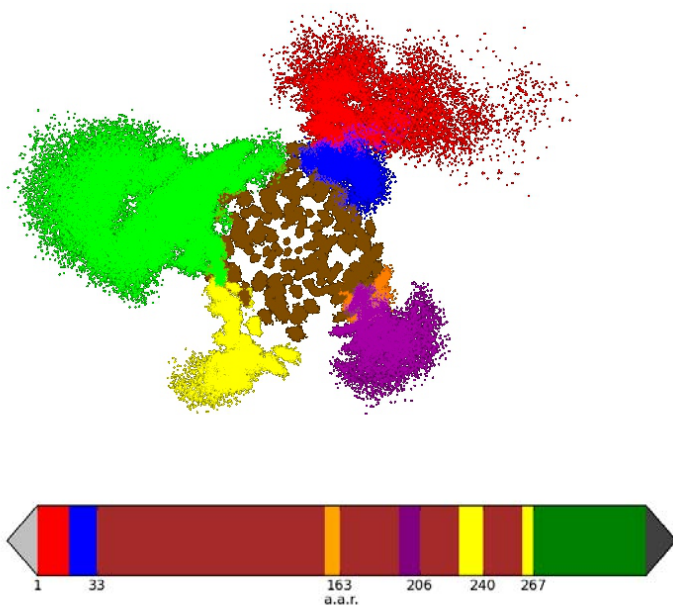


Рис. 4. Разбиение мономера белка RecA из *D. radiodurans* на 7 «жестких» доменов:

красный	1-17
синий	18-32
желтый	227-239, 261-266
оранжевый	155-162
фиолетовый	195-205
зеленый	267-327
коричневый	Ц. Д.

4.7.5. Моделирование геометрии филамента на основе данных МД.

МУРН позволяет экспериментально определить геометрические параметры спиральных филаментов белков, такие, как шаг спирали, количество мономеров на один виток, и поперечный радиус гирации. Для сравнения результатов МД с имеющимися

данными МУРН мы экстраполировали результаты на геометрию филамента. Поскольку конформационная подвижность центральных доменов незначительна (Рис. 5), взаимная ориентация двух соседних центральных доменов в тримере определяет геометрию филамента. Распределение полученных таким образом параметров в МД траектории показано на Рис. 5. Максимумы распределений близки к полученным ранее в экспериментах МУРН для неактивного филамента белка. При этом распределение по шагу спирали имеет дополнительный максимум в районе 8 нм, что близко к активной форме белка в комплексе с АТФ и ДНК.

Проведенное разбиение мономера на домены также позволило провести анализ движений отдельных доменов относительно центрального методом PCA. Как видно из Рис.6, первая принципиальная компонента движения N-концевого домена хорошо коррелирует как с шагом спирали, так и с радиусом гирации филамента, что хорошо согласуется с тем фактом, что N-концевая альфа-спираль является частью межмономерного интерфейса. В то же время существует также корреляция движения С-концевого домена с шагом спирали, при этом наблюдается два различных состояния, которые соответствуют двум максимумам в распределении величины шага филамента по МД траектории.

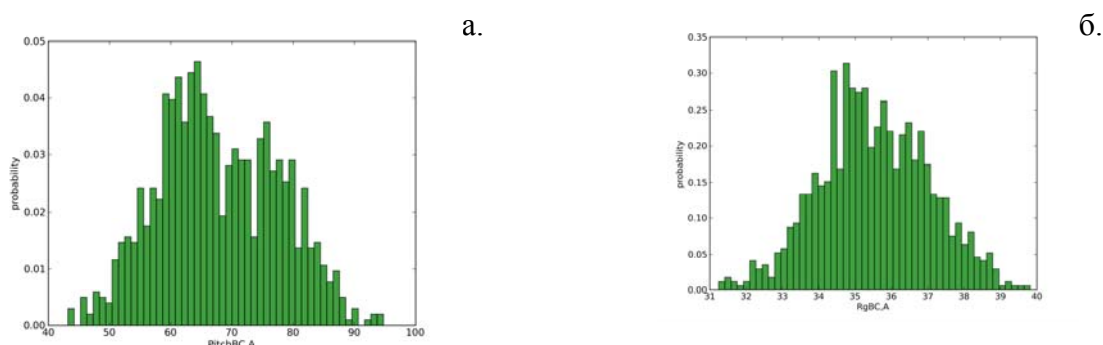
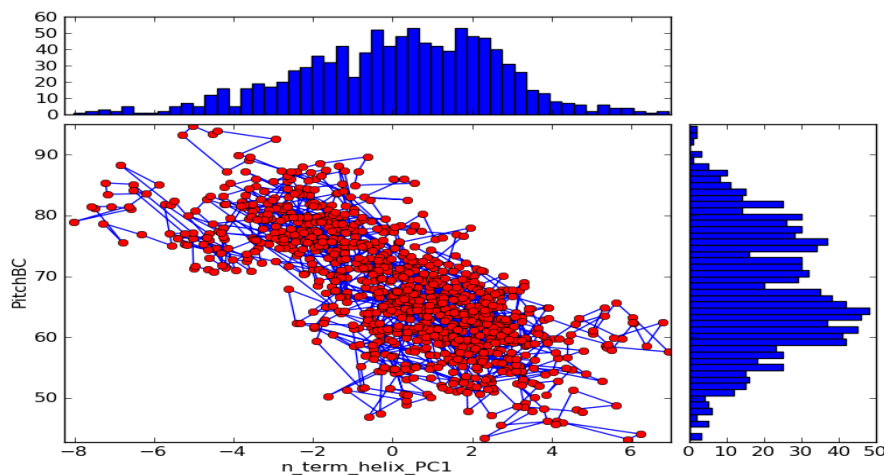


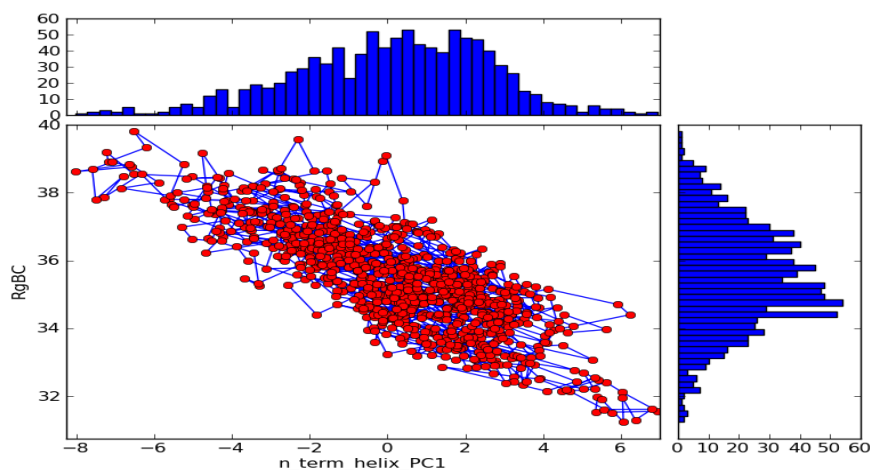
Рис 5. Распределение величины шага филамента (а) и поперечного радиуса гирации (б).



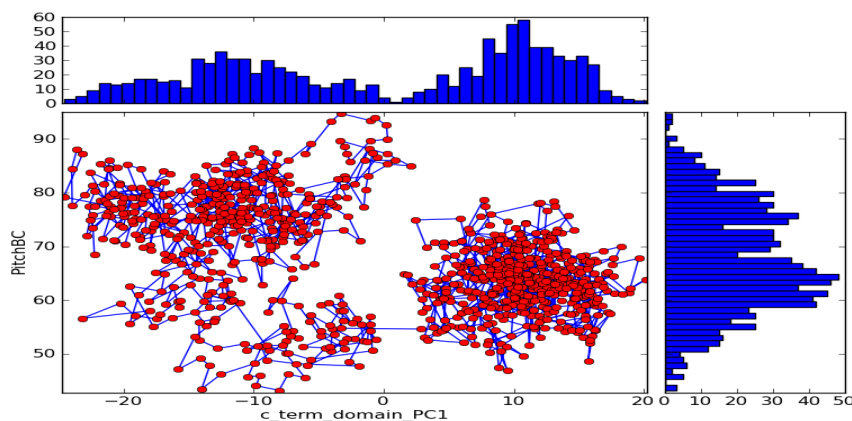
а.

Рис. 6. Корреляция движения доменов вдоль первых принципиальных осей белка и геометрии филамента.

- а.) N-концевой домен и шаг спирали.
- б.) N-концевой домен и радиус гирации
- с.) С-концевой домен и шаг спирали.



b.



c.

4.7.6. Использование МД для интерпретации данных МУРН

Кроме основных геометрических параметров филамента, спектры МУРН несут информацию о структуре мономеров, образующих филамент. Значительная подвижность белков ResA осложняет интерпретацию спектров малоуглового рассеяния филаментами этих белков. Мы попытались использовать полученные результаты МД для поиска основных конформационных состояний белкового мономера.

На спектрометре KWS-1 (Мюнхен, Германия) были получены спектры малоуглового рассеяния для белка RecA из *D.radiodurans* в диапазоне переданных импульсов от 0.002 до 0.18 Å⁻¹. С другой стороны, на основании структуры тримера были построены однородные филаменты длиной 50 мономеров, для которых по формуле Дебая были рассчитаны спектры МУРН. Сравнение полученных результатов (Рис.7) показало, что экспериментальный спектр плохо описывается одной отдельно взятой структурой из траектории.

Для определения наиболее заселенных состояний белка был проведен анализ МД траекторий методом главных компонент в пространстве двугранных углов основной аминокислотной цепи. Проекция траектории на две главные оси показало существование трех кластеров, соответствующих наиболее устойчивым состояниям мономера (Рис.7). Полученные результаты были использованы для учета полидисперсности системы в расчете спектров МУРН. Тем не менее, как видно из Рис.7, полученные спектры также не в состоянии описать экспериментальные данные, что указывает на необходимость построения более сложной МД модели, которая-бы описывала конформацию большего числа мономеров в составе филамента.

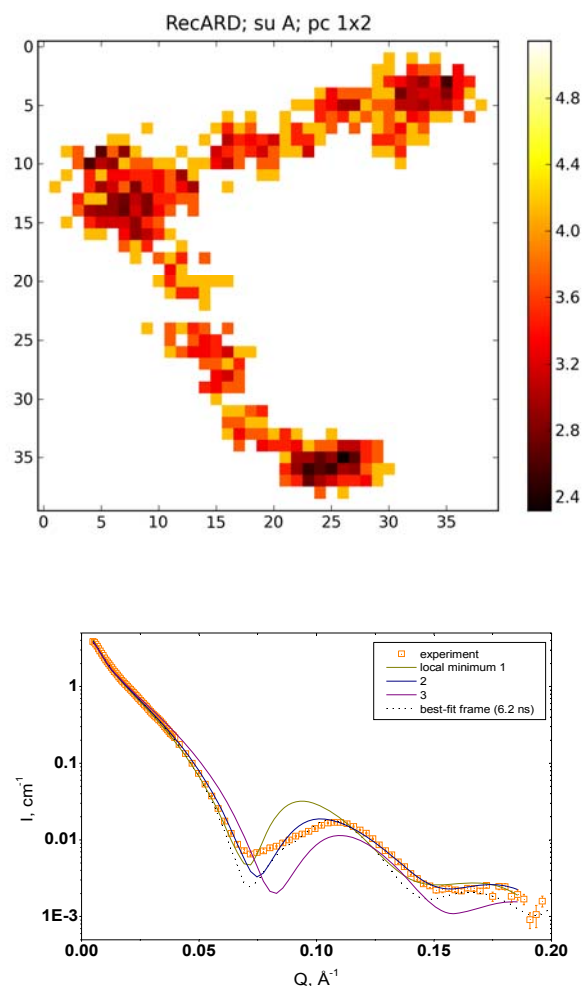


Рис.7 (вверху) карта заселенности проекции структур на две главные оси в пространстве ϕ , ψ углов аминокислотной цепи; (внизу) спектр МУРН белка RecA из *D.radiodurans* (символы), расчетный спектр одной структуры из траектории с наименьшим отклонением от экспериментального

Публикации 2010г:

1. Исаев-Иванов В.В., Лебедев Д.В., Лаутер Х., Пантина Р.А., Куклин А.И., Исламов А.Х., Филатов М.В. Сравнительный анализ нуклеосомной структуры клеточных ядер - малоугловое нейтронное рассеяние. // ФТТ, 2010, №5
2. Irina V. Ogneva, Dmitry V. Lebedev, and Boris S. Shenkman Transversal Stiffness and Young's Modulus of Single Fibers from Rat Soleus Muscle Probed by Atomic Force Microscopy, Biophysical Journal 2010, V 98, P 418–424.
3. Andrey V. Ilatovskiy, Dmitry V. Lebedev, Michael V. Filatov, Mikhail Grigoriev, Michael G. Petukhov, and Vladimir V. Isaev-Ivanov Modeling and SANS Spectra of Chromatin Supernucleosomal Structures at Genome Scale, J.Appl Phys (in press)
4. Isaev-Ivanov V.V., Lebedev D.V., Lauter H., Pantina R.A., Kuklin A.I., Islamov A.Kh., Filatov M.V. "Comparison of nucleosome organization in the nuclei of normal and abnormally proliferating cells by small angle neutron scattering "European Biophysics Journal (in press)

Конференции 2010г:

1. Andrey V. Ilatovskiy, D. V. Lebedev, M. G. Petukhov, V. V. Isaev-Ivanov, 2010. SANS Spectra and Modeling of Chromatin Supernucleosomal Structures at Genome Scale" // The Eleventh International Conference on Surface X-ray and Neutron Scattering SXNS-11. Abstracts. Evanston, IL, USA. PO-A-45
2. Andrey V. Ilatovskiy, Y. Garmaj, A. Shvetsov, D. V. Lebedev, M. G. Petukhov, V. V. Isaev-Ivanov, 2010. " Molecular Dynamics and Large-Scale Conformational Flexibility of DNA-binding Proteins" // The

3. Shvetsov A, Garmay Y, Lebedev D, Radulescu A, Petukhov M, Isaev-Ivanov V. "Molecular dynamics and large-scale conformational flexibility of RecA proteins" // Swedish Neutron Scattering Society (SNSS) 14th Annual Meeting, 24-27th of August 2010, Lund, Sweden.
4. Ю.П. Гармай, А.В. Швецов, А. Радулеску, Д.В. Лебедев, В.В. Исаев-Иванов «Исследование конформационной подвижности белка RecA из *D. Radiodurans* с помощью анализа молекулярно-динамических траекторий» // XXI Собрание по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010), Тезисы, РИЦ «Курчатовский институт» Москва, Россия, С99.
5. А.В. Швецов, Ю.П. Гармай, Д.В. Лебедев, М.Г. Петухов, В.В. Исаев-Иванов, «Расчет и анализ молекулярной динамики ДК-связывающих белков для моделирования данных нейтронного рассеяния», // XXI Собрание по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010) //, Тезисы, РИЦ «Курчатовский институт» Москва, Россия, С109.
6. Д.В. Лебедев, Ю.П. Гармай, А. Радулеску, А.В. Швецов, М.Г. Петухов, В.В. Исаев-Иванов, «Анализ конформационной подвижности ДНК-связывающих трансфераз и их комплексов на основе данных МУРН», // XXI Собрание по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010) //, Доклад, РИЦ «Курчатовский институт» Москва, Россия, С27.
7. В.В. Исаев-Иванов, Д.В. Лебедев, А.В. Швецов, Ю.П. Гармай, Х. Лаутер, Р.А. Пантина, А.И. Куклин, А. Радулеску, А.Х. Исламов, М.Г. Петухов, М.В. Филатов, «Малоугловое рассеяние нейтронов при исследовании нуклеопротеидных комплексов», // XXI Собрание по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010) //, Доклад, РИЦ «Курчатовский институт» Москва, Россия, С23.

Проект 4.8

Изучение стохастических связей и спектров тепловых флуктуаций

к. ф.-м. н Геращенко О.В., д. ф.-м. н. С.Л. Гинзбург,
к. ф.-м. н. Б.И. Якубович, А.И. Сибилев

4.8.1. Продолжить исследование температурной зависимости линейной и нелинейной частей магнитной восприимчивости гранулярных Fe-As сверхпроводников.

Геращенко О.В., снс Хавронин В.П.

Проведено исследование образцов $\text{LaFeAsO}_{0.85}\text{F}_{0.15}$, произведенных в Белорусском госуниверситете модифицированным методом твердофазного спекания. Обнаружено, что предоставленные образцы являются ферромагнетиками и обладают высокой проводимостью, в отличие от изготовленных ранее. Явление сверхпроводимости в образцах не наблюдается вплоть до 4.2 К.

4.8.2. Исследовать электрические флуктуации в тонкослойной джозефсоновской среде как физической реализации квазидвумерной случайной джозефсоновской сети.

кфмн Геращенко О.В., снс Хавронин В.П.

Продолжено экспериментально исследование обнаруженной нами ранее лавинообразной динамики проникновения магнитного потока в джозефсоновскую среду - гранулярный высокотемпературный сверхпроводник.

По результатам работы сделан доклад:

О.В. Геращенко «Самоорганизованное критическое состояние в джозефсоновской среде: эксперимент» Труды 13 Международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов" С. 120-123. Ростов-на-Дону – Люо, 16-21 сентября 2010.

4.8.4. Исследование электрического шума в полупроводниках, вызванного захватом и эмиссией носителей заряда ловушками. Анализ спектров шума. Изучение связи спектральных характеристик шума с характеристиками полупроводников и статистическими свойствами процессов захвата и эмиссии носителей.

Б. И. Якубович

Исследовался электрический шум в полупроводниках, возникающий вследствие захвата и эмиссии носителей заряда ловушками. Вычислено выражение для спектра шума, вызванного

ловушкой при заданных в общем виде распределениях времен нахождения ловушки в свободном и заполненном состояниях. Вычислено выражение для спектра электрических флуктуаций в полупроводнике, вызванных совокупностью имеющихся в нем ловушек. Оно может быть использовано для определения интенсивности и вида спектра шума в многочисленных типах полупроводниковых материалов.

Проанализированы общие закономерности шума в полупроводниках, вызванного ловушками. Установлены виды зависимостей спектральной плотности шума от характеристик полупроводника и параметров образца. Определены виды зависимостей спектральной плотности шума от характеристик ловушек. Изучена связь спектральных характеристик шума со статистическими свойствами процессов захвата и эмиссии носителей.

Публикации

1. Б. И. Якубович Нелинейный электрический низкочастотный шум в полупроводниках. Нелинейный мир. 2010. №3. С. 137-141.
2. Б. И. Якубович О тепловом шуме в проводниках. Нелинейный мир. 2010. №10.

Проект 4.9

Исследование наноструктурных материалов, динамики решетки смешанных соединений и нанокompозитных материалов методом рассеяния нейтронов

ФТИ РАН: д. ф.-м. н. С.Б. Вахрушев

ПИЯФ РАН: проф. А.И. Огороков,
к. ф.-м. н. С.В. Григорьев, к. ф.-м. н. И.В. Голосовский

4.9.1. Исследования систем "ядро-оболочка" с обменным подмагничиванием. Голосовский И.В.

Необычные свойства гетерогенных магнитных наноструктур, которые используются в спинтронике, обусловлены существованием интерфейса – нанометрового слоя, разделяющего компоненты с разными магнитными свойствами. Этот слой чувствителен к внешним воздействиям, что привлекает большое внимание в плане практического применения. В отчетном году продолжены структурные исследования наносистем "ядро-оболочка", которые состоят из антиферромагнитного ядра и ферромагнитной оболочки, в которых роль интерфейса играет поверхность ядра.

Этапы 2010

4.9.1.1 Система MnO/Mn_3O_4 с тонкой оболочкой. Антиферромагнитный порядок в ядре MnO индуцированный интерфейсным слоем.

Система – MnO/Mn_3O_4 . В текущем году работа по этой системе завершена [1]. Методами дифракции нейтронов и рентгеновского излучения, которые были дополнены электронной микроскопией (ТЕМ), измерением спектров энергетических потерь электронов (EELS), магнитными измерениями и методом парамагнитного резонанса (ESR) получены следующие результаты.

- Показано, что структура оболочки зависит от размеров наночастиц. С увеличением размеров ядра и уменьшением толщины оболочки структура последней трансформируется от $\gamma-Mn_2O_3$ к Mn_3O_4 .
- Из уширения дифракционных линий получены оценки размеров наночастиц, причем оказалось, что диаметр магнитных доменов в ядре MnO меньше, чем диаметр самого ядра.
- Температуры магнитного упорядочения оказались выше, чем температура перехода в обычном образце. Чем больше размер ядра, тем меньше температура перехода.

- В образцах с малым ядром наблюдался индуцированный ферромагнитный порядок в оболочке, тогда как в образцах с тонкой оболочкой наблюдался "симметричный эффект" – индуцированный антиферромагнитный порядок в ядре. Обнаруженный магнитный порядок, который существует много выше температур магнитного упорядочения в обычных оксидах, соответствует так называемому эффекту близости, когда ферромагнитный момент интерфейса индуцирует моменты в оболочке и ядре. В этом случае стабильность магнитной системы обусловлена обменным взаимодействием между ядром и оболочкой.
- В образцах с тонким ферромагнитным слоем наблюдался необычный процесс "фрагментации" магнитных доменов, который начинается при приближении к точке магнитного перехода сверху и быстро исчезает при понижении температуры.

. План по системам "ядро-оболочка" выполнен полностью и результаты опубликованы:

López-Ortega, D. Tobia, E. Winkler, I. V. Golosovsky et al, "Size dependent passivation shell and magnetic properties in antiferromagnetic/ferrimagnetic, core/shell MnO nanoparticles", [JACS](#) **132**, 9398, 2010.

4.9.1.2. Временная эволюция структуры и морфологии новой системы - $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{FeO}$.

В системах "ядро-оболочка" оболочка синтезируется в процессе окисления ядра на воздухе (пассивация). Поэтому исследование временной эволюции структуры и свойств наночастиц "ядро-оболочка" – ключ к пониманию необычных свойств гетерогенных магнитных систем.

Профильный анализ рентгеновских спектров показал, что наносистемы $\text{FeO}/\text{Fe}_3\text{O}_4$ хорошо описываются моделью трех фаз: оболочка магнетита Fe_3O_4 ; ядро Fe_xO со структурой NaCl и, наконец, новая фаза со структурой сильно нестехиометрического магнетита. Анализ показывает, что во всех случаях ядро соответствует формуле Fe_xO с $x \sim 0.8$. Однако, из-за сильной корреляции определить x с разумной точностью невозможно. Поэтому эта величина была взята из спектров энергетических потерь электронов. Что касается оболочки, оказалось, что она точно соответствует стехиометрическому магнетиту.

Оказалось, что со временем диаметр ядра, а также суммарный размер системы, монотонно возрастают, однако после нескольких недель система стабилизируется. Интересно отметить, что намагниченность насыщения, измеренная из петли гистерезиса и площадь интерфейса, рассчитанная из дифракционных данных, показывают подобное поведение. Возможно, это отражает простой факт, что магнитный сигнал пропорционален площади интерфейса.

Третья фаза хорошо описывается в структуре шпинели с большим содержанием дефектов, с общей формулой $\text{Fe}_{0.35}\text{O}$. Средний дифракционный размер фазы ~ 0.7 нм. Любопытно отметить, что на микрофотографиях (рисунок 1) ясно видны слабые кольца

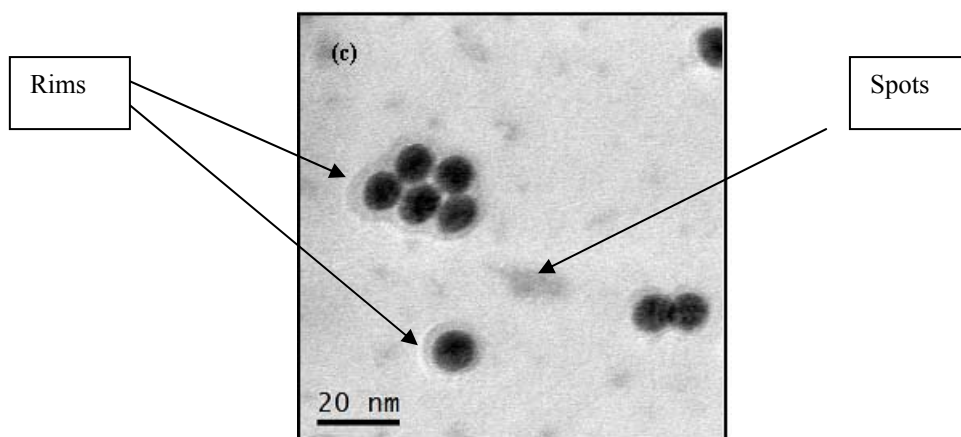


Рис. 1. Типичная микрофотография системы FeO/Fe_3O_4 (ТЕМ).

Так как оболочка и ядро имеет примерно одинаковую плотность по железу, рентгеновский контраст между ядром и оболочкой мал и они практически неразличимы. Однако кольца "прозрачные", что указывает на небольшое количество железа в этих образованиях. По-видимому, эти объекты (также отдельные пятна) и являются третьей фазой, обнаруженной в дифракционных спектрах. Дополнительные указания, что вокруг наносистемы "ядро-оболочка" действительно образуется еще одна оболочка получены из рентгеновской малоугловой дифракции.

На первом этапе в качестве модели использовался ансамбль изотропных сфер с гауссовым распределением диаметров. Оказалось, что аппроксимация малоуглового спектра может быть существенно улучшена добавлением оболочки. Следует подчеркнуть, что новая оболочка не является оболочкой Fe_3O_4 , поскольку ядро Fe_xO и оболочка Fe_3O_4 имеют

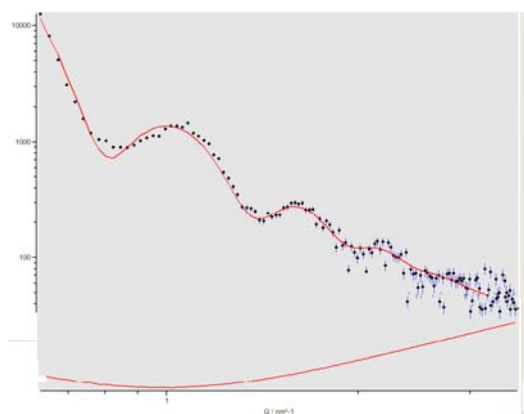


Рис. 2. Типичный профиль малоугловой рентгеновской дифракции (SAXS), на системе FeO/Fe_3O_4 и его аппроксимация. Внизу показан фон, который, после долгой проверки, оказалось лучше всего подходит для аппроксимации. Эта модель фона обусловлена тепловыми колебаниями.

сходную плотность и содержание железа! Размеры, полученные из подгонки малоугловых спектров, хорошо подходят к оболочке, которая видна как прозрачное кольцо в электронной микроскопии и соответствует третьей фазе.

4.9.1.3. Атомные колебания в "ограниченной геометрии". Нейтронографические исследования Ga и Bi, наноструктурированных внутри пористого стекла.

Атомное движение в наночастицах легкоплавких металлов, синтезированных в пористом стекле. Современное состояние методик по исследованию атомных колебаний с помощью рассеяния нейтронов было рассмотрено в публикации [2]. В качестве примера,

представлены первые экспериментальные результаты дифракционных исследований висмута, синтезированном в пористом стекле. Установлено, что наночастицы висмута, с характерным размером 240(18) Å, синтезированные в пористом стекле, кристаллизуются в той же модификации, что и обычный висмут. Обнаружены внутренние напряжения, что, по-видимому, обусловлено свойством висмута увеличивать объем при затвердевании.

Очень необычное поведение обнаружено в наноструктурированном галлии. Нейтронографические исследования показали, что наночастицы Ga, синтезированные в пористом стекле текстурированы. Это первое обнаружение текстуры в материале, наноструктурированном в пористом стекле, где порошковое усреднение обычно хорошо выполняется. В случае быстрого охлаждения образца текстура становится более выделенной, чем при медленном охлаждении. Заметные изменения текстуры наблюдаются при температурах ниже 7 К, в диапазоне, где наблюдался сверхпроводящий переход.

Учет текстуры при обработке нейтронограмм путем разложения по сферическим гармоникам (программы GZAS и MAUD) сделал возможным анализ температурной зависимости среднеквадратичного отклонения атомов. Обнаружено заметное уменьшение температуры Дебая в наноструктурированном состоянии, что связывается с присутствием большого количества дефектов на поверхности наночастиц [3], что, в свою очередь, вызывает уменьшение значений упругих констант и приводит к смягчению спектра колебаний. В наноструктурированном галлии обнаружено значительное уменьшение коэффициента теплового расширения в области низких температур. Ранее подобное поведение мы наблюдали в дифракционных исследованиях наноструктурированного свинца [4].

Дифракционные исследования показали, что кристаллическая структура наночастиц Ga зависит от скорости охлаждения, причем наблюдалась кристаллизация либо в тетрагональную либо в орторомбическую структуру.

Литература

1. López-Ortega, D. Tobia, E. Winkler, I. V. Golosovsky, G. Salazar-Alvarez, S. Estradé, M. Estrader, J. Sort, M. A. González, S. Suriñach, J. Arbiol, F. Peiró, R. D. Zysler, M. D. Baró and J. Nogués, JACS, **132**, 9398, 2010.
2. Ю. А. Кибалин, И. В. Голосовский, Ю. А. Кумзеров, Ж. Андрэ, Научно-технические ведомости СПбГПУ (физико-математические науки), **94**, 59, 2010.
3. П. П. Паршин, М. Г. Землянов, Г. Х. Панова, А. А. Шиков, А. А. Набережнов, Ю. А. Кумзеров, И. В. Голосовский, А. С. Иванов, ЖЭТФ, **138**, 1119, 2010.
4. I. V. Golosovsky, R. G. Delaplane, A. N. Naberezhnov, Y. A. Kumzerov, PRB, **69**, 132301, 2004.

4.9.1.4. . Рентгеноструктурное исследование эпитаксиальных пленок NiF₂.

Первые образцы антиферромагнитных пленок NiF₂ были выращены методом молекулярной эпитаксии на плоскости 100 монокристаллического кремния с буферным слоем CaF₂. Задача определения сингонии и параметров ячейки решалась на рентгеновском дифрактометре Rigaku ATX-G, в Венчурной Лаборатории Университета г. Нагойя (Япония). Исследовались образцы с разной толщиной, полученные при разных условиях, однако определение сингонии и параметров элементарной ячейки было выполнено на одном образце с толщиной слоя NiF₂ около 100 нм. Оказалось, что элементарная ячейка NiF₂ в пленке заметно отличается от элементарной ячейки в обычном, массивном образце. Это довольно неожиданный результат, который требует дальнейших исследований.

4.9.1.5. Завершение исследований температурной эволюция структуры наночастиц оксида меди в пористых стеклах.

Завершены исследования температурной эволюция структуры наночастиц оксида меди в пористых стеклах.

Работа опубликована:

И. В. Голосовский, А. А. Набережнов, Д. А. Курдюков, I. Mirebeau, G. André, "Температурная эволюция структуры наночастиц оксида меди в пористых стеклах", Кристаллография, **55**, 919, 2010.

4.9.2. Рентген-дифракционные исследования искажений решетки нанокристаллов в магнитомягких *finemet* сплавах Fe_{89-x}Si_xB₇Nb₃Cu₁ с 0 < x < 13.5 после термомеханической обработки.

Черненко Ю.П., Федоров В.И.

Этап 2010 г.

4.9.2.1 Исследование связи магнитных свойств Fe_{75.5}Si_{13.5}B₇Nb₃Cu₁ с изменением структуры нанокристаллов при отжиге.

Настоящая работа является продолжением цикла исследований, посвященных выяснению связи между структурой нанокристаллов в *finemet* сплавах (Fe-Si-B-Nb-Cu) и их магнитными свойствами. С целью определения механизмов формирования поперечной магнитной анизотропии в Fe_{73.5}Si_{13.5}B₉Nb₃Cu при термомеханической обработке проведены рентген-дифракционные исследования искажений решетки нанокристаллов в этом сплаве [1]. В

исходном состоянии (нижняя кривая на рис. 1), полученном закалкой из расплава, наблюдается ближний порядок (~ 2 nm) в расположении атомов, характерный для структуры Fe-Si с объемноцентрированной кубической решеткой.

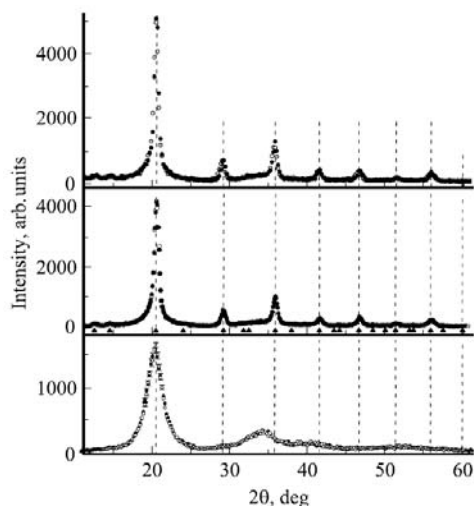


Рис. 1. Дифрактограммы сплавов Fe_{73.5}Si_{13.5}B₉Nb₃Cu (снизу вверх): в исходном состоянии, после нанокристаллизующего отжига и после ТМехО (измеренные при сканировании: свет-лые кружки – вдоль, темные – перекрест ленты). Вертикальными штриховыми линиями показаны положения пиков для ОЦК-структуры, треугольниками – положения сверхструктурных пиков фазы Fe₃Si.

В сплаве, подвергнутом отжигу (средняя кривая на рис. 1), возникают нанокристаллы Fe-Si, размер которых достигает 10–12 nm. При отжиге под растягивающей нагрузкой (верхняя кривая на рис. 1) решетка нанокристаллов растягивается, а после охлаждения сохраняется значительная остаточная деформация. Это видно из относительных сдвигов пиков (*hkl*) в дифрактограммах, измеренных для двух ориентаций вектора рассеяния, параллельно и перпендикулярно направлению приложения нагрузки (рис. 2), и из сравнения с дифрактограммой отжженного образца (рис. 3). Наблюдается анизотропия деформации: в пределах

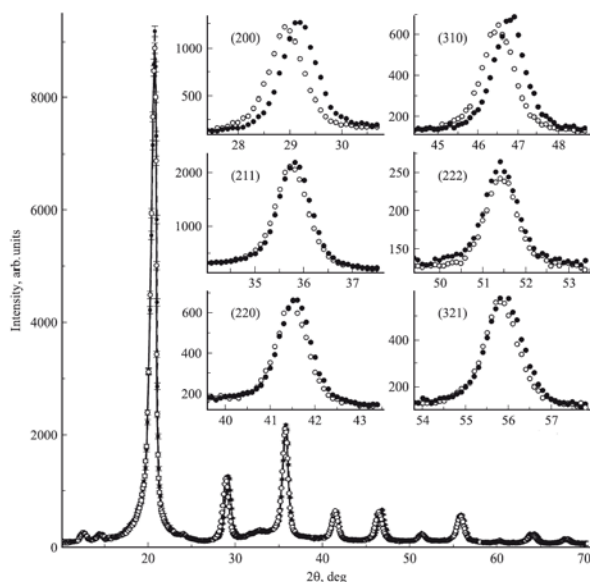


Рис. 2. Дифрактограммы образца сплава, подвергнутого ТМехО. На вставках в увеличенном виде показаны профили отдельных пиков при продольном (светлые кружки) и поперечном (темные кружки) сканировании.

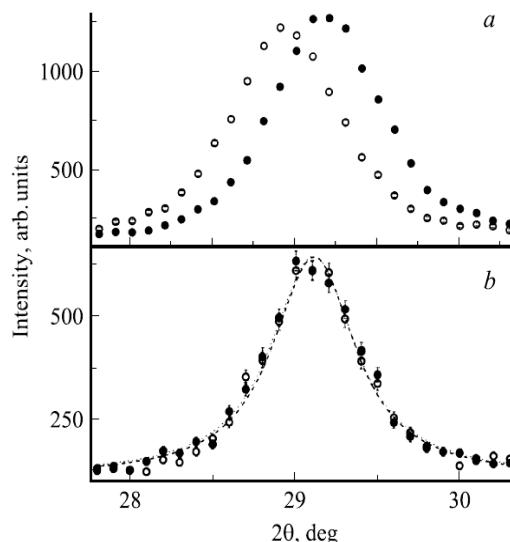


Рис. 3. Сравнение профилей пика (200), измеренного при сканировании вдоль (светлые кружки) и поперек (темные кружки) направления растяжения образца, т.е. подвергнутого ТМехО (а), с аналогичными профилями от образца, прошедшего нанокристаллизующий отжиг (б).

точности эксперимента искажений в направлении $[111]$ не зафиксировано, а в направлении $[100]$ они максимальные (рис. 4). Известно, что кристаллы, близкие по составу к Fe_3Si , имеют отрицательную магнитострикцию, т. е. намагниченность в них под действием нагрузки (эффект Виллари), приложенной вдоль $[100]$, наводится в перпендикулярном ей направлении, вдоль одной из легких осей намагничивания: $[010]$ или $[001]$. Ориентация осей нанокристаллов в сплаве изотропна, а большая их часть по составу близка к Fe_3Si . Направление намагниченности таких нанокристаллов задается остаточной деформацией их решетки и находится вблизи плоскости, перпендикулярной направлению приложения растягивающей нагрузки при термообработке. Именно это и является причиной возникновения поперечной магнитной анизотропии типа легкая плоскость в сплаве $\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Nb}_3\text{Cu}$.

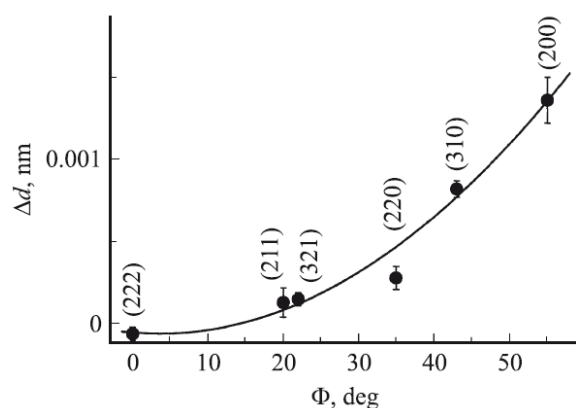


Рис. 4. Зависимость изменений величины межплоскостных расстояний Δd в продольном и поперечном сечениях от угла φ между направлением вектора $[hkl]$ и ближайшей осью $\langle 111 \rangle$ и ее аппроксимация квадратичной функцией (сплошная линия).

[1] Ю.П. Черненко, Н.В. Ершов, В.И. Федоров, В.А. Лукшина, А.П. Потапов

Рентгенодифракционные исследования структуры нанокристаллов в магнитомягких сплавах $\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Nb}_3\text{Cu}$ до и после термомеханической обработки. ФТТ 52, 514 (2010).

4.9.3. Исследование магнитного профиля многослойной наноструктуры $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{35}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{65}/\text{a-Si:H}_{36}]$ в зависимости от толщины немагнитного слоя полупроводника и магнитного слоя методом рефлектометрии поляризованных нейтронов.

Дядькина Е.А.

В работе исследованы магнитные свойства аморфных многослойных систем $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}/\text{a-Si:H}]_m$ с числом бислоев m в зависимости от концентрации магнитной фазы ($x = 34, 47$ и 60 ат. %) и толщин металл-диэлектрического (МД) $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ и полупроводникового (ПП) a-Si:H слоев. четные гармоники подавлены. Для кривых $I(+P_0)$ наблюдается обратная ситуация. Обнаружен экспериментальный факт наличия в каждом МД слое магнитно активной центральной части и двух магнитно мертвых интерфейсов. Для образцов с толщиной бислоя 17 нм при любых концентрациях x наблюдается ферромагнитное упорядочение, в то время как для структур с $d = 10$ нм наблюдается переход от ферромагнитного состояния ($x = 60, 47$ ат. %) к парамагнитному ($x = 34$ ат. %). При дальнейшем уменьшении толщины бислоя до 5 нм МД слой не намагничивается в полях вплоть до 1 Тл. Можно заключить, что магнитно мертвые интерфейсные части МД слоя захватывают магнитно активную центральную часть.

4.9.4.1. Продолжение исследования магнитных и структурных свойств наноматериалов в двумерных пространственно упорядоченных матрицах оксида алюминия методом малоугловой дифракции нейтронов и синхротронного излучения.

Чумаков А.П.

Мембраны анодированного оксида алюминия представляют собой двумерно упорядоченную структуру пор. Отработанная технология позволяет варьировать в процессе синтеза параметры получаемых мембран (диаметр, длина и расстояние между порами). Исследовались три серии пленок образцов с различной длиной пор (толщиной мембраны $5, 10, 20$ и 40 мкм), площадью по 0.5 см^2 , полученных с использованием кислот 1) $(\text{COOH})_2$ (при 140 В), 2) H_2SO_4 и 3) $(\text{COOH})_2$ (при 40 В). Расчетное межпорное расстояние у мембран составило $310, 65$ и 105 нм соответственно. Эксперименты по МУРН проводились на установке SANS-2 (GKSS, Германия) с использованием длин волн $6, 9$ и $12 \text{ \AA}$. При методе качания совершался поворот плёнок вокруг вертикальной оси при угле $\pm 2.5^\circ$ относительно перпендикулярного расположения плоскости мембраны к направлению нейтронного пучка, с шагом 0.1° [1]. Анализ интенсивности в зависимости от переданного импульса показал, что для 2 и 3 серий измеренные межпорные расстояния совпали с расчетными, в то время как для 1 серии с увеличением толщины наблюдалось их изменение от 220 нм при 5 мкм до расчетных 310 нм при 40 мкм толщины, что связывается с процессами самоупорядочения пор во время их роста при режиме «жёсткой» анодизации (140 В). Метод качания показал, что на всех образцах измеренных 3 серий близко стоящие друг к другу поры являются когерентными лишь на небольшом промежутке толщины мембраны (от 2 до 6 мкм), что свидетельствует о разупорядочении пор на дальних порядках по причине мелкозернистой (0.5 мкм^2) структуры анодируемой алюминиевой плёнки.

4.9.4.2. Получение точного решения для малоуглового рассеяния нейтронного и синхротронного излучения на двумерных упорядоченных системах пор и нанонитей.

Сыромятников А.В., Григорьев С.В.

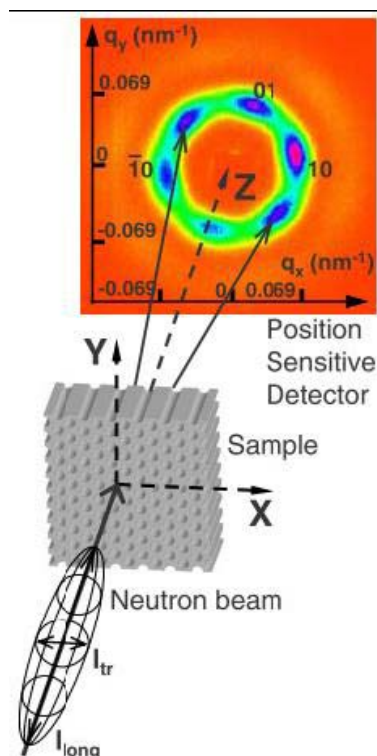
Дифракция на двумерной периодической структуре с большим неперiodическим третьим измерением представляет особый интерес. В качестве примера мы взяли анодированный оксид алюминия (ААО), который недавно привлек к себе внимание исследователей ввиду изучения двустадийной методики анодирования алюминия, открывшую возможность производства высококачественных плёнок ААО с самоупорядочивающейся структурой пор [1]. Плёнки ААО на данный момент широко используются в качестве матриц для приготовления упорядоченных массивов одномерных наноструктур различного состава [2,3]. Наиболее известными методиками для изучения самоупорядочения пор в течение процесса анодизации являются сканирующая электронная микроскопия и атомная силовая микроскопия, которые, однако, могут дать информацию только с поверхности структуры и

только с ограниченной площади. Хотя методы МУРН и МУРСИ в значительной степени используется для изучения других пространственно-упорядоченных материалов, мембранам ААО и наноккомпозитам на их основе было уделено лишь незначительное внимание. В то же время эти методики могут обеспечивать чрезвычайно ценной информацией о структуре пор (межпорное расстояние, диаметр пор, их длина), а также об их организации (позиционная корреляционная длина, размер домена, мозаичность).

В рамках данной работы теоретически выяснено, что картины МУРН от мембран ААО демонстрируют необычное поведение, которое указывает на отклонение в борновском приближении. Нами найдено точное теоретическое описание нейтронной дифракции от таких наноструктур, как в борновском приближении, так и за его пределами. Обсуждается, что теория может быть применена в режиме МУРН эксперимента в ограниченных пределах. Подобное поведение м.б. найдено при изучении самых различных систем: от коллоидных кристаллов до вихрей Абрикосова в сверхпроводниках.

Первой неожиданной особенностью стала высокая рассеивающая способность мембран ААО. Рисунок 2 демонстрирует трансмиссию через мембраны различной толщины: $T = I_{tr}/I_0$, где I_0 и I_{tr} интенсивности падающего и прошедшего (не рассеянного) пучков, соответственно. Уже для толщин 10 – 20 мкм половина падающей интенсивности оказывается рассеянной. Это ещё не указывает на то, что рассеяние выходит за пределы борновского приближения, но наводит на мысль о наличии сильного взаимодействия падающей волны с образцом. Для сравнения, стандартный образец для МУРН эксперимента приготавливается толщиной в 1 мм для того, чтобы получить 10% рассеяние падающего пучка.

МУРН эксперимент проводился с использованием нейтронного пучка с длинами волн от $\lambda = 0.5$ до 1.2 нм, с разбросом $\Delta\lambda/\lambda = 0.1$ и расходимостью пучка $\eta = 1.5$ мрад. [SANS-2, Geesthacht Neutron Facility, (GeNF)]. Плёнки площадью 1 см² ориентировались перпендикулярно нейтронному пучку (Рис.1). При данной ориентации поры располагаются параллельно падающему пучку. Рассеянные нейтроны детектировались позиционно-



чувствительным детектором 256x256 пикселей. Выбранная геометрия эксперимента позволяет наблюдать дифракционную картину в диапазоне длин когерентности, показанном на рисунке 1. Если продольная когерентная длина пучка L_{long} превышает длину поры L , когерентная длина $L_{z,exp}$, найденная из эксперимента, будет равняться когерентной длине образца, т.е. длине поры L . Наоборот, если L_{long} меньше чем длина поры L , $L_{z,exp}$ будет равно когерентной длине нейтронного пучка L_{long} , которая зависит от λ . Также следует отметить, что параметр L для случая эксперимента должен быть взят равным $L_{z,exp}$, как измеренный при сканировании методом качания соответствующего брегговского отражения.

Рис.1 Схематическое изображение эксперимента. Типичная дифракционная картина, полученная с плёнки ААО толщиной 24 мкм.

Второй особенностью является измерение кривых качания с целью определения продольной когерентной длины. Эксперимент сканирования качанием проводился посредством поворота плёнки вокруг оси Y (рисунок 1) в диапазоне 5° с шагом $0,1^\circ$ на длинах волн 0.6, 0.9 и 1.2 нм, так что наблюдаются появления, усиления и угасания рефлексов 10 и -10 на оси qx .

Третьей особенностью, демонстрирующей важность учёта когерентности нейтронного пучка, является длинноволновая зависимость интенсивности рассеяния. Зависимость интенсивности рассеяния от переданного импульса $I(q)/I_0$ (отнормированная на падающую интенсивность) с переданным волновым вектором $\mathbf{Q}$, параллельным оси (10), для образцов с $L = 6$ и 24 мкм показала, что для тонкого образца ($L=6$ мкм) интенсивность рассеяния для трёх различных длин волн λ не зависит от λ . Однако, для толстого образца ($L=24$ мкм) амплитуда рассеяния быстро убывает с возрастанием λ .

В итоге необходимо отметить, что найдено точное теоретическое решение, описывающее малоугловую дифракцию от наноструктуры с двумя периодическими и одним непериодическим направлениями. Было найдено, что когерентность стандартных МУРН установок идеально подходит для изучения геометрии вышеуказанных объектов. Теория была протестирована на примере рассеяния на плёнках ААО. Отмечается, что данные размышления могут оказать большое влияние на проведение дифракционных экспериментов на абрикосовских линиях потока в сверхпроводниках. Так же хотелось бы особенно подчеркнуть, что интенсивность рассеяния сильно зависит от когерентности и длины волны используемого излучения.

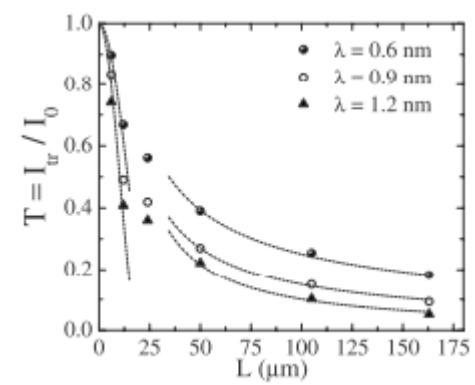


Рис.2 – Трансмиссия пучка через мембрану T как функция толщины плёнки для различных длин волн $\lambda = 0.6, 0.9$ и 1.2 нм. Прерывистые линии в районе малых L имеют квадратичные зависимости трансмиссии с толщиной $T = I_{tr}/I_0 = 1 - \alpha 2L^2$, с $\alpha \sim 12\text{--}18$ мкм. Прерывистые линии в районе больших L подчиняются степенным зависимостям ($\sim L^{-x}$ при $x \sim 1$)

4.9.5. Исследование магнитных и структурных свойств инвертированных Ni и Co фотонных кристаллов методом малоугловой дифракции нейтронов и SQUID магнетометрии.

Васильева А.В., Григорьев С.В.

Метод малоугловой дифракции поляризованных нейтронов позволяет изучать локальную намагниченность (ее направление и величину) внутри элементарной ячейки металлических инвертированных опалоподобных структур (ИОПС), а также ее поведение в зависимости от приложенного магнитного поля и температуры. Метод нейтронной дифракции оказывается более информативным по сравнению с интегральными магнетометрическими методами, такими как СКВИД, характеризующий магнитные свойства объекта как единого целого, поскольку позволяет изучать и период магнитной структуры, и распределение намагниченности внутри элементарной ячейки. В отличие от другого дифференциального магнитного метода, магнитно-силовой микроскопии, малоугловая дифракция характеризует не только, и не столько поверхность образца, но снимает информацию со всего его объема. Таким образом, метод малоугловой дифракции поляризованных нейтронов является уникальным и, порой, незаменимым при изучении магнитных структур.

Пленки фотонных кристаллов на проводящих подложках получали методом вертикального осаждения полистирольных микросфер диаметром 520 ± 10 нм из водной суспензии при температуре 60°C [1]. Инвертированные кристаллы получали методом электрохимического осаждения требуемого материала заполнения из соответствующего раствора. При осаждении, в качестве катода выступает пленка фотонного кристалла на

проводящей подложке, а в качестве вспомогательного электрода – платиновая проволока. Трехмерные инвертированные кристаллы на основе Ni получали из раствора, содержащего $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, H_3BO_3 и NH_4Cl , образцы на основе Co были получены из раствора CoCl_2 и $\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ [2]. Толщина обоих синтезированных инвертированных кристаллов соответствует 18 слоям микросфер темплатной пленки.

Эксперименты по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов проводились на установке SANS-2 исследовательского реактора FRG-1 в г. Геестхахт (Германия) [3]. При этом был использован пучок поляризованных нейтронов с начальной поляризацией $P_0 = 0.95$, длиной волны $\lambda = 1.27$ нм, отношением $\Delta\lambda/\lambda = 0.1$ и расходимостью пучка 1.0 мрад. Рассеянные нейтроны регистрировались двух-координатным детектором с разрешением 256×256 ячеек. Расстояние образец - детектор $S = 21.5$ м было установлено так, чтобы покрывался диапазон переданных импульсов от 0.003 до 0.06 нм⁻¹. В ходе эксперимента пленки никелевых и кобальтовых инвертированных кристаллов площадью около 1 см² ориентировали перпендикулярно падающему пучку. При этом плоскости пустот ИК с гексагональной симметрией, отвечающие плоскостям (111) в ГЦК структуре, оказывались в положении перпендикулярном волновому вектору пучка нейтронов. Внешнее магнитное поле прикладывали в горизонтальном направлении (перпендикулярно падающему пучку) и варьировали в диапазоне от 1 до 1100 мТ. При этом вектор поляризации нейтронов совпадал с направлением внешнего магнитного поля $\mathbf{P} \parallel \mathbf{H}$. Сечение малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов на периодической магнитной структуре может быть представлено в виде трех слагаемых: сечения ядерного и магнитного рассеяния, соответственно, которые не зависят от поляризации нейтронов $\mathbf{P}$, определяемое как $I(\mathbf{Q}) = (I(\mathbf{Q}, +P_0) + I(\mathbf{Q}, -P_0))/2$, и сечение ядерно-магнитной интерференции пропорциональное поляризации $\mathbf{P}$ и определяемое как $\Delta I(\mathbf{Q}) = (I(\mathbf{Q}, +P_0) - I(\mathbf{Q}, -P_0))/2$. Здесь $I(\mathbf{Q}, +P_0)$ и $I(\mathbf{Q}, -P_0)$ - интенсивности рассеяния при поляризации нейтронов, направленной параллельно и антипараллельно внешнему магнитному полю.

Магнитную составляющую оценивали как зависящий от магнитного поля вклад $I_H(\mathbf{Q}) = I(\mathbf{Q}, \mathbf{H}) - I(\mathbf{Q}, 0)$. На рисунке 1 представлены карты интенсивности малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов для Ni и Co инвертированных опалоподобных структур.

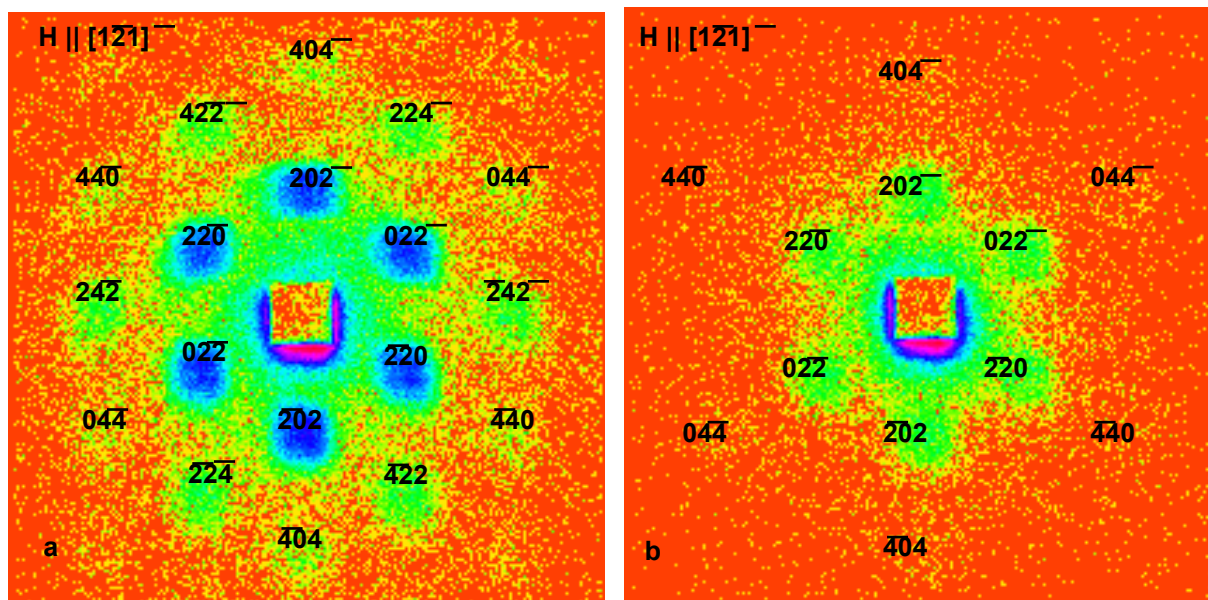


Рис. 1. Карты интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов для Ni (a) и Co (b) инвертированных опалоподобных структур при $\mathbf{H} \parallel [242]$.

Для обоих образцов эксперименты проводились в геометрии относительного направления внешнего магнитного поля $\mathbf{H} \parallel [242]$. Точечный вид дифракционных карт свидетельствует об упорядоченности структуры полученного ИФК на макромасштабе. Наблюдаемые

рефлексы соответствуют рассеянию пучка нейтронов на семействе плоскостей (202), (220) и (022). Интенсивности этих рефлексов изучались в зависимости от величины приложенного магнитного поля. Интенсивности отражений оказываются гораздо сильнее для Ni образца по сравнению с образцом из Co. Это обусловлено большой амплитудой ядерного рассеяния Ni по сравнению с Co: $b_{Ni} = 1.03 \cdot 10^{-12}$ см и $b_{Co} = 0.25 \cdot 10^{-12}$ см. В то же время амплитуды магнитного рассеяния: $p_{Ni} = 0.16 \cdot 10^{-12}$ см и $p_{Co} = 0.47 \cdot 10^{-12}$ см. Из этих величин не сложно установить, $(I_{N,Ni}/I_{N,Co}) = (b_{Ni}/b_{Co})^2 = 17$, что ядерное рассеяние Ni кристалла в 17 раз больше ядерного рассеяния Co кристалла. В то же время $(I_M/I_N)_{Co} = (p_{Co}/b_{Co})^2 = 3.53$, а $(I_M/I_N)_{Ni} = (p_{Ni}/b_{Ni})^2 = 0.024$. Видно, что отношения интенсивностей ядерного и магнитного рассеяния для кобальта и никеля различаются на два порядка, а значит магнитную дифракцию рассеяние удобнее изучать на кристаллах Co.

Список литературы

- [1] Su-Lan Kuai, Xing-Fang Hu, Alain Hache, Vo-Van Truong, Journal of Crystal Growth **267**, 317 (2004).
- [2] Q. Luo, Z. Liu, L. Li, S. Xie, J. Kong, D. Zhao, Adv. Mater. **13**, 286 (2001).
- [3] S. V. Grigoriev, K. S. Napolskii, N. A. Grigoryeva, A. V. Vasilieva, A. A. Mistonov, D. Yu. Chernyshov, A. V. Petukhov, D. V. Belov, A. A. Eliseev, A. V. Lukashin, Yu. D. Tretyakov, A. S. Sinitskii, and H. Eckerlebe, Phys. Rev. B, v.79, (2009) 045123.

4.9.6. Исследование структурных особенностей нанодисперсного диоксида церия (CeO_2)

н.с Копица Г.П., к.ф.м.н. Ульянов В.А.

а) Исследование аморфных ксерогелей на основе переходных и редкоземельных элементов (SnO_2 , TiO_2 и CrO_2), синтезированных методами "мягкой" химии.

Методами малоуглового рассеяния и ультра малоуглового рассеяния нейтронов (реакторы: ВВР-М, ПИЯФ РАН, Гатчина и FRG-1, Geesthacht, Germany), а также низкотемпературной адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии исследованы фрактальные свойства аморфных ксерогелей гидратированных диоксидов SnO_2 , TiO_2 и CrO_2 , синтезированных при различных значениях pH среды. Совместный анализ экспериментальных данных позволил установить существенное влияние кислотности среды на состав данных ксерогелей, их фрактальную размерность, а также на размер образующих их мономерных частиц. Полученные результаты находятся в стадии подготовки к публикации.

Проведено исследование мезоструктуры аморфных сульфатированных ксерогелей на основе гидратированного диоксида циркония, синтезированных осаждением из водных растворов $ZrO(NO_3)_2$ при различных значениях pH среды (pH = 4, 7 и 9) методами малоуглового рассеяния нейтронов, низкотемпературной адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии. Установлено существенное влияние кислотности среды на состав данных ксерогелей, их фрактальную размерность, а также на размер образующих их мономерных частиц [1].

Методами рентгеновской дифракции и нейтронографии получены зависимости параметра ячейки и кислородной нестехиометрии нанокристаллического диоксида церия от размера частиц [2].

[1] Н.Н. Губанова, В.К. Иванов, Г.П. Копица, А.Е. Баранчиков, С.В. Григорьев, В.В. Рунов / Мезоструктура суперкислотных катализаторов на основе сульфатированного диоксида циркония // Тезисы докладов XXI совещания по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния РНИКС-2010, РНЦ «Курчатовский институт», 16 – 19 ноября 2010 г., Москва, с. 136.

[2] В.К. Иванов, А.Е. Баранчиков, О.С. Полежаева, Г.П. Копица, Ю.Д. Третьяков / Кислородная нестехиометрия нанокристаллического диоксида церия // Журнал неорганической химии. 2010, Т. 55, №3, с. 334 - 337.

б) Исследование эволюции фрактальных свойств аморфных ксерогелей на основе переходных и редкоземельных элементов на разных стадиях гидротермальной и термической обработки.

Завершено исследование мезоструктуры аморфных ксерогелей на основе гидратированного диоксида циркония, синтезированных осаждением из водных растворов $ZrO(NO_3)_2$ при различных значениях pH среды (pH = 3, 6, 7.5 и 9) и ее эволюции на разных стадиях термической обработки методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), низкотемпературной адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии. Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния, определены характерные радиусы наночастиц ZrO_2 и удельные поверхности. Установлено влияние температуры отжига на фрактальные свойства поверхности диоксида циркония [3 - 5].

Публикации:

[3] В.К. Иванов, Г.П. Копица, С.В. Григорьев, О.С. Полежаева, В.М. Гарамус / Исследование эволюции мезоструктуры аморфных ксерогелей гидроксида ZrO_2 на разных стадиях термической обработки // Физика твердого тела. 2010, Т. 52, №56 с. 898 - 903.

[4] Иванов В.К., Копица Г.П., Баранчиков А.Е., Григорьев С.В., Гарамус В.М. / Закономерности изменения состава и фрактальной структуры ксерогелей гидратированного диоксида циркония при термическом отжиге // ЖНХ. 2010. Т. 55. №2. с. 160-166.

[5] Г.П. Копица, В.К. Иванов, О.С. Полежаева, А.Е. Баранчиков, С.В. Григорьев Мезоструктура и фрактальные свойства аморфных ксерогелей гидратированных диоксидов циркония и гафния и продуктов их термической и гидротермальной обработки // Тезисы докладов XXI совещания по использованию нейтронов в исследованиях конденсированного состояния РНИКС-2010, РНЦ «Курчатовский институт», 16 – 19 ноября 2010 г., Москва, с. 25.

[6] Г.П. Копица, В.К. Иванов, О.С. Полежаева, А.Е. Баранчиков, С.В. Григорьев Мезоструктура и фрактальные свойства аморфных ксерогелей гидратированных диоксидов циркония и гафния и продуктов их термической и гидротермальной обработки // Тезисы докладов Первой всероссийской конференции «Золь-гель синтез и исследования неорганических соединений, гибридных функциональных материалов и дисперсных систем», Институт химии силикатов РАН, 22 – 24 ноября 2010 г., Санкт-Петербург, с. 69.

в) Исследование влияния мощной ультразвуковой обработки на фрактальные свойства аморфных ксерогелей на основе переходных и редкоземельных элементов.

Проведено изучение влияния мощной ультразвуковой обработки на структуру аморфных ксерогелей гидратированного диоксида циркония ZrO_2 , получаемых осаждением из растворов нитрата цирконила различной концентрации. Анализ данных малоуглового рассеяния нейтронов позволил выявить существенное влияние ультразвука на мезоструктуру аморфных ксерогелей ZrO_2 : гомогенность, фрактальную размерность и размер образующих их мономерных частиц. Полученные результаты находятся в стадии подготовки к публикации.

Завершено исследование влияния мощной ультразвуковой обработки на структуру аморфных ксерогелей гидроксида железа(III), получаемых осаждением из растворов нитрата железа(III) различной концентрации. Анализ данных малоуглового рассеяния нейтронов, низкотемпературной адсорбции азота и просвечивающей электронной микроскопии позволил впервые выявить существенное влияние ультразвука на мезоструктуру аморфных ксерогелей: гомогенность, фрактальную размерность и размер образующих их мономерных частиц [7 - 9].

Публикации:

[7] А.Е. Баранчиков, В.К. Иванов, Г.П. Копица, С.В. Григорьев, P. Klaus Pranzas / Особенности мезоструктуры аморфных ксерогелей гидроксида железа (III), синтезированного в ультразвуковом поле // Физика твердого тела. 2010, Т. 52, №5, с. 917 – 922.

[8] V.K. Ivanov, G.P. Kopitsa, F.Yu. Sharikov, A.Ye. Baranchikov, A.S. Shaporev, S.V. Grigoriev, P. Klaus Pranzas / Ultrasound-induced changes in mesostructure of amorphous iron (III) hydroxide xerogels: a SANS study // Phys.Rev. B 81, 2010, p. 174201.

[9] В.К. Иванов, Г.П. Копица, , Ф.Ю. Шариков, А.Е. Баранчиков, С.В. Григорьев, P. Klaus Pranzas / Влияние ультразвуковой обработки на мезоструктуру ксерогелей гидроксида железа (III) // Тезисы докладов Первой всероссийской конференции «Золь-гель синтез и исследования неорганических соединений, гибридных

4.9.7.1. Исследование атомной динамики наноструктурированного свинца методом рассеяния нейтронов.

ФТИ ДфмН С.Б. Вахрушев

Этап 2010

Исследование атомной динамики наноструктурированного свинца методом рассеяния нейтронов

Методом неупругого рассеяния нейтронов измерен спектр тепловых атомных колебаний свинца, наноструктурированного в пористом стекле со средним диаметром пор ~ 7 нм, и, для сравнения спектр тепловых колебаний в обычном, массивном свинце. В настоящее время опубликовано большое число работ, посвященных теоретическому и экспериментальному изучению атомной динамики наноматериалов. В частности, методами неупругого рассеяния нейтронов и синхротронного излучения исследованы спектры тепловых колебаний наночастиц металлов и сплавов в нанометровых порошковых образцах. Во всех работах отмечается, что общими особенностями спектра тепловых колебаний наночастиц является возрастание спектральной плотности в области малых энергий и появление затянутого "хвоста" при энергиях больших, чем граничная энергия спектра массивного материала. Кроме того, в теоретических работах предсказывается наличие при малых энергиях щели в спектре колебаний, поскольку длина волны фононов не может превышать размеров наночастиц.

Химически чистый свинец вводился в пористое стекло со средним размером пор около 7 нм из расплава под давлением 10 Кбар. При понижении температуры происходила кристаллизация свинца в порах. Обычно при средней статистической точности в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов используются образцы массой 6-10 г, однородные по своему составу и свойствам, поэтому была отработана методика, позволяющая за одну загрузку получать однородные по составу образцы массой около 10 грамм. Образцы представляли собой пористый аморфный кварц SiO_2 , в котором система взаимосвязанных пор занимает ~ 25% объема, и около 95% этих пор заполнены свинцом. Поры в стекле расположены хаотически, следовательно модель полного порошкового усреднения для наноструктурированного свинца достаточно справедлива. Методом рентгеновской дифракции установлено, что содержание посторонних фаз (кроме кристаллического свинца и аморфного стекла) не превышает 3% (предел чувствительности использованного метода).

Полученные спектры тепловых колебаний массивного свинца $g_{\text{m-Pb}}(E)$ и свинца в условиях "ограниченной геометрии" $g_{\text{n-Pb}}(E)$ представлены на рис. 1, 2. Оба спектра нормированы так, что площадь под ними равна единице. По спектрам, представленным на рис. 1, вычислены средние термодинамические параметры, характеризующие атомную динамику массивного свинца и свинца внедренного в нанопоры стекла (табл. 1.). Из данных таблицы 1 следует, что, хотя среднеквадратичные тепловые смещения атомов при комнатной температуре почти не отличаются в пределах погрешности, в среднем спектр тепловых колебаний атомов свинца в наночастицах несколько более жесткий, по сравнению со спектром массивного свинца. Эти результаты согласуются с данными работы [1], в которой атомные колебания наноструктурированного свинца исследовались в широком диапазоне температур методом структурной нейтронографии

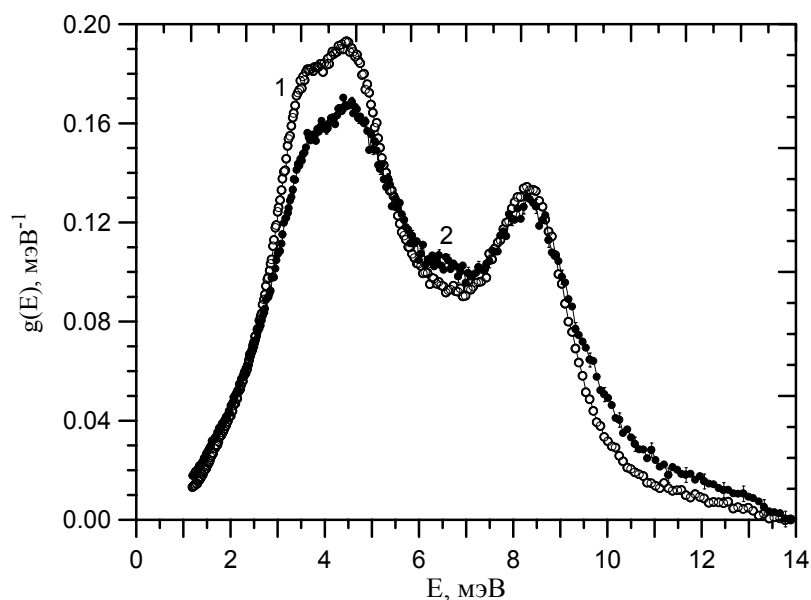


Рис. 1. Спектры тепловых колебаний: 1 – массивного свинца ($g_{m-Pb}(E)$), 2 – свинца, внедренного в нанометровые поры стекла ($g_{n-Pb}(E)$).

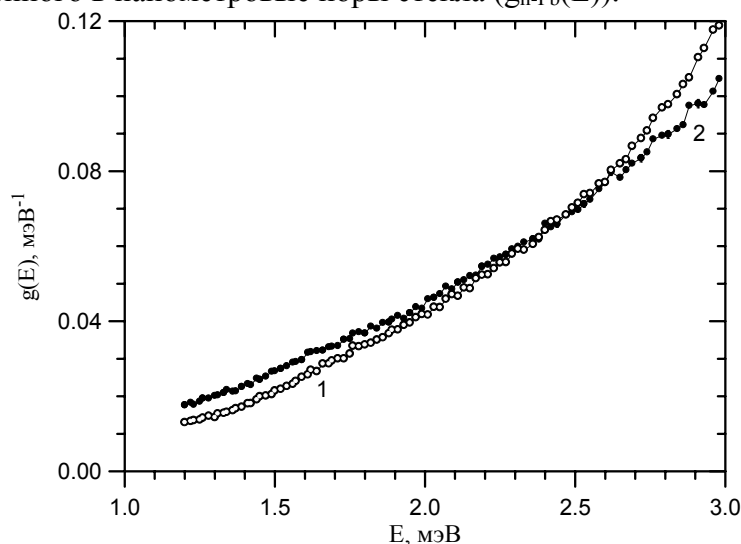


Рис. 3. Низкоэнергетическая часть спектров тепловых колебаний: 1 – массивного свинца ($g_{m-Pb}(E)$), 2 – свинца, внедренного в нанометровые поры стекла ($g_{n-Pb}(E)$).

Таблица 1. Средние термодинамические параметры свинца при $T=300K$, вычисленные по измеренным спектрам тепловых колебаний: $\langle u^2 \rangle$ - среднеквадратичные тепловые смещения атомов: $\langle E_{sp} \rangle$ - средняя по спектру энергия колебаний: $\langle B \rangle = M \langle E^2 \rangle / \hbar^2$ – средняя константа силовой связи

Образец	$\langle u^2 \rangle, 10^{-2} \text{ \AA}^2$	$\langle E_{sp} \rangle, \text{ мэВ}$	$\langle B \rangle, \text{ н/м}$
Массивный свинец	2.740 ± 0.003	5.82 ± 0.03	31.5 ± 0.2
Нанометровый свинец	2.76 ± 0.01	6.1 ± 0.1	35.1 ± 0.8

Таким образом на основании проведенных измерений предложена модель строения нанокомпозита, согласно которой атомы наночастиц свинца, внедренного в поры стекла, можно разбить на три группы: внутренние атомы, атомы в поверхностном слое наночастиц, соседствующие только с атомами свинца, и атомы в интерфейсном слое, взаимодействующие с молекулами стекла на стенках поры.

Установлено, что плотность состояний в фоновом спектре наночастиц свинца превышает плотность состояний в спектре массивного свинца как в области малых $E < 2.5$

мэВ, так и больших $E > 9.5$ мэВ энергий. низкоэнергетическая часть этого спектра при $E < 3.5$ мэВ связана с колебаниями атомов в поверхностном слое наночастиц, а спектральная плотность колебаний атомов свинца из интерфейсного слоя распространяется на область энергий вплоть до 14 мэВ. Взаимодействие с "жесткими" молекулами SiO_2 приводит к возрастанию плотности колебательных состояний атомов свинца из интерфейсного слоя при энергиях $E > 3.5$ мэВ и к появлению в спектре затянутого хвоста при $E > 10$ мэВ.

1 I.V. Golosovsky, R.G. Delaplane, A.A. Naberezhnov, Yu.A. Kumzerov. Phys. Rev. B **69**, 132301 (2004)

4.9.7.2. Исследование продольных колебаний -О-Н групп в хризотиле методами нейтронного рассеяния

Методами нейтронного рассеяния и поляризационной ИК спектроскопии исследовались колебательные спектры с целью изучения структуры исходного асбеста.

Хризотиловый асбест – природный минерал, представляющий собой систему плотноупакованных трубчатых волокон с внешним диаметром ~ 30 nm и внутренним диаметром ~ 5 nm и длиной до сантиметра и более, может служить естественной матрицей для создания наноструктур путем заполнения каналов различными материалами. Этот материал (асбест) относится к моноклинной системе $C2/m$ с параметрами элементарной ячейки $a=5.19\text{\AA}$; $b=9.23\text{\AA}$; $c=14.62\text{\AA}$; $\beta=90.15^\circ$. Одна элементарная ячейка включает 4 формульные единицы, в ней можно выделить чередующиеся слои MgO и SiO_2 , связанные между собой -О-Н группами (рис. 3). Известно, что объем пространства между трубками сравним с суммарным объемом каналов и вместе они составляют 4-5% от общего объема образца, тогда как оставшийся объем занимает собственно асбестовая матрица.

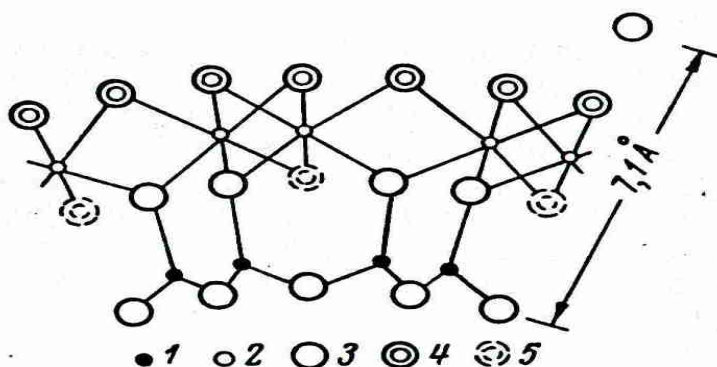


Рис. 3 Схема структуры асбеста. 1 - атомы кремния, 2 - атомы магния, 3 - атомы кислорода, 4 - гидроксильные группы, 5 - гидроксильные группы вне плоскости чертежа

В отличие от углеродных нанотрубок система параллельных наноканалов асбеста имеет выделенное направление - вдоль оси трубок, что говорит об анизотропии, позволяет ориентировать образец и открывает возможность изучать анизотропию свойств, в частности, анизотропию ориентации дипольных моментов связей -О-Н в структуре.

На рис. 4 приведены кривые неупругого рассеяния нейтронов для ориентации каналов вдоль падающего пучка, а на рис. 5 для перпендикулярной ориентации. В области энергий > 75 meV, где предположительно основной вклад в рассеяние дают водородные моды, для обеих ориентаций наблюдается несколько выраженных групп линий: 70 – 110 meV, 140 – 200 meV и 210 – 290 meV. Понижение температуры приводит к значительному усилению интенсивности рассеяния. Этот факт легко объяснить. Все измерения, очевидно, проводились с рождением фононов и в этом случае фактор заселенности $n(\omega)+1$ для высокочастотных колебаний ($\hbar\omega \gg kT$), практически равен 1 и не зависит от температуры. Температурная эволюция интенсивности рассеяния в этом случае практически полностью определяется фактором Дебая-Валлера. На рис. 6 приведены кривые неупругого рассеяния нейтронов при 5K для двух ориентаций образца. Можно видеть, что в области энергий до 400 meV кривые для обеих ориентаций подобны (в поперечной геометрии наблюдается ослабление пика в области 100 meV). Однако при высоких энергиях картины рассеяния резко различаются. В

области 450 meV в продольной геометрии наблюдается выраженный пик, который полностью отсутствует в поперечной геометрии.

Для геометрии эксперимента, когда Q направлен вдоль оси каналов нанотрубок наблюдаются возбуждения колебаний в диапазоне выше 120 meV, причем интенсивность пиков возрастает при понижении температуры. Какие-либо особенности спектра в диапазоне выше 450 meV отсутствуют. В то же время для геометрии, когда вектор Q перпендикулярен оси канала, наблюдается пик в спектре рассеяния нейтронов 450 meV (2755 nm, 3630 cm^{-1}), интенсивность пика растет с понижением температуры. По-видимому, этот пик можно отнести к колебаниям продольной моды (основной тон) -O-H групп. Эти результаты хорошо совпадают с данными ИК-спектроскопии.

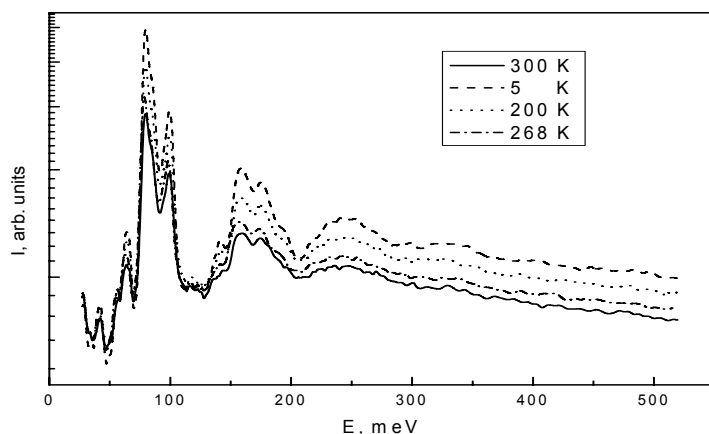


Рис. 4 Фононные спектры хризотилевого асбеста для различных температур при направлении Q вдоль оси каналов асбеста.

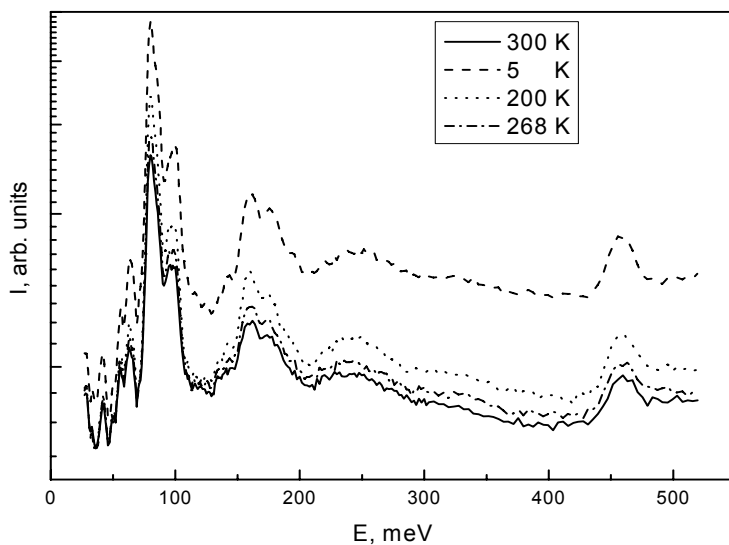


Рис. 5 Фононные спектры хризотилевого асбеста для различных температур при направлении Q перпендикулярно оси каналов асбеста.

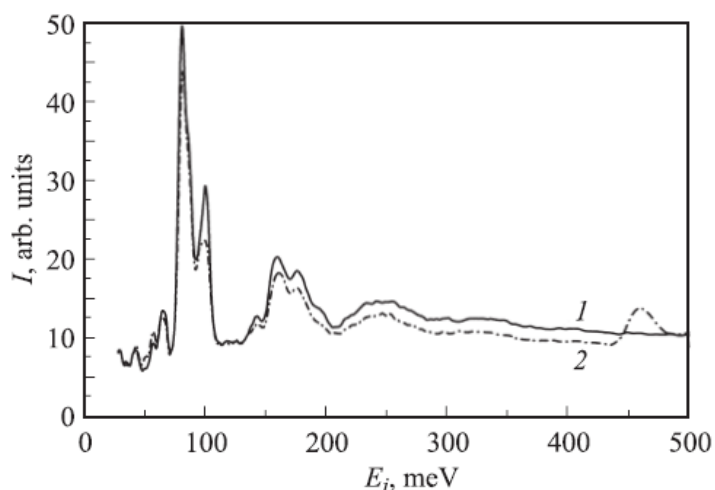


Рис. 6 Фононные спектры хризотилловых асбестов при 5К при направлении Q вдоль (1) и перпендикулярно (2) оси каналов асбеста.

Суммируя данные обеих методик можно заключить, что наблюдаемая полоса при 450 meV в спектрах рассеяния нейтронов соответствует основному колебанию продольной моды (растяжения), а полоса поглощения в оптических спектрах при 880 meV соответствуют первому обертому колебаний -О-Н группы, являющейся структурным элементом решетки асбеста. При этом дипольный момент -О-Н ионов и, соответственно, -О-Н связь ориентированы перпендикулярно оси нанотрубок.

Проект 4.10

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

Проф. С.В. Малеев, проф. С.М. Дунаевский,
проф. С.Л. Гинзбург, к. ф.-м. н. А.В. Сыромятников,
В.В. Дериглазов, А.А. Григорькин

4.10.1. Изучить влияние магнитного поля на магнитную структуру магнетиков типа Dy и Ho, где спиральная структура обусловлена обменным взаимодействием.

Тема будет продолжена в 2011 г., а в 2010 выполнено:

Методами рассеяния поляризованных нейтронов и рентгеновской дифракции синхротронного излучения изучена кристаллографическая структура и спиновая киральность в $Mn(1-z)Fe(z)Si$. Показано, что «правые» и «левые» кристаллы могут быть обнаружены в $MnSi$ и их железосодержащих соединениях. Структурная киральность обуславливает спиновую киральность этих соединений.

[S.V.Grigoriev, D.Chernyshov, S.V.Maleev et al "Interplay between crystalline chirality and magnetic structure in $Mn(1-x)Fe(x)Si$ ", Phys.Rev.B, 81, 012408 (2010)].

4.10.2. Найти поправки к спектру магнонов в третьем порядке по $1/S$ в двумерном квантовом гейзенберговском антиферромагнетике.

Вычислен спектр спиновых волн в 2D антиферромагнетике (АФ) на квадратной решетке при $T = 0$ в третьем порядке по $1/S$. Показано, что в противоположность многим другим величинам, характеризующим систему, квантовая перенормировка спектра в окрестности точки $k = (\pi, 0)$ для $S \sim 1$ описывается медленно сходящимся $1/S$ -рядом. В случае $S = 1/2$ поправки третьего порядка улучшают согласие с недавними экспериментальными и численными работами.

[A. V. Syromyatnikov, "Spectrum of short-wavelength magnons in two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet on a square lattice: third order expansion in $1/S$ ", J. Phys.: Condens. Matter **22**, 216003 (2010) [7 pages];]

4.10.3. Рассмотреть примесь в латтинжеровской жидкости и просуммировать однопетлевые вклады в ренормгрупповое уравнение на кондактанс квантовой проволоки в слабонеравновесной ситуации. Найти скейлинговую функцию для кондактанса, а также для термокондактанса в случае квантовой проволоки между контактами разной температуры.

См. пункт 4.10.5.

4.10.4. Просуммировать однопетлевые вклады в ренормгрупповое уравнение на кондактанс проволоки в случае потенциального барьера на ее крае. Сравнить результаты с предельными случаями, изученными ранее. Проверить отсутствие двухпетлевых поправок к РГ уравнению.

Изучен кондактанс системы трех проволок, соединенных "звездой". Рассмотрен важный вспомогательный вопрос о числе независимых компонент в описании 3×3 матрицы кондактансов. Показано, что в отсутствии магнитного поля таких компонент три, а при наличии симметрии между двумя проводами их число снижается до двух. Этот результат важен потому, что позволяет компактный анализ системы трех проволок в присутствии взаимодействия между электронами.

Найдены РГ уравнения на эти два кондактанса для системы туннельного контакта вблизи латтинжеровской проволоки. Анализ проведен на уровне второй РГ петли, при этом впервые продемонстрировано наличие стационарной точки РГ уравнений, чье положение зависит от взаимодействия в проводах. Тем самым показано, что достаточно сильная амплитуда туннелирования из контакта в провод приводит при низких температурах к исчезновению проводимости системы между всеми тремя полупроводами. Такое теоретическое утверждение ранее не делалось.

D.N. Aristov, "Constraints on conductances for Y-junction of quantum wires", submitted to Phys. Rev. B, arXiv:1008.1645 [8 pages]

D.N. Aristov, A.P. Dmitriev, I.V. Gornyi, V.Yu. Kachorovskii, D.G. Polyakov, P. Woelfle, "Tunneling into a Luttinger liquid revisited", submitted to Phys.Rev.Letters, arXiv:1006.4844

4.10.5. Решить задачу о поправке Аронова-Альтшулера к проводимости для латтинжеровской жидкости с беспорядком в одноканальном случае и приступить к вычислению соответствующей магнетопроводимости.

В связи с ранее полученными результатами план был скорректирован и вместо пунктов плана 4.10.3. и 4.10.5. было сделано следующее:

Подробно исследованы спектр и корреляции в системе асимметричных спиновых лестниц, т.е. двух неэквивалентных цепочек спинов $s=1/2$, связанных магнитным обменом между собой. Численные расчеты проводились методом Монте-Карло, точной диагонализацией, DMRG (ренорм-группа для матрицы плотности). Показано, что, согласно обычным ожиданиям, спектр системы во всех случаях характеризуется щелью в спектре возбуждений и экспоненциальным характером убывания корреляций. В то же время, в случае предельной асимметрии, когда обмен вдоль одной из цепочек исчезает, было обнаружено необычное поведение щели как функции обмена между цепочками.

Публикация:

D.N. Aristov, C. Bruenger, F.F. Assaad, M.N. Kiselev, A. Weichselbaum, S. Capponi, F. Alet, "Asymmetric spin-1/2 two-leg ladders", Phys. Rev. B **82**, 174410 (2010) [16 pages].

4.10.6. Теоретическое изучение влияния контактов на спиновую поляризацию тока и фотогальванический эффект в металлическом кольце с присоединенными проводниками.

Проф. С.М.Дунаевский

Произведен расчет фотогальванического тока в системе кольца с присоединенными проводниками. Для моделирования контактов проводников применена теория потенциалов нулевого радиуса. Оптическое возмущение системы осуществлялось циркулярно-поляризованной монохроматической электромагнитной волной, падающей на кольцо. Обнаружена сильная зависимость фототока от угла между контактами. Максимумы угловой зависимости тока довольно узкие и разделены широкими областями, в которых интенсивность тока на несколько порядков меньше. Положение максимумов зависит от частоты излучения. При малых концентрациях электронов и малых частотах излучения найден явный вид фототока как функции параметров системы. Определена функциональная зависимость тока от уровня Ферми электронов, величин длин рассеяния и углового расстояния между контактами.

4.10.7. Исследование новых магнитных фаз манганитов, допускающих существование спонтанного электрического момента (ферроэлектричества).

Дунаевский С.М.

Этап 2010

Выполнены расчеты электронной структуры коллинеарных магнитных ступенчатых структур легированных манганитов, в которых может возникать энергетическая щель и спонтанный электрический момент (ферроэлектричество). Показано, что возникновение **спонтанной поляризации P** вследствие смещения атомов кислорода возможно в магнитных диэлектрических структурах (1×1) , которая наблюдается в HoMnO_3 и (3×3) , которая наблюдается в $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$. В хорошо известной СЕ структуре спонтанная поляризация вследствие данного механизма равна нулю. Теоретическая оценка дает значение поляризации $P(3 \times 3) = P(1 \times 1) / 3 \approx 0.2 - 4 \text{ } \mu\text{C}/\text{cm}^2$, которое сравнимо с величиной поляризации традиционных ферроэлектриков. Ступенчатые ферромагнитные цепочки образуют 2D магнитные структуры без центра инверсии, в которых происходит дополнительное смещение ионов кислорода, принадлежащих ферромагнитным цепочкам.

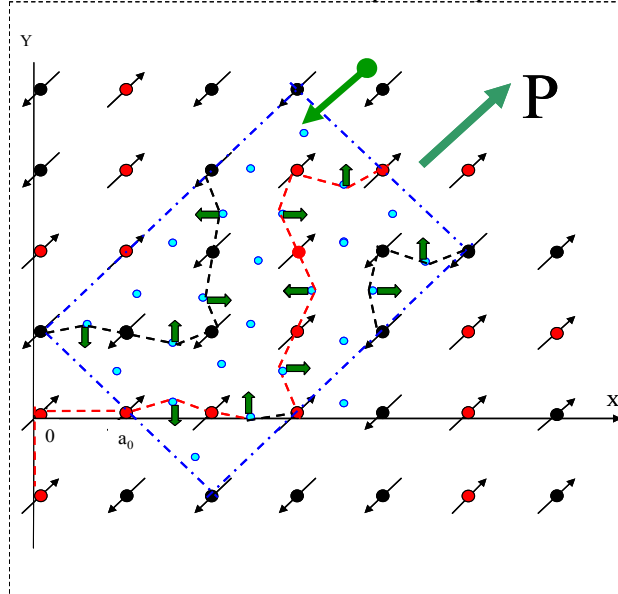


Рис.1. Возникновение **спонтанной поляризации P** вследствие смещения атомов кислорода (жирные стрелки), принадлежащих цепочкам (3×3) внутри 2D элементарной ячейки (штрих-пунктир).

Смещения ионов кислорода приводят к увеличению угла между связями и к соответствующему понижению энергии электронов, движущихся вдоль цепочек. Однако, из-за того, что повороты (“tilting”) кислородных октаэдров вдоль перпендикулярной оси Z происходят в противоположных направлениях, в рамках используемой модели экспериментальное обнаружение гигантской поляризации возможно только в тонких пленках толщина которых не превышает трех- пяти монослоев.

2. На данную тему сделан пленарный доклад на 13 международном симпозиуме “Порядок, беспорядок и свойства оксидов” (International meeting ODPO -13), пос. Лоо, 2010г.

3. **А.А. Григорькиным** успешно защищена диссертация “Модель нанотрубки со спиральной симметрией и её транспортные, магнитные и оптические свойства” на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Публикации 2010г.:

1. С. М. Дунаевский, В. В. Дериглазов, Взаимосвязь магнитной структуры и состояния “зонного” диэлектрика в легированных манганитах, ФТТ **52**, 850-852, 2010
2. S.M. Dunaevsky, Ferroelectricity in doped manganites, “Functional Materials” v.17, No.2, p. 201-204 (2010);
3. С. М. Дунаевский, Новые магнитные фазы манганитов, Труды 13 международного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов” (**Proceedings of the International meeting ODPO -13**), т.1 стр.143-146, 2010;

4.10.8. Интерференция на N- щелевых решетках: интегралы по траекториям, траектории Бома.

В.И.Сбитнев

Этап 2010:

а) Интерференция тепловых нейтронов на решетках, содержащих N щелей, исследуется с привлечением фейнмановских интегралов по траекториям. Задача – высчитать плотности потоков виртуальных траекторий как в ближней, так и дальней зонах решетки. В частности, выявить плотности потоков на интерференционных Талбот-паттернах (характерные размеры решеток, в этом случае, составляют десятки сотен нанометров).

б) Проявить поведение траекторий Бома на таких интерференционных паттернах - предположительно, реальные траектории, по которым пролетают нейтроны от щелей решетки к детектору.

Опираясь на технику Фейнмановских интегралов по траекториям, вычислено рассеяние когерентных частиц на щелевых решетках, как в ближней так и в дальней зонах. Интерференционные картины при рассеянии массивных частиц (фуллеренов) на двух щелевых решетках (Талбот-Лау интерферометр) показывают прекрасное совпадение с теоретически вычисленными. Результаты представлены в двух электронных препринтах в arXiv.org:

- 1) V. I. Sbitnev, “N-slit interference: Path integrals, Bohmian trajectories”, arXiv:1001.0661v2 [quant-ph] 25 Jan 2010;
 - 2) V. I. Sbitnev, “Matter waves in the Talbot-Lau interferometry”, arXiv:1005.0890v3 [quant-ph] 17 Sep 2010;
- (ожидается появление публикации в журнале Phys. Rev. A).

Проект 4.11

Синтез, разделение, глубокая очистка и исследование свойств металлофуллеренов. Исследование распада возбужденного ядра в условиях молекулярного конфайнмента в зависимости от изотопных и изомерных эффектов и электронодонорных свойств окружения

К.х.н. Ю.С.Грушко, к.х.н. В.С. Козлов,
к.ф.-м.н. В.А. Шилин

В зоне реактора ВВРМ ПИЯФ проведено облучение быстрыми нейтронами образцов эндометаллофуллеренов лантаноидного ряда, синтезированных, обогащенных, подвергнутых глубокой очистке. Изучены условия удерживания при облучении для

эндометаллофуллеренов, радиоизотопы которых пригодны по ядерным характеристикам для использования в ядерной медицине и медико-биологических исследованиях (^{46}Sc , ^{140}La , ^{141}Nd , ^{153}Sm , ^{152}Eu , ^{154}Eu , ^{153}Sm , ^{160}Tb , ^{169}Yb , ^{170}Tm (изомеры I и III), ^{177}Lu). Некоторые из них исследованы впервые ($^{153}\text{Sm}@C_{82}$; $^{46}\text{Sc}_3\text{N}@C_{80}$; $^{141}\text{Nd}@C_{2n}$), в т. ч. новый класс триметаллонитридных соединений. Анализировались изотопические и изомерные эффекты при активации нейтронами эндоэдрических металлофуллеренов европия и тулия. Подтверждена гипотеза авторов о механизме аномально высокого удерживания в реакции $^{152}\text{Sm}@C_{2n} (n, \gamma) ^{153}\text{Sm}@C_{2n}$ (~80%), согласно которой основными процессами распада молекулы металлофуллерена после активации, определяющими степень удерживания, являются быстрые нерадиационные процессы (“встряска” электронов). Полученные результаты являются научной основой для разработки эффективных препаратов на базе эндометаллофуллеренов, учитывая положительные результаты тестов на животных для водорастворимых магнитоконтрастных веществ на основе $\text{Gd}@C_{2n}$.

Эндометаллофуллерены синтезировали с помощью электродуговых генераторов, разработанных в ПИЯФ, применяя спектрально чистые пористые электроды (наружный диаметр 10 мм, внутренний – 6 мм), пропитанные раствором нитрата металла в изопропиловом спирте (набитые смесью оксида металла с графитом), затем отожженные при температуре 1000 °С с целью разложения нитрата в оксид металла. Радиоактивные металлофуллерены получали в реакторе, облучая нейтронами исходные металлофуллерены. Учитывали, что облучение металлофуллеренов нейтронами и гамма-квантами может повредить углеродный кэйдж. Для оценки стабильности фуллеренов в потоке 10^{14} нейтронов $\text{см}^{-2} \cdot \text{сек}^{-1}$, когда отношение интенсивностей тепловых и эпитепловых нейтронов составляло ~10 (кадмиевое отношение), проводили облучение чистого фуллерена C_{60} для определения его стабильности. Доля молекул C_{60} , не разрушенных при облучении быстрыми нейтронами, определялась как массовая часть облученной пробы, растворимая в *o*-ксилоле, которая при хроматографическом анализе показывала время удерживания, характерное для C_{60} . При облучении (6 часов) в интегральном потоке нейтронов 7×10^{17} нейтронов/ см^{-2} выживает ~90 % фуллеренов C_{60} . При облучениях металлофуллеренов для учета доли молекул, разрушенных быстрыми нейтронами, в качестве образца-«свидетеля» использовали C_{60} . В дальнейшем при вычислении удерживания в реакции Сциларда-Чалмерса вводили поправку на разрушение быстрыми нейтронами. Типичные величины удерживания («выживания») для эндометаллофуллеренов лантаноидов составляют 15-20%. Ранее авторами было обнаружено аномально высокое удерживание (~80%) для смеси эндометаллофуллеренов самария в реакции $^{152}\text{Sm}@C_{2n} (n, \gamma) ^{153}\text{Sm}@C_{2n}$. Результат является практически значимым, т.к. изотоп ^{153}Sm (период полураспада 47 часов) широко используют в ядерной медицине. Однако выделенный хроматографически $^{152}\text{Sm}@C_{82}$ в реакции $^{152}\text{Sm}@C_{82} (n, \gamma) ^{153}\text{Sm}@C_{82}$ показывает величину удерживания 17,5%, типичную для трехвалентных эндометаллофуллеренов лантаноидов. Для объяснения авторы предположили, что основными процессами распада молекулы металлофуллерена после активации, определяющими степень удерживания, являются быстрые нерадиационные процессы типа встряски электронов. Чтобы разделить эффекты ядерных и электронных факторов при распаде молекулы металлофуллерена, синтезировали редкоземельные эндоэдрические металлофуллерены европия и тулия, изучили изотопические и изомерные эффекты при их активации. 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. Естественный Tm является моноизотопом и, следовательно, исключается изотопическое влияние на выживаемость. На рис.1 представлен результат препаративного разделения изомеров тулия на колонке Bucky Prep 10×250 (Nacalai Tesque Inc.). Выделены 3 фракции. В данных условиях невозможно полное разделение изомеров $\text{Tm}@C_{82}$, однако, удалось получить достаточно чистые фракции изомеров I и III для определения величин удерживания. 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 6 раз выше, чем для изомера III. Это свидетельствует о справедливости гипотезы авторов [Yu.S. Grushko, M.A. Khodorkovski, V.S. Kozlov, S.G. Kolesnik, V.A. Shilin, S.A. Grachev, T.O. Artamonova // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 14: 249-259, 2006] о важности быстрых электронных процессов в распадах возбужденных молекул металлофуллеренов. В подтверждение этому в работе [V. Averbukh and L.S. Cederbaum // Phys. Rev. Lett. 96, 053401 (2006)] указано, что в случаях, когда первичное возбуждение молекулы металлофуллерена локализовано на эндоэдрическом атоме, преобладающими модами распада молекулы являются фемтосекундные нерadiационные межатомные процессы.

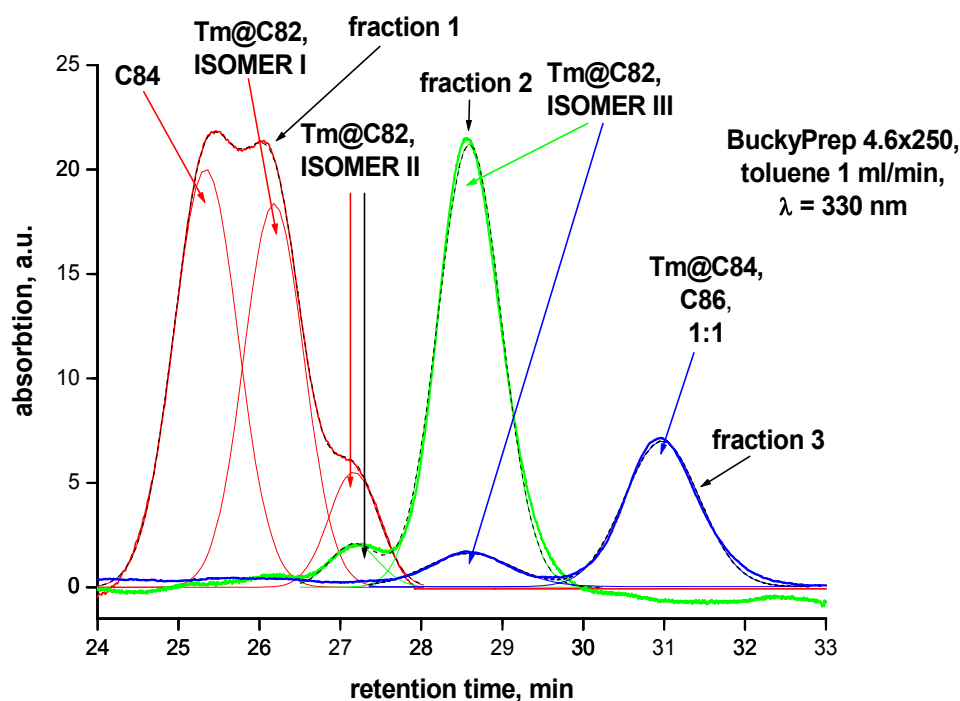


Рис.1. Препаративное выделение изомеров тулия.

По результатам подготовлен доклад и статья для публикации в материалах конференции В.А. Шилин, В.Т. Лебедев, С.Г. Колесник, В.С. Козлов, Ю.С. Грушко, В.П. Седов, В.В. Кукоренко. Исследование процесса нейтронной активации эндометаллофуллеренов редкоземельного ряда. XXI Совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2010), 16-19 ноября 2010, Москва.

В 2010 году по данной тематике опубликованы работы:

1. Lebedev V.T., Vinogradova L.V., Torok Gy., Shamanin V.V. Long-range self-assembly in solutions of star-shaped polymers with fullerene C₆₀ multifunctional centers. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, Vol. 18 Issue 4, P. 431-436.
2. Lebedev V.T., Grushko Yu.S., Orlova D.N., Kozlov V.S., Sedov V.P., Kolesnik S.G., Shamanin V.V., Melenevskaya E.Yu. Aggregation in hydroxylated endohedral fullerene solutions. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, Vol. 18 Issue 4, P. 422-426.
3. Grushko Yu.S., Kozlov V.S., Sedov V.P., Kolesnik S.G., Lebedev V.T., Shilin V.A., Loginov Yu.E., Kukorenko V.V., Tsyrlina E.V., Krzhivitsky P.I., Khodorkovsky M.A., Artamonova T.O., Shakhmin A.L., Shamanin V.V., Melenevskaya E.Yu., Konnikov S.G., Zamorianskaya M.V. MRI-contrasting system based on water-soluble fullerene / Gd-metallofullerene mixture. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, Vol. 18, Issue 4, P. 417-421.

4.11.2. Разработка методов получения высокочистых фуллеренов с целью создания государственных стандартов.

Дфмн Лебедев В.Т., кхн Грушко Ю.С.

Достигнутые научные результаты в виде развитых эффективных методов разделения и очистки фуллеренов позволили перейти к внедрению и разработке эталонов вещества для

наиболее распространенных фуллеренов C₆₀ и C₇₀ в интересах государственной стандартизации фуллереновых продуктов. В порядке выполнения Госконтракта «Создание метрологического комплекса и нормативно-методической базы для обеспечения единства измерений параметров углеродных наноструктурированных материалов и продукции наноиндустрии на их основе» разработаны, изготовлены и сертифицированы (совместно с ВНИИМ им. Д.И. Менделеева) Государственные стандарты состава фуллеренов C₆₀ и C₇₀. Изучена их временная стабильность. Приготовлены стандартные образцы состава смеси фуллеренов для проведения международной сверки методов анализа.

Получены следующие сертификаты:

свидетельство ГСО 9572-2010_C60_99_0

свидетельство ГСО 9555-2010_C60_99_9

свидетельство ГСО 9556-2010_C70_98_0

свидетельство ГСО 9557-2010_C70_99_0

свидетельство ГСО 9558-2010_C70_99_9

Проект 4.12

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

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

Изучение зависимостей параметров кристаллической и магнитной структуры интерметаллида Er₂Fe₁₇ в широкой области температур (4.2 К -- 300 К) до и после облучения быстрыми нейтронами

Выполнено нейтронографическое исследование кристаллической и магнитной структуры соединения Er₂Fe₁₇N_{2,18}. Экспериментально измерены температурные зависимости намагниченности подрешеток железа и эрбия и исследован переход спиновой переориентации в этом соединении. Проведен теоретический расчет температурных зависимостей намагниченностей подрешеток и дана интерпретация фазового перехода спиновой переориентации. Определены численные значения первых констант анизотропии соединения Er₂Fe₁₇N_{2,18} для подрешеток железа и эрбия. Установлено, что внедрение атомов азота в Er₂Fe₁₇ приводит к увеличению температуры Кюри в два раза и увеличению константы анизотропии редкоземельной подрешетки в 3,5 раза.

Результаты исследования опубликованы в [1].

• Э.З.Валиев, В.И.Воронин. Кристаллическая структура, намагниченности подрешеток и спин-переориентационный переход в соединении Er₂Fe₁₇N_{2,18}. ФТТ, 2010, т. 52, в. 5, с. 870-873.

Высокотемпературная нейтронография твердых электролитов K(Fe/Al)O₂

Моноалюминат калия KAlO₂ являются одним из наиболее перспективных твердых электролитов с калий -- катионной проводимостью, известных к настоящему времени. Хотя при комнатной температуре он имеет довольно низкую электропроводность, 10⁻⁶ – 10⁻⁷ Ом⁻¹·см⁻¹, но с повышением температуры она быстро возрастает и достигает довольно высокого значения ~ 3·10⁻³ Ом⁻¹·см⁻¹ при температуре 540 °С, увеличиваясь на 4 порядка. Выполненные ранее высокотемпературные исследования показали, что до этой температуры симметрия решетки и тип кристаллической структуры не изменяются. Подробного анализа структурных особенностей низкотемпературной модификации KAlO₂ не было проведено, и поэтому не был получен ответ, какие изменения в решетке приводят к такому колоссальному росту электропроводности. Поэтому мы выполнили прецизионные нейтронографические

эксперименты на дифрактометре высокого разрешения и выполнили более полный анализ структуры при комнатной температуре. Для подтверждения выводов о траекториях движения проводящих катионов из геометрического рассмотрения мы дополнили наш анализ расчетом возможных путей миграции методом построения графа Вороного-Дирихле, реализованного в программном комплексе TOPOS.

На рис.1 приведены экспериментальная (точки) и расчетная (линия, огибающая экспериментальные точки) нейтронограммы соединения KAlO_2 при комнатной температуре.

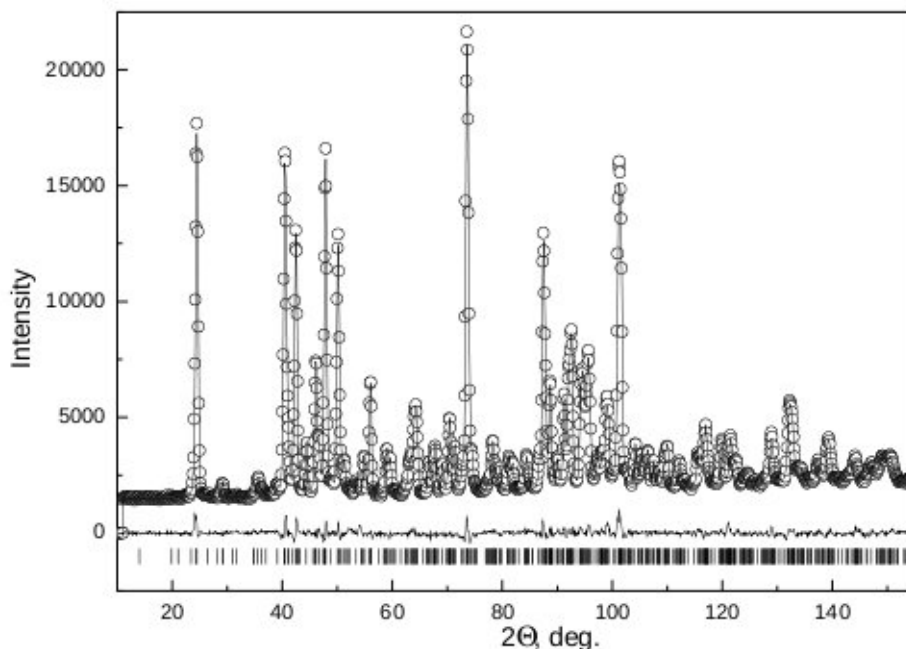


Рис. 1. Экспериментальная (точки) и расчетная (оглабающая линия) нейтронограммы KAlO_2 при комнатной температуре. Нижняя линия -- разность между расчетом и экспериментом, штрихи -- угловые положения рефлексов.

Уточненные параметры решетки есть $a = 5.4389(1) \text{ \AA}$, $b = 10.9235(2) \text{ \AA}$, $c = 15.4563(2) \text{ \AA}$.

Из анализа структурных особенностей было сделано предположение о том, что в низкотемпературной структуре имеются шесть каналов, возможных для движения катионов проводимости. Однако с учетом межатомных расстояний и величин поперечного сечения каналов мы нашли, что, скорее всего, ионная проводимость в орторомбической фазе KAlO_2 носит преимущественно одномерный характер.

Для построения карты проводимости KAlO_2 нами был использован комплекс программ TOPOS, который недавно модифицирован специально для исследования путей миграции ионов в твердых электролитах. Для применения методики к калий-содержащим сложным оксидам, к которым относится KAlO_2 , нами были рассмотрены структуры всех калиевых твердых электролитов, данные о проводимости которых содержатся в монографии и в Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) -- всего 42 соединения. Коэффициент деформации подбирался таким образом, чтобы воспроизвести имеющиеся данные по электропроводности (в том числе по ее размерности). Полученное значение составило $\gamma_{\text{KO}} = 0.85$, т.е. деформация пары К-О больше, чем пары Li-О, что согласуется с большей поляризуемостью ионов K^+ по сравнению с Li^+ . Принимая $r_i = 1.33 \text{ \AA}$ и $r_a = 1.36 \text{ \AA}$ получаем, что каналы, доступные для проводимости, должны обладать $r_c \geq 2.3 \text{ \AA}$.

Основываясь на наших экспериментальных данных, мы нашли, что только в направлении $[100]$ расположены широкие каналы с размером поперечного сечения $r_c \geq 2.3 \text{ \AA}$, который является критическим для возможности движения катионов калия. Карта миграции катионов в орторомбической фазе KAlO_2 при комнатной температуре показана на рис.2.

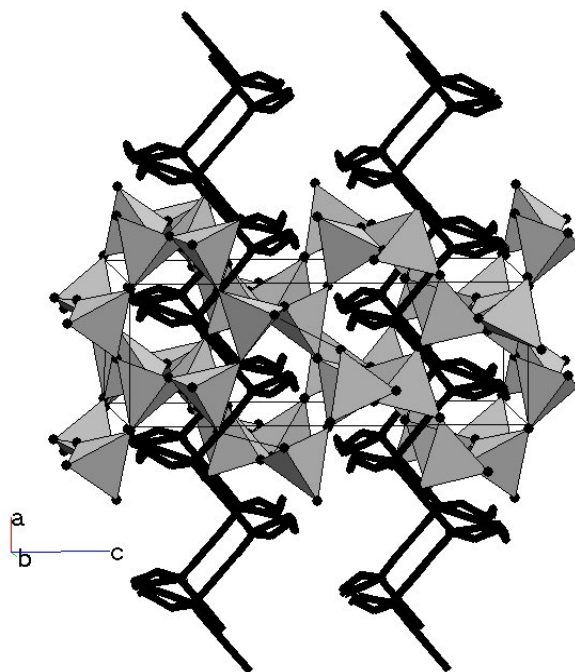


Рис. 2. Карта проводимости низкотемпературной фазы KAlO_2 . Черными линиями показаны две цепочки каналов с $r_c \geq 2.3 \text{ \AA}$, распространяющиеся вдоль $[100]$.

На рис. 2 видно, что проводимость в низкотемпературной фазе KAlO_2 осуществляется только в одном направлении. Это заключение позволяет понять низкую проводимость KAlO_2 при комнатной температуре.

Результаты исследования опубликованы в [1].

• В.И.Воронин, М.Г.Суркова, Г.Ш.Шехтман, Н.А.Анурова, В.А.Блатов. Механизм проводимости моноалюмината калия в низкотемпературной кристаллической форме. Неорганические материалы, 2010, т. 46, в. 10, с. 1-8.

Конкурирующие магнитные анизотропии и магнитное упорядочение в $\text{Tb}_x\text{Er}_{1-x}\text{Ni}_5$

Как известно, магнитная структура магнетика определяется двумя основными взаимодействиями: обменным взаимодействием между спинами атомов магнетика и магнитно-кристаллической анизотропией. Если энергия обменного взаимодействия превышает энергию анизотропии, то обмен между спинами определяет их взаимную ориентацию, а магнитная анизотропия ответственна за ориентацию спинов относительно кристаллографических осей. Что будет, если, напротив, энергия магнитно-кристаллической анизотропии превышает обменную энергию? Ответ не очевиден, особенно, в случае, когда магнетик содержит атомы, обладающие конкурирующими типами анизотропии. Чтобы ответить на этот вопрос, мы начали нейтронографические исследования гексагональных соединений $\text{Tb}_x\text{Er}_{1-x}\text{Ni}_5$. В этих соединениях энергия магнитной анизотропии превышает по величине обменную энергию почти на порядок, при этом ионы Tb и Er имеют разные типы магнитно-кристаллической анизотропии. Спины ионов Tb образуют магнитную подсистему XY, а эрбиевые спины можно рассматривать как изинговую магнитную подсистему. Еще

одним важным свойством соединений $Tb_xEr_{1-x}Ni_5$ является то, что магнитная анизотропия ионов Tb и Er обусловлена взаимодействием иона с кристаллическим электрическим полем, создаваемым окружающими ионами. Поликристаллические образцы $Tb_{0.5}Er_{0.5}Ni_5$ и $Tb_{0.6}Er_{0.4}Ni_5$ были синтезированы и аттестованы магнитными методами в Институте физики металлов. Нейтронографические измерения были выполнены в Институте Пауля Шерара (Швейцария) на дифрактометре холодных нейтронов DMC ($\lambda = 4.2 \text{ \AA}$) и на дифрактометре высокого разрешения в Корейском институте атомной энергии HRPD ($\lambda = 1.8 \text{ \AA}$). Рис. 1 показывает температурную зависимость АС-восприимчивости сплава $Tb_{0.5}Er_{0.5}Ni_5$.

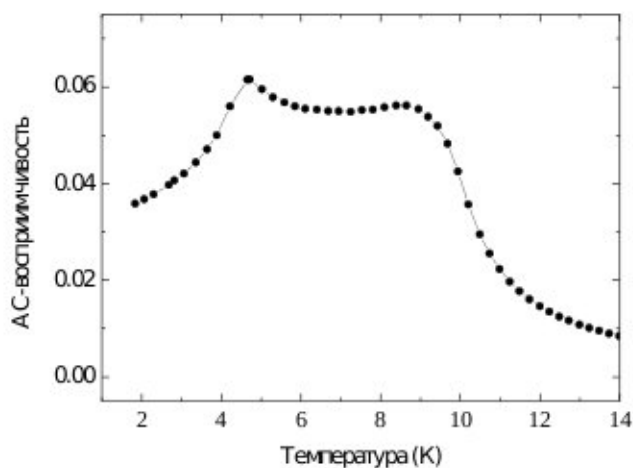


Рис. 1. АС-восприимчивость соединения $Tb_{0.5}Er_{0.5}Ni_5$.

Из рисунка видно, что АС-восприимчивость имеет аномалии при 4.6 и 8.8 К. Это может указывать на существование двух температур перехода в $Tb_{0.5}Er_{0.5}Ni_5$.

На рис. 2 приведены температурные зависимости полного момента и его компонент на базисную плоскость и c -ось.

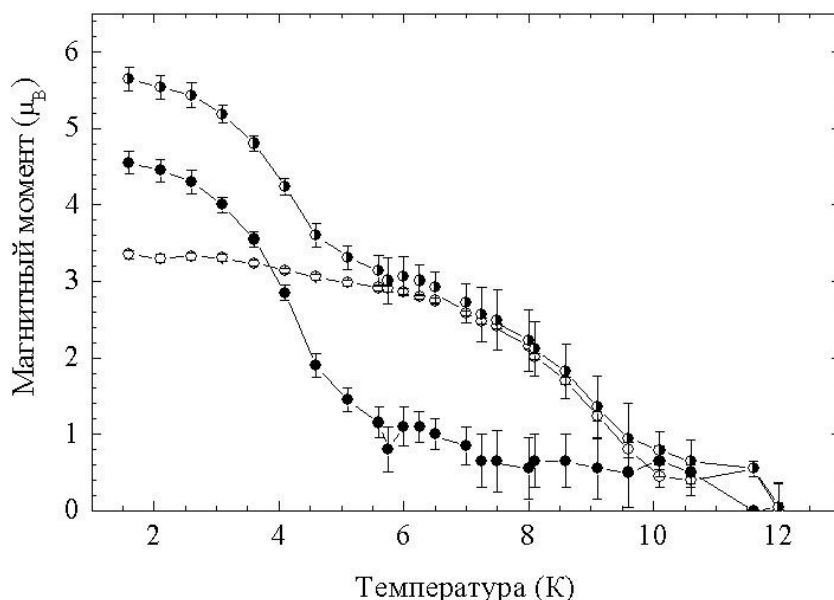


Рис. 2. Температурные зависимости полного магнитного момента редкоземельного иона и его проекций на базисную плоскость и c -ось. Светлые значки -- компонент момента вдоль c -оси, темные значки -- на базисную плоскость, полутемные значки -- полный магнитный момент.

Видно, что магнитное упорядочение ионов тербия (XY-подсистема) происходит при 9.5 -- 10 К, а спины эрбиевых ионов упорядочиваются при 6 -- 7 К. Нейтронографические измерения, выполненные нами на соединении $Tb_{0.6}Er_{0.4}Ni_5$ также свидетельствовали о независимом упорядочении моментов эрбиевых и тербиевых ионов.

Таким образом, в магнетике с конкурирующими анизотропиями имеют место два фазовых перехода. При более высокой температуре упорядочиваются магнитные моменты подсистемы спинов с большей энергией обменного взаимодействия. Магнитные моменты ионов с разными типами анизотропии упорядочиваются независимо и вдоль своих направлений осей легкого намагничивания.

Результаты исследования готовятся к опубликованию.

Магнитная структура $La_{1-x}Dy_xMn_2Si_2$

Тройные интерметаллические соединения типа RM_2X_2 , где М -- 3d, 4d или 5d переходный металл, Х -- Si или Ge, показывают широкий спектр физических свойств от сверхпроводимости до тяжело-фермионного поведения. Эти соединения можно рассматривать как природные сверхрешетки, так как слои с магнитными атомами отделены друг от друга слоями с немагнитными атомами: -R-X-M-X-R-. Среди них соединения с М = Mn выделяются уникальным набором магнитных фазовых переходов из-за необычной корреляции между внутрислоевым расстоянием Mn-Mn (d_{Mn-Mn}) и межслоевым упорядочением магнитных моментов ионов марганца. Критическое Mn-Mn расстояние равно, приблизительно, $d_c = (2.85 - 2.87) \text{ \AA}$ при комнатной температуре. Как правило, если $d_{Mn-Mn} > d_c$, то магнитные моменты ионов марганца имеют ферромагнитную компоненту вдоль *c*-оси. Если $d_{Mn-Mn} < d_c$, то имеет место антиферромагнитное упорядочение этой компоненты. Внутри слоевое расстояние d_{Mn-Mn} можно изменять как приложением давления так замещением редкоземельного иона другими ионами. Несмотря на большое число статей, посвященных этим соединениям, природа вышеуказанной корреляции не ясна до сих пор.

Чтобы пролить свет на природу этой корреляции мы провели в прошлом году нейтронографическое исследование магнитной структуры соединений $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$. В текущем году мы выполнили дифракцию нейтронов на соединениях ($0 < x < 1.0$), $La_{1-x}Dy_xMn_2Si_2$ ($0 < x < 1.0$), в которых внутрислоевое расстояние d_{Mn-Mn} непрерывно изменяется от $d_{Mn-Mn} > d_c$ ($LaMn_2Si_2$) до $d_{Mn-Mn} < d_c$ ($DyMn_2Si_2$). Ионы диспрозия как и ионы тербия обладают одноосной (*c*-ось) анизотропией, но ее величина для ионов Dy значительно ниже, чем для ионов Tb. Кроме того, обменные взаимодействия Tb-Mn и Tb-Tb превосходят обмен между Dy-Mn и Dy-Dy ионами. Следовательно, исследование систем соединений $La_{1-x}Dy_xMn_2Si_2$ и $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$ позволяет выяснить роль d_{Mn-Mn} расстояния, магнитной анизотропии и обмена в формировании магнитной структуры и свойств интерметаллидов типа RM_2X_2 .

Нейтронографические исследования были проведены на установке Д-3 (реактор ИВВ-2М, г. Заречный). Магнитные измерения были выполнены на SQUID магнитометре Института физики металлов.

Установлено, что замещение ионов лантана ионами диспрозия вызывает заметное изменение интенсивности, по крайней мере, пяти первых рефлексов. Расчет нейтронограмм позволил установить, что замещение ионов лантана на ионы диспрозия сопровождается постепенным уменьшением параметров решетки и объема элементарной решетки. Критическое расстояние d_c достигается при $x \sim 0.27$ для системы $La_{1-x}Dy_xMn_2Si_2$, а как было нами установлено в прошлом году, $x \sim 0.35$ в случае соединений $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$. Большее значение d_c в случае соединений с тербием является ожидаемым, так как ионный радиус тербия больше, чем радиус диспрозия, и, следовательно, требуется большее

замещение для достижения критического расстояния. Соединения $\text{La}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$ с $x < 0.2$ имеют температурные зависимости намагниченности $M(T)$ типичные для ферромагнетиков. Намагниченность соединений с $x > 0.2$ заметно увеличивается при температурах ниже 50 К, что указывает на упорядочение моментов Dy. При $T > 50$ К температурные зависимости аналогичны зависимостям антиферромагнетиков с максимумом при температуре Нееля $T_N = 290$ К. Подобное поведение зависимостей $M(T)$ наблюдается и для соединений $\text{La}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$. Изменения в нейтронограммах, происходящие при увеличении концентрации диспрозия отражают изменение в магнитной структуре при 4.2 К. Мы выделили 4 типа (F, F', AF и F'') магнитного упорядочения, реализуемых в $\text{La}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$ в при изменении концентрации x . Все четыре типа описываются волновым вектором $\mathbf{k} = 0$, но разным взаимным расположением магнитных моментов внутри слоя. В LaMn_2Si_2 моменты ионов Mn имеют ферромагнитную компоненту вдоль c -оси. В соединениях с $x = 0.1$ и 0.2 ферромагнитное упорядочение c -компоненты момента Mn сохраняется, но появляется и ферромагнитный порядок моментов ионов Dy. Отметим, что магнитные моменты ионов диспрозия антиферромагнитно связаны с ферромагнитной компонентой ионов марганца. Антиферромагнитное (AF) упорядочение c -компонент Mn моментов реализуется в составах с $\delta = 0.27$ и 0.4 , в которых c -компоненты моментов ионов марганца, расположенных в соседних слоях, ориентированы в одном направлении. Увеличение концентрации диспрозия до $\delta = 1.0$ снова приводит к ферромагнитному порядку c -компоненты магнитного момента ионов марганца.

На основе данных магнитных и нейтронографических измерений построены магнитные фазовые диаграммы соединений систем $\text{La}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$. В случае $\text{La}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$ фазовая диаграмма может быть описана следующим образом. Магнитный порядок моментов диспрозия существует только при температурах ниже 50 К. При температурах выше 50 К и ниже 300 К в составах с $x < 0.2$ имеет место ферромагнитный порядок c -компонент момента ионов марганца. В образцах с $x > 0.2$ реализуется антиферромагнитный порядок, причем T_N увеличивается с концентрацией x до 450 К.

Итак, в соответствии с общей картиной поведения магнитных свойств соединений RM_2X_2 , в исследованных нами интерметаллидах происходит переход от ферромагнитного упорядочения моментов в соседних марганцевых слоях к антиферромагнитному, когда внутрислойное расстояние Mn-Mn равняется критическому расстоянию. По-видимому, переход от антиферромагнитного порядка к F'' ферромагнитному упорядочению обусловлен конкуренцией взаимодействий между Mn-Mn и Mn-R, поскольку в соединениях $\text{La}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$ ферромагнитный F'' порядок реализуется при более низкой концентрации редкоземельного иона, чем в соединениях с Dy.

Результаты исследования опубликованы в [1].

• E.G.Gerasimov, Yu.A.Dorofeev, A.N.Pirogov, V.S.Gaviko, N.V.Mushnikov. Magnetic phase transition in $\text{La}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Mn}_2\text{Si}_2$ ($0 < x < 1$) compounds. J. Phys.: Conference Series 200 (2010) 032018-4.

Нейтронографическое исследование влияния температуры на структурное состояние интеркалированного соединения окисленного графита

Соединения графита образуют класс веществ с широким спектром физико-химических свойств и находят применение в качестве проводящих материалов, катализаторов, компонентов химических источников тока и т. д.. Важной группой среди них являются так называемые интеркалированные соединения графита. Они формируются внедрением атомных или молекулярных слоев различных химических элементов,

называемых интеркалантом, в пространство между графитовыми плоскостями. Интеркалированные соединения образуются в высокоанизотропных кристаллических структурах, где взаимодействия между атомами внутри слоя значительно превосходят межслоевые взаимодействия. Среди интеркалированных соединений, соединения графита представляют особый интерес из-за высокой степени структурного порядка интеркалированных соединений графита. Наиболее важным свойством, характеризующим структурный порядок интеркалированных слоев является периодическое чередование слоев графита и интеркаланта. Это чередование описывается численно параметром стадии n , который показывает сколько графитовых слоев, находится между двумя соседними слоями интеркаланта. Это свойство является общим для всех интеркалированных соединений графита, даже с очень небольшими концентрациями интеркаланта, когда $n \sim 10$.

Интеркаляция позволяет контролировать многие физические свойства графита. Например, концентрация свободных зарядов в графите при комнатной температуре составляет, около, 10^{-4} носитель/атом, а, интеркалирование позволяет изменять концентрацию носителей в широких пределах, что сопровождается изменением электрических, тепловых и магнитных свойств интеркалированного соединения. При этом, такие изменения позволяют синтезировать материалы с очень важными для практики свойствами. Например, как было обнаружено еще в 80 годах, интеркалированное соединение $C \times AsF_5$ имеет проводимость превосходящую проводимость меди, а соединение C_8K является сверхпроводником, хотя ни углерод, ни калий в отдельности не обладают сверхпроводящими свойствами. Очень важным применением интеркалированных соединений графита является их использование в качестве прекурсоров для получения расширенного графита (РГ). Полученный таким образом РГ является сорбентом для многих реактивных и ядовитых жидкостей.

В данной работе проведено нейтронографическое исследование интеркалированных соединений окисленного графита (ИСОГ) с целью изучения структурных превращений при изменении интеркаланта и температуры. Отметим, что сорбционная емкость РГ, синтезированного из ИСОГ, в сотни и тысячи раз выше, чем емкость сорбента, полученного из обычного графита.

Нейтронографические измерения были проведены на дифрактометрах Д-2 и Д-3 реактора ИВВ-2М (Заречный). Использовались нейтронные пучки с длиной волны 1.80 Å и 2.43 Å, соответственно в случае Д-2 и Д-3 дифрактометров.

На рисунках 1 и 2 приведены рентгено- и нейтрограммы ИСОГа, имеющего химическую формулу $C_2F \times ClF_3$. Расчет рентгено- и нейтрограммы позволяет сделать вывод, что исследуемый образец имеет вторую стадию насыщения ($n = 2$). Кристаллическая структура описывается пространственной группой $P 6_3/mmc$, параметры гексагональной решетки равны $a = 6.461(2)$ Å и $c = 15.505(5)$ Å. Аналогичные нейтрограммы мы получили и в случае образцов $C_2F \times x B_2F_3$ и $C_2F \times C_6H_6$. Но, нейтрограмма, полученная для ИСОГа, имеющего формулу $C_2F_y \times CCl_4$, содержала только один пик (это пик 002) в малоугловой части нейтрограммы. Для сравнения нейтрограммы $C_2F \times x B_2F_3$ и $C_2F_y \times CCl_4$ приведены на одном рисунке 3.

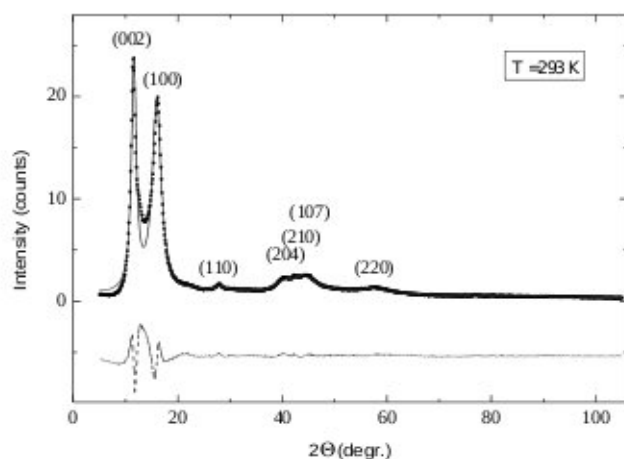


Рис. 1. Рентгенограмма $C_2F \times x ClF_3$ при 293 К.

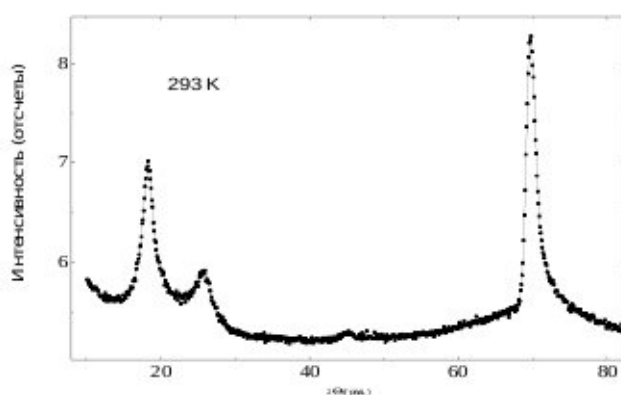


Рис. 2. Нейтронограмма $C_2F \times x ClF_3$ при 293 К.

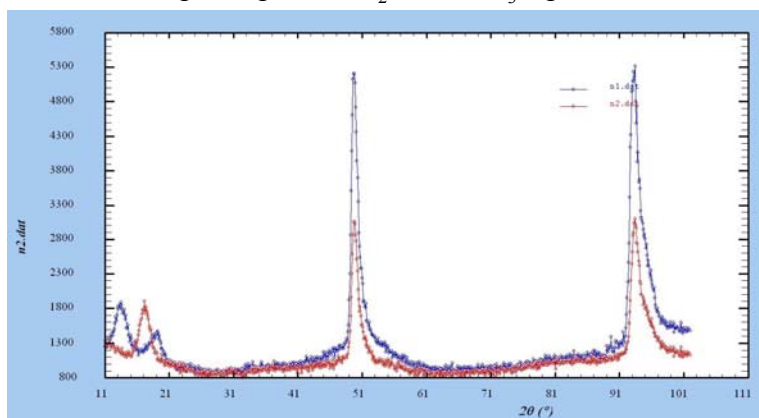


Рис. 3. Нейтронограммы $C_2F \times x B_2F_3$ (n1) и $C_2F_y \times CCl_4$ (n2) при 293 К

Из рисунка хорошо видно, различие между образцами проявляется на нейтронограммах в области углов $2\theta = (10 - 20)^\circ$. Из расчета мы получили, что ИСОГ с формулой CCl_4 относится к первой стадии насыщения ($n = 1$).

Чтобы выяснить происходят ли структурные изменения в наших образцах при изменении температуры, мы изучили температурное поведение ИСОГа $C_2F \times x ClF_3$.

На рис. 4 приведены нейтронограммы, полученные нами на $C_2F \times x ClF_3$ при 4,2, 77 и 293 К.

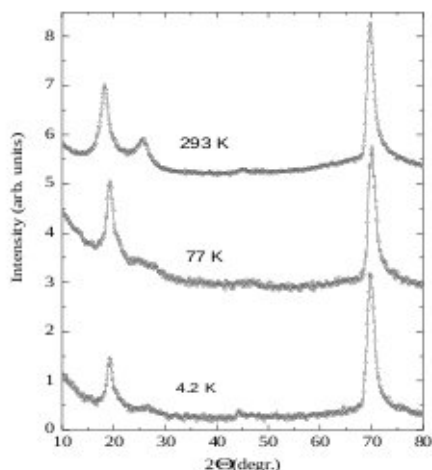


Рис. 4. Нейтронограммы $C_2F_xClF_3$ при 4.2, 77 и 293 К.

Из рисунка 4 видно, что повышение температуры вызывает увеличение интенсивности (002) -- первого и (100) -- второго рефлексов. Если при 4.2 К рефлекс (100) почти отсутствует, то он отчетливо проявляется при 293 К. Такое температурное поведение сильно отличается от ИСОГов, интеркалированных щелочными металлами, в которых, напротив, рефлексy исчезают с повышением температуры. В настоящее время мы проводим численные расчеты для определения температурных зависимостей структурных параметров образца $C_2F_xClF_3$, чтобы установить механизм, ответственный за структурные изменения образца в области 4.2--293 К.

Результаты исследования готовятся к опубликованию.

Нейтронографическое исследование полуметаллических ферромагнитных CrO_2 нанотрубок

Соединение CrO_2 принадлежит к классу объектов, называемых полуметаллическими ферромагнетиками (ПМФ). Этот класс соединений обладает свойством проводить электроны с одной ориентацией спина и является диэлектриком для электронов с противоположной ориентацией спина.

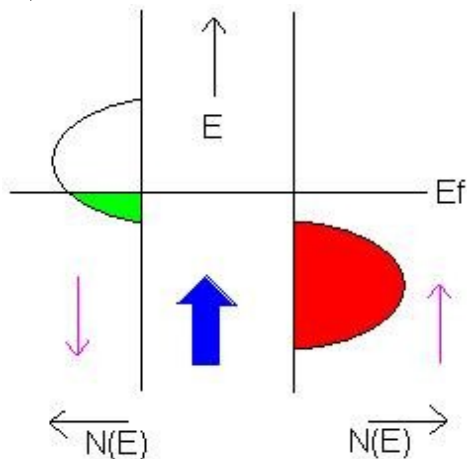
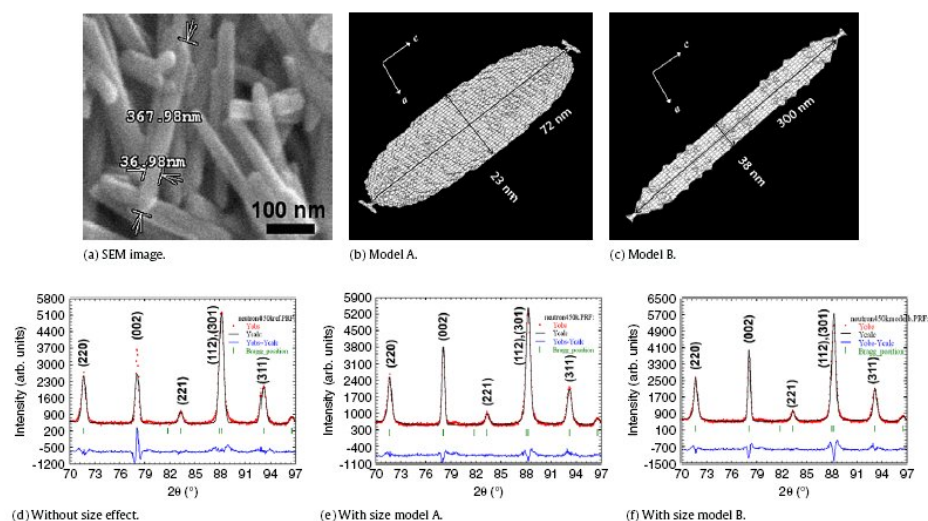


Рис. 1. Валентная зона для электронов с одним типом проекции спина, например со спином $\uparrow$, как указано на рисунке, заполнена полностью, в то время как валентная зона для электронов с противоположной проекцией спина, соответственно, заполнена лишь частично.

Таким образом, только электроны с одной проекцией спина, , могут переходить от атома к атому. В последнее десятилетие одним из актуальнейших направлений в физике твердого тела стало исследование магнитных нанокристаллов вследствие их высокого потенциала применения в нанoeлектронике и спинтронике. Поэтому, благодаря своим уникальным свойствам проводить электроны только с одной проекцией спина, на образцах CrO_2 в форме наностержней и нанопроволоки за последние годы был получен большой объем экспериментальных данных. Однако, микроструктурные свойства данных объектов исследованы не были, поскольку CrO_2 является метастабильным оксидом и получение порошковых образцов с размером порошинки порядка нескольких микрон для порошковой дифракции является сложной технической задачей. Впервые нами было проведено исследование микроструктурных и магнитных свойств синтезированного компанией DuPont нанопорошка CrO_2 в интервале температур от 4.5 до 450 К методом нейтронной дифракции с использованием дифрактометра высокого разрешения HRPD (длина волны 1.8345 Å).



На рис. 2 приведены (а) фотография сканирующего электронного микроскопа, схематическая форма наностержней по двум предложенным нами моделям А и В, результаты расчета нейтронограмм без учета размера нанотрубок и с учетом двух предложенных нами моделей А и В.

Наиболее подходящей моделью, описывающей размер и форму nano CrO_2 трубок, была выбрана модель А (рис. 2) согласно которой CrO_2 нанотрубка состоит из нескольких микроскопически ориентированных зерен. Из анализа нейтронограмм был сделан вывод о том, что при понижении температуры $T < T_c$ происходило значительное сжатие вдоль направления ab параметров решетки, что приводило к апиальному искажению CrO_6 октаэдров и уменьшению соответствующих межатомных расстояния Cr-O. Сжатие ab параметров решетки было связано со специфической формой CrO_2 наностержней. Был сделан вывод о том, что при понижении температуры вследствие апиального искажения CrO_6 октаэдров происходит локализация одного электрона на самой низкоэнергетической xz -орбитали. Смешанные более высокоэнергетичные $(yz \pm zx)$ орбитали заняты коллективизированными электронами из 3d-зоны Cr. Подобное изменение в электронной локализации может индуцировать ферромагнетизм в полуметаллах.

Результаты исследования опубликованы в [1].

• Joonghoe Dho, Sanghoon Ki, A.F. Gubkin, J.M.S. Park, E.A. Sherstobitova. A neutron diffraction study of half-metallic ferromagnet nanorods. Solid State Communications, Volume 150, Issues 1-2, January 2010, Pages 86-90.

Магнитотепловые свойства редкоземельных интерметаллидов R_5Pd_2 (R -- Tb, Ho, Er)

Способность материала нагреваться (охлаждаться) при намагничивании или размагничивании внешним магнитным полем известна как магнитокалорический эффект. Параметрами, характеризующими величину магнитокалорического эффекта, являются изотермическое изменение магнитной энтропии ΔS_M и адиабатическое изменение температуры ΔT_{ad} при изменении внешнего магнитного поля. В конце 1990-х Pecharsky V.K. и Gschneidner K.A. Jr. обнаружили гигантский магнитокалорический эффект (ГМКЭ) на соединении $Gd_5Si_2Ge_2$ в интервале температур, близких к комнатной. Данное открытие послужило мощным стимулом к исследованию новых материалов на предмет обнаружения ГМКЭ. Интенсивные поиски вскоре привели к открытию ГМКЭ на соединении MnAs. Большое изменение магнитной энтропии ΔS_M для системы $Gd_5Si_2Ge_2$ изначально связывали с большим значением намагниченности насыщения ($\sim 7.1 \mu_B$) в данном соединении. Однако, гораздо большее значение ΔS_M , обнаруженное в системе MnAs с меньшей намагниченностью насыщения ($\sim 3.4 \mu_B$), а также фазовый переход первого рода, как и в системе $Gd_5Si_2Ge_2$, указали исследователям на вполне очевидный факт: не только величина магнитного момента, но и тип фазового перехода определяют величину ГМКЭ. Еще одним экспериментальным подтверждением данного вывода было обнаружение ГМКЭ в системах $MnFeP_{0.45}As_{0.55}$, демонстрирующей фазовый переход первого рода. И хотя объяснение ГМКЭ на макроскопическом уровне в соединениях демонстрирующих фазовый переход первого рода в рамках термодинамического уравнения Максвелла не вызывало затруднений, дискуссия о механизме ГМКЭ на микроскопическом уровне до сих пор остается открытой.

Современные исследования ГМКЭ в большей степени сосредоточены на соединениях демонстрирующих фазовый переход первого рода типа беспорядок-порядок из парамагнитного в ферромагнитное состояние. И лишь несколько работ было посвящено исследованию ГМКЭ на системах демонстрирующих магнитный фазовый переход типа порядок-порядок из антиферромагнитного состояния в индуцированное ферромагнитное $ErRu_2Si_2$, Ho_5Pd_2 . Особенно интересным, вследствие превосходных параметров ГМКЭ (рекордное значение относительной охлаждающей мощности в области низких температур), является состав Ho_5Pd_2 .

Однако, в имеющаяся литературе информация о механизме магнитокалорического эффекта на микроскопическом уровне, магнитной структуре, магнитотепловых свойствах данного соединения отсутствует. Более того, имеющиеся в литературе данные магнитных измерений на поликристаллических составах Tb_5Pd_2 , Er_5Pd_2 , Dy_5Pd_2 дают основания предполагать наличие в данных соединениях ГМКЭ с параметрами, сравнимыми с Ho_5Pd_2 . Таким образом, целью данной работы является: установление основных факторов, определяющих механизм ГМКЭ на микроскопическом уровне в соединении с рекордным значением относительной охлаждающей мощности (RCP) Ho_5Pd_2 ; установление влияния типа редкоземельного иона на величину МКЭ в составах Tb_5Pd_2 , Er_5Pd_2 , Dy_5Pd_2 .

Нами был синтезирован первый поликристаллический образец Tb_5Pd_2 из запланированного ряда R_5Pd_2 (R -- Tb, Ho, Er) интерметаллических соединений. На нем были проведены нейтронографические исследования на дифрактометре высокого

разрешения HRPD с длиной волны 1.8345 Å при температуре 300 К, 100 К, 65 К, 45 К, 32 К и 5 К.

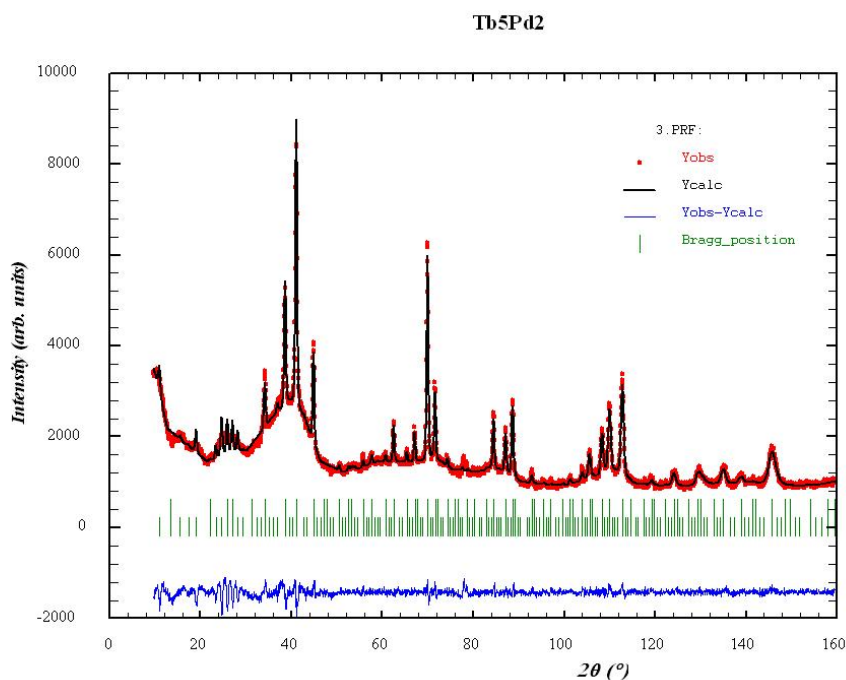


Рис. 3. Нейтронограмма Tb_5Pd_2 при 5 К. Волновой вектор магнитной структуры $k = 000.423$. На малых углах хорошо видны широкие максимумы магнитного диффузного рассеяния, что говорит о присутствии больших магнитных неоднородностей в соединениях.

По результатам измерения магнитных свойств этого соединения рассчитана величина МКЭ.

Результаты исследования опубликованы в [1].

• E.A.Sherstobitova, A.F.Gubkin, A.V.Korolev, N.V.Baranov. VI Euro-Asian Symposium Trends in Magnetism. Nanospintronics. EASTMAG 2010 Book of abstracts. Frustrated magnetic state in Tb_5Pd_2 . 2010, P.81.

Нейтронографическое исследование влияния гидрирования (дейтерирования) на кристаллическую структуру и магнитные свойства интерметаллического соединения ErFe_2

Большой интерес к исследованиям гидридов редкоземельных интерметаллидов типа RM_2H_x обусловлен высокой адсорбционной способностью металлической подсистемы, интригующими изменениями магнитных свойств при гидрировании и явлением водородно-индуцированной аморфизации, наблюдающейся в некоторых случаях даже при очень низких температурах и давлении водорода. Одно из таких интригующих изменений это увеличение магнитного момента 3d -- переходного металла, в то время как температура Кюри значительно понижается при гидрировании.

К настоящему времени гидридам типа RM_2H_x посвящено огромное число теоретических и экспериментальных работ, тем не менее пока нет нейтронографических исследований кристаллической структуры и магнитного состояния гидридов, в которых реализуется спонтанный переход из ромбоэдрической фазы в кубическую при повышении температуры. Нами проведены нейтронографические измерения гидрида $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$. Измерения выполнены в интервале температур 12 -- 450 К, включающем температуру Кюри на высокоразрешающем порошковом дифрактометре длина волны 1.8345 Å. Вследствие большого некогерентного рассеяния атомами водорода погрешность анализа

кристаллической структуры системы ErFe_2H_x велика. Поэтому нами были синтезированы и исследованы методом нейтронной дифракции соединения $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ с дейтерием, обладающим сравнительно небольшим сечением некогерентного рассеяния.

При 450 К анализ нейтронограмм соединений $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$ и $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ показал, что распределение атомов дейтерия по позициям по сравнению с атомами водорода в кубической ячейке типа C15 приводит к образованию сверхструктурного упорядочения (рис.4). Установлено, что кристаллическая структура $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ при температуре $T = 450$ К описывается пространственной группой F23, а не Fd3m как считалось ранее. Анализ межатомных расстояний позволил сделать вывод о том, что частичное заполнение своих позиций атомами водорода и дейтерия связано с электростатическим взаимодействием между ионами.

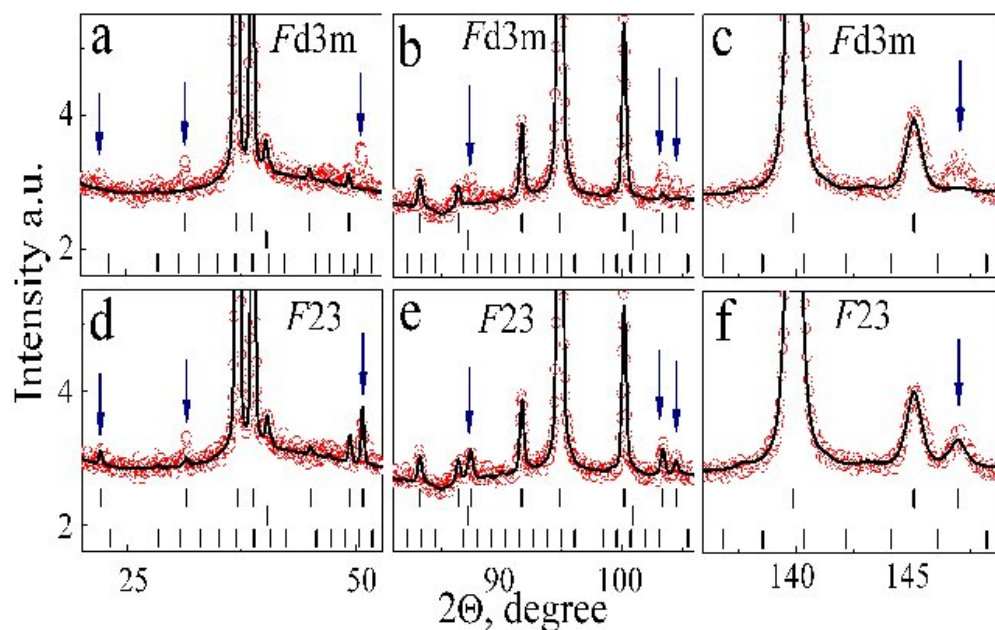


Рис. 4. Участки нейтронограммы соединения $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ рассчитанного с помощью пространственной группы Fd3m (a),(b),(c) и F23 (d),(e),(f) SG при температуре $T = 450$ К. Линия -- расчет по предложенной модели. Первая линия штрихов под нейтронограммой соответствует рефлексам от пространственной группы Fd3m (a,b,c) или F23 SG (d,e,f); вторая линия штрихов -- ванадиевому контейнеру; третья -- примесь соединения Er_2O_3 . Сверхструктурные рефлексy которые не могут быть описаны в Fd3m SG помечены стрелками.

С понижением температуры дейтерида до 320 К на нейтронограммах возникает расщепление линий, свидетельствующее о структурном переходе в ромбоэдрическую фазу (пр. группа $R\bar{3}m$). При комнатной температуре дейтерид содержит кубическую и ромбоэдрическую фазы с параметрами решеток $a = 7.766$ Å -- кубическая фаза и $a = 5.556$ Å и $c = 13.267$ Å -- ромбоэдрическая фаза. Переход заканчивается при 250 К. Такой же переход в гидриде полностью заканчивается при 300 К, что на 50 К выше, чем в случае дейтерида.

При 12 К магнитная структура гидрида и дейтерида описывается волновым вектором $k = 0$, намагниченности эрбиевой и железной подрешеток антипараллельны друг другу. Величина намагниченности Fe ионов равна $1.8 \mu_B$, что несколько выше, чем намагниченность Fe ионов в исходном сплаве ErFe_2 . Напротив, намагниченность эрбиевых

ионов уменьшилась при гидрировании с $8.8 \mu_B$ (в исходном сплаве) до $4.3 \mu_B$ в дейтериде. Температуры Кюри дейтерида и гидрида примерно, одинаковы и составляют, около, 430 К. Что почти на 200 К ниже, чем T_C исходного сплава ErFe_2 .

Полученные данные позволяют предположить, что обменное Er-Fe взаимодействие обуславливает значительный вклад в температуру Кюри гидридов и дейтеридов, тогда как в негидрированных соединениях этот вклад относительно невелик.

Основные результаты опубликованы в [1].

• E.A.Sherstobitova, A.Gubkin, L.A.Stashkova, N.V.Mushnikov, P.B.Terent'ev, D.Cheptiakov, A.E.Teplykh, Junghwan Park, A.N.Pirogov. Crystal structure of $\text{ErFe}_2\text{D}_{3,1}$ and $\text{ErFe}_2\text{H}_{3,1}$ at 450 K. Journal of Alloys and Compounds. (В печати).

Структурное и магнитное состояние низколегированного кристалла $\text{Zn}_{1-x}\text{V}_x\text{Te}$

Хорошо известно, что полупроводники II-VI с ионно-ковалентными связями, легированные 3d-переходными элементами (например, ZnO:Co [1,2], ZnSe:Cr [3]), представляют как практический, так и фундаментальный интерес. Ранее в наших работах подробно исследовалось методом дифракции нейтронов структурное состояние кубических кристаллов $\text{Zn}_{1-x}\text{V}_x^{2+}\text{Se}$ и $\text{Zn}_{1-x}\text{Cr}_x^{2+}\text{Se}$ с уровнями легирования $x=0.0018$ и 0.0029 [3,4] соответственно. Было показано, что структурное состояние данных кристаллов является пространственно неоднородным. При этом средний размер структурной неоднородности составляет около десяти нанометров, т. е. существенно превышает величину параметра решетки селенида цинка. Было установлено также, что контраст микрообласти в исследованных кристаллах обусловлен поперечными смещениями ионов селена и цинка, источником которых являются ян-теллеровские ионы V^{2+} и Cr^{2+} с конфигурациями внешних d -электронов $3d^3$ и $3d^4$.

Для того чтобы основные выводы [3,4] были более обоснованными, в настоящей работе проведено дополнительное исследование структурных искажений и магнитных корреляций в кубическом кристалле $\text{Zn}_{1-x}\text{V}_x^{2+}\text{Te}$ ($x=0.0002$). Отличие вновь синтезированного кристалла от исследовавшихся в [3,4] заключается в следующем. Во-первых, он синтезирован на базе соединения ZnTe , в котором линейный размер иона $\text{Te}^{2-} = 4.22 \text{ \AA}$ существенно превышает величину размера иона $\text{Se}^{2-} = 2.6 \text{ \AA}$. Во-вторых, уровень легирования кристалла примерно на порядок ниже, чем у кристаллов, исследованных в [3,4]. Существенное снижение уровня легирования позволит, по нашему мнению, выявить дополнительные особенности структурного и магнитного состояния в ионных соединениях данного класса.

В настоящей работе методами дифракции тепловых нейтронов и магнитных измерений впервые получены сведения о структурном и магнитном состоянии полупроводникового кристалла $\text{Zn}_{1-x}\text{V}_x^{2+}\text{Te}$ ($x=0.0002$). Результаты эксперимента обсуждаются совместно с ранее полученной информацией о соединениях $\text{Zn}_{1-x}\text{Ni}_x^{2+}\text{Se}$ ($x=0.0025$), $\text{Zn}_{1-x}\text{Cr}_x^{2+}\text{Se}$ ($x=0.0029, 0.045$). Обнаружено, что структурное состояние низколегированного кристалла является пространственно неоднородным. При этом средний размер структурной неоднородности (L) существенно превышает величины L в ранее исследованных соединениях на базе селенида цинка.

Системный анализ сдвиговых деформаций в $\text{Zn}_{1-x}\text{V}_x^{2+}\text{Te}$ ($x=0.0002$) позволяет качественно понять происхождение антиферромагнитных корреляций в области низких температур.

Результаты исследования опубликованы в [5].

- И.П. Кузьмина, В.А. Никитенко. Оксид цинка. Получение и оптические свойства. Наука, М. (1984). 251 с.
- С.Ф. Дубинин, В.И. Соколов, В.Д. Пархоменко, В.И. Максимов, Н.Б. Груздев. ФТТ 51, 1905 (2009).
- В.И. Соколов, С.Ф. Дубинин, С.Г. Теплоухов, В.Д. Пархоменко, Н.Б. Груздев. ФТТ 47, 1494 (2005).
- С.Ф. Дубинин, В.И. Соколов, С.Г. Теплоухов, В.Д. Пархоменко, Н.Б. Груздев. ФТТ 49, 1177 (2007).
- С.Ф. Дубинин, В.И. Соколов, В.И. Максимов, В.Д. Пархоменко, В.А. Казанцев. ФТТ, 2010, т. 52, в. 8, с. 1486-1491.

Структура и магнетизм кристаллов полупроводниковых соединений (Ga_{1-x}Mn_x)₂Se₃ (x = 0 ÷ 0.04)

В последнее время существенно возрос интерес к исследованиям полупроводниковых соединений, легированных магнитоактивными ионами 3d-элементов, которые относятся к широкому классу веществ A²B⁶ и A³B⁶. Главным образом он связан с идеей создания электронных приборов со спиновой поляризацией тока (спинтроникой) на базе указанных и родственных им соединений. Эти вещества принято относить к классу разбавленных магнитных полупроводников. Отметим, что разбавленные магнитные полупроводники на базе соединений A²B⁶ имеют простую кристаллическую структуру. Например, соединения Zn_{1-x}Me_xSe(Te), (Me = V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) имеют гранецентрированную кубическую структуру с параметром решетки $a = 0.57$ nm. Ранее в наших работах было подробно исследовано структурное состояние указанных выше массивных кристаллов. Методом дифракции тепловых нейтронов было установлено, что в широкой температурной области в этом классе полупроводников существует два типа локальных ян-теллеровских искажений кристаллической решетки: 1) нанодеформации тригонального типа, обусловленные ионами Ni, V; 2) искажения тетрагонального типа, индуцированные ионами Cr, Fe. При этом отметим, что указанные выше двухвалентные ионы замещают в решетке ионы Zn²⁺, а следовательно, располагаются в центре тетраэдров, образованных в этом классе соединений ионами селена.

Одним из представителей группы A³B⁶ является соединение Ga₂Se₃ со сложной кристаллической структурой. Это вещество имеет моноклинную кристаллическую структуру. Представляется интересным проверить на примере легированных полупроводниковых соединений (Ga_{1-x}Mn_x)₂Se₃ (x = 0 ÷ 0.04) степень универсальности физических представлений, развитых нами ранее в кристаллах.

Помимо фундаментальных научных исследований полупроводниковые детекторы ионизирующих частиц, созданных на базе Ga₂Se₃, могут найти широкое применение в прикладных областях жизнедеятельности человека при получении медицинских и биологических рентгеновских изображений.

В настоящей работе проведено исследование структурного и магнитного состояния разбавленных магнитных полупроводников по типу A³B⁶ с низким уровнем легирования. В качестве объекта исследования использовались массивные кристаллы (Ga_{1-x}Mn_x)₂Se₃ (x = 0 ÷ 0.04). Именно это обстоятельство позволило впервые выявить в данных соединениях ряд структурных и магнитных особенностей, представляющих, по нашему мнению, фундаментальный интерес.

Результаты исследования опубликованы в [1].

- С.Ф.Дубинин, В.И.Соколов, В.И.Максимов, В.Д.Пархоменко, Н.Н.Колесников, А.В.Королев. Структура и магнетизм кристаллов полупроводниковых соединений (Ga_{1-x}Mn_x)₂Se₃ (x = 0 ÷ 0.04). ФТТ, 2010, т. 52, в. 5, с.1034-1037.

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

ПИЯФ РАН: проф. В.А. Трунов, А.П. Булкин, д. ф.-м. н. В.Т. Лебедев,
к. ф.-м. н. Г.П. Гордеев, к. ф.-м. н. В.В. Рунов, д. ф.-м. н. Р.Ф.Коноплева,
к. ф.-м. н. О.П. Смирнов., к. т. н. А.Ф. Щебетов, к. ф.-м. н. Ю.П. Черненко,
к. ф.-м. н. В.А. Чеканов, к. ф.-м. н. Н.К. Плешанов, к. ф.-м. н. В.Г. Сыромятников,
к. ф.-м. н. В.А. Кудряшев, к. ф.-м. н. С.В. Григорьев
ФТИ им. А.Ф. Иоффе: д. ф.-м. н. С.Б. Вахрушев

5.1.1 Разработка и изготовление оборудования нейтронного канала №9а и нейтронного дифрактометра для исследования веществ при высоких давлениях (ДВД) на реакторе ПИК:

дфмн. А.И.Курбаков, кфмн В.А.Ульянов, А.П.Булкин

Этап 2010:

Проектирование механической оснастки для систем формирования нейтронных пучков нейтронного канала №9а реактора ПИК.

Механическая оснастка для систем формирования нейтронных пучков нейтронного канала №9а реактора ПИК спроектирована.

5.1.2. Рефлектометр с вертикальной плоскостью рассеяния “Реверанс”.

кфмн Гордеев Г.П., снс Аксельрод Л.А.

Этап 2010:

Создание и отладка программы управления работой рефлектометра. Изготовление необходимых для этого электронных модулей. Пробные физические измерения отражения нейтронов от свободной поверхности жидкости под управлением созданной программы. Проведение некоторых методических измерений.

Силами отдела “Автоматизации измерений” разработана программа управления движениями рефлектометра с вовлечением в процесс измерения 2D-детектора. Программа отлажена при проведении автоматического сканирования по значениям любых параметров с измерением интенсивности нейтронного пучка 2D-детектором. Получен поляризованный пучок с длиной волны 5.5 ангстрем, отраженный от верхнего зеркала-поляризатора и который предназначен для изучения нижней поверхности (границы раздела) образца. Достигнута поляризация со значением 0.89. С помощью данной программы проведена настройка прибора для получения пучка нейтронов, отраженного от нижнего зеркала-поляризатора, необходимого для изучения свободной поверхности жидкости (пучок падает на верхнюю границу образца). Для измерения спектра нейтронов этого пучка изготовлен модуль для время-пролетных измерений. В настоящее время он испытывается, после чего намечено измерение отражения от свободной поверхности феррожидкости. С целью увеличения светосилы время-пролетного метода измерения спектра нейтронов предложен и испытывается “электронный” прерыватель поляризованного пучка (плоская катушка или фольга с токов).

5.1.3. Реализация схемы SESANS

нс Ю.О.Четвериков, кфмн Гордеев Г.П., снс Аксельрод Л.

Этап 2010.

Пробные измерения моделей РЧ- узлов для реализации спектрометра резонансного SESANS. Подбор частот для получения эхо- групп на разных частотах.

Собраны модели радиочастотных узлов для реализации спектрометра резонансного спин-эхо малоуглового рассеяния (SESANS). Проведены подробные измерения радиотехнических параметров моделей РЧ-узлов. Для создания радиочастотного поля в неадиабатических резонансных нейтронных π -флипперах использовались РЧ усилители, подключенные к внешнему генератору электрических сигналов произвольной формы. Достигнута высокая стабильность частоты и амплитуды сигнала. Испытаны две схемы усилителей:

- 1) усилитель для диапазона 0.1.. 1.5 МГц, с управлением на основе схемы IRS2011S;
- 2) усилитель 0.5-3 МГц с управлением на основе трансформатора.

Испытания проводились как в лабораторных условиях, так и непосредственно на нейтронном пучке N14 реактора ВВР-М. В ходе испытаний на исследуемых типах усилителей была достигнута вероятность спинового переворота порядка 0.98, что полностью удовлетворяет установленным требованиям для SESANS прибора. Предлагается на основе испытанных моделей создать действующие приборы с возможностью управления частотой и амплитудой РЧ- сигнала от компьютера.

5.1.4. Установка малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов «Вектор»

Рунов В.В. и Раджабов А.К.

Этап 2010:

Ввод позиционно-чувствительного детектора с окном 300x300 мм² на установке ВЕКТОР в штатный режим. Создание соответствующих программ управления установкой и программ обработки данных.

Позиционно-чувствительный ³He детектор с окном 300x300 мм² установлен на установке ВЕКТОР и запущен для работы в штатном режиме. Создана защита ПЧД от фона зала реактора, позволившая уменьшить фон более чем в 300 раз (Рис.1и 2). Установлен на планшете-координаторе реманентный анализатор поляризации пучка, Рис.3- «светлая позиция» и Рис. 4 – «темная позиция» флиппера . В настоящее время выполняются работы по калибровке установки. Контрольные измерения на некогерентном рассеивателе (H₂O) показали возможность работы установки в штатном режиме. Созданы пока минимально необходимые программы управления экспериментом и обработки данных.

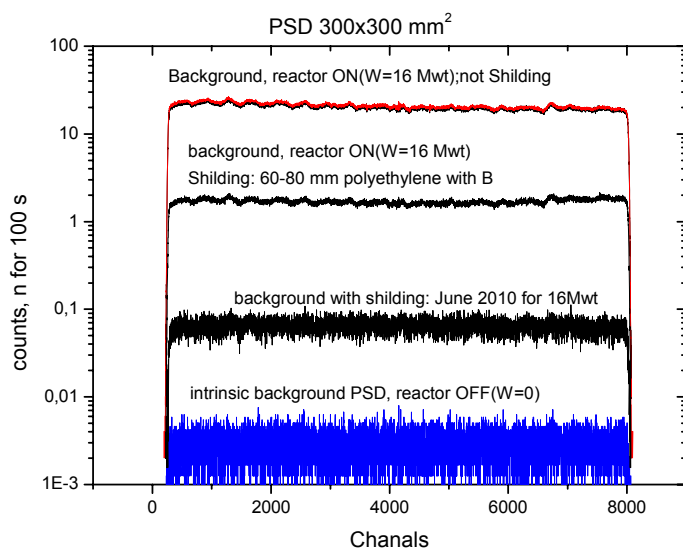


Рис. 1. Эволюция борьбы с фоном на установке «Вектор».

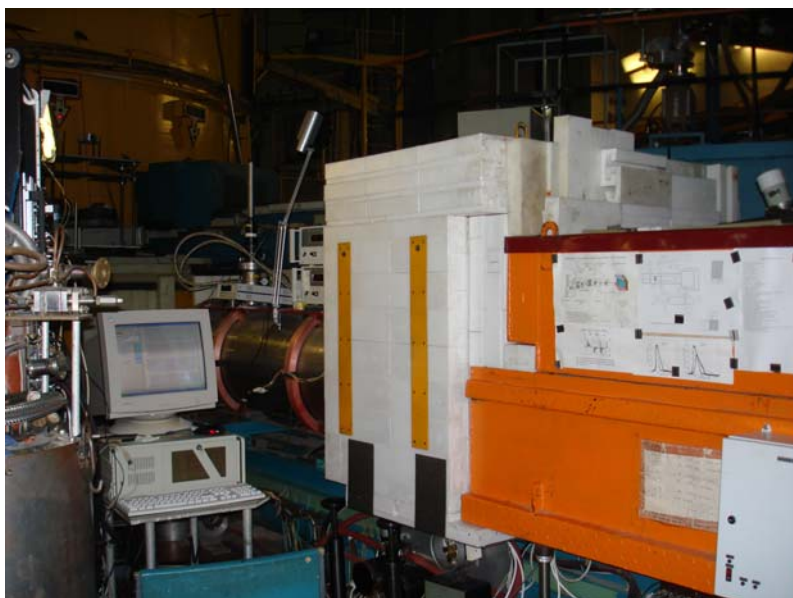


Рис. 2. Защита ПЧД детектора на установке «Вектор».

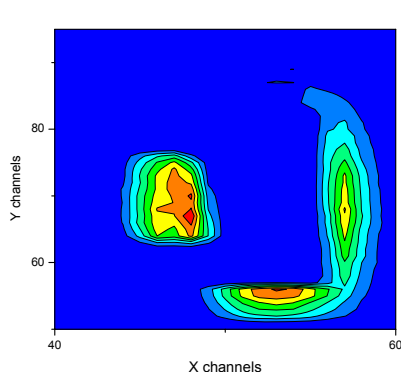


Рис. 3. «светлая позиция» флиппера

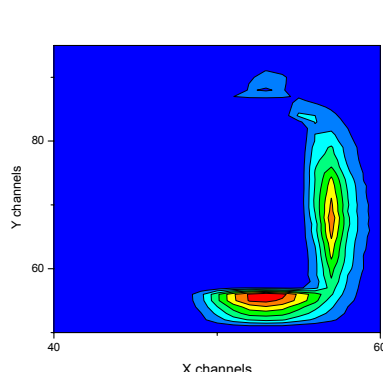


Рис.4. — «темная позиция» флиппера

5.1.5. Модернизация Малоуглового дифрактометра "Мембрана"

Дфмн Лебедев В.Т., кфмн В.М. Лебедев, М.Р.Колхидашвили, Г.П.Диденко, Д.С.Ильин
Этап 2010:

Разработка алгоритма, создание и тестирование программы управления набором, сортировки и преобразования данных для двумерного позиционно-чувствительного детектора для дифрактометра "Мембрана". Проведение пилотных экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов на калибровочных образцах наноструктур для отработки и совершенствования основных режимов работы двумерного детектора на 5-ом канале реактора ВВР-М.

Разработан многофункциональный алгоритм для управляющей программы дифрактометра, позволяющий проводить набор данных на двухкоординатном детекторе ($200 \times 200 \text{ мм}^2$) в двух основных режимах: непосредственное детектирование и запись данных в рабочие файлы без сжатия и усреднения по каналам; специально выбранное усреднение по одной из координат для получения компактной матрицы 90×90 элементов с использованием процедуры сглаживания выходного сигнала. На основе алгоритма разработана и протестирована программа, проверены режимы суммирования и усреднения на образцах, рассеивающих в области больших (легкая и тяжелая вода, плексиглас) и малых углов (пористое стекло, феррожидкости, полимерные мембраны и другие объекты). С помощью программы организованы сбор, сортировка, преобразование (сжатие), пересылка данных рассеяния.

Проведены пилотные эксперименты на образцах наноструктур (полимеризованные мицеллы поверхностно-активных вещества в воде при различных концентрациях), в ходе которых отработаны режимы работы, минимизирован фон и условия набора данных.

5.1.6. Многопортовый время-пролетный спектрометр

Дфмн Лебедев В.Т., вед.инж. И.Н.Иванова

Этап 2010:

Моделирование главных режимов работы время-пролетного спектрометра для основных классов задач квазиупругого когерентного и некогерентного рассеяния с использованием монолинии и набора спектральных линий в зонной версии и определение характеристических параметров прибора.

Выполнено моделирование основных режимов работы спектрометра с использованием монолинии (вариант классического времени пролета) и системы линий. Первый вариант является вспомогательным и используется при настройке прибора. Как показали расчеты, данный режим может быть применен при работе с интенсивно рассеивающими объектами, когда характерная переданная энергия при неупругом рассеянии в два и более раз превышает энергию нейтрона в падающем на образец пучке. В этих условиях использование зонного варианта работы нежелательно, т.к. возникают условия перекрывания по энергетическому спектру для нейтронов, принадлежащим разным (соседним) линиям. При моделировании работы прибора в режиме 12 линий было установлено, что этот режим является оптимальным при исследовании объектов в условиях, когда характерные переданные энергии во всей экспериментальной области импульсов не превосходят ширины (на полувысоте) отдельной линии, т.е. исключаются паразитные эффекты (искажение данных) на краях спектра по длинам волн.

5.1.7. Низкотемпературная гелиевая петля.

дфмн Коноплева Р.Ф., кфмн Беляев С.П., кфмн Чеканов В.А

Этап 2010:

На основе разработанной функциональной схемы и алгоритма работы измерительно-вычислительного комплекса для низкотемпературной гелиевой петли на реакторе ПИК разработать программное обеспечение измерительного блока установки.

Установлены закономерности радиационной деградации сенсоров магнитного поля для термоядерного реактора (проект ИТЭР) в процессе нейтронного облучения в низкотемпературной гелиевой петле реактора ВВР-М. Показано, что изменение чувствительности магнитных сенсоров (S) с дозой облучения (F) может быть описано суперпозицией двух экспонент: $S \sim A_1 \cdot \exp(-F/1,14E18) + A_2 \cdot \exp(-F/6,49E18)$. На основе разработанной функциональной схемы и алгоритма работы измерительно-вычислительного комплекса для низкотемпературной гелиевой петли на реакторе ПИК разработано программное обеспечение измерительного блока установки включающее в себя 16 канальный блок АЦП и программноуправляемый блок регулировки температуры

5.1.8. Исследование перемангничивания бислойной наноструктуры гранулированный ферромагнетик (CoCu)/ферромагнетик (Co) методом рефлектометрии поляризованных нейтронов.

кфмн Н.К.Плешанов

Интерес к магнитным нанослоям обусловлен возможностями их применения в электронной промышленности, и, в частности, связан с перспективами, которые обещает дать спинтроника. Определенный интерес представляет изучение магнитного взаимодействия гранулированного ферромагнетика со слоем ферромагнетика, которые находятся в непосредственном контакте друг с другом. Перемангничивание обменно связанных нанослоев гранулированный ферромагнетик (ГФ) $Co_{0.5}Cu_{0.5}$ – ферромагнетик (Ф) Co исследовалось методом рефлектометрии поляризованных нейтронов. Для исследуемых образцов Si(подложка)/CoCu(5 нм)/Co(x)/Si(3 нм); $x=10$ нм, 15

нм и 17 нм, определены основные параметры структуры (толщины и шероховатость слоев) и намагниченности насыщения слоев ГФ и Ф. Подгонка во всем диапазоне переданных импульсов q возможна только в предположении, что окислен как верхний защитный слой Si, так и кремниевая подложка.

Нейтронные данные свидетельствуют о том, что в слое CoCu образовались достаточно чистые фазы твердого раствора металлов кобальта и меди. В последнем случае намагниченность Co на 10-30% ниже намагниченности насыщения массивного кобальта. Возможно, связано с частичным проникновением кислорода в слой Co. Окисление на меньшую глубину как подложки, так и защитного слоя кремния коррелирует с меньшей величиной σ шероховатостей границ. Верхний слой кремния не всегда обеспечивает защиту от окисления; один из образцов был исключен из рассмотрения (нейтронные данные показали, что слой Co окислился на значительную глубину, его поверхность оказалась рыхлой). Характеры перемагничивания образцов с разной толщиной слоя Co существенно отличаются. Данные нейтронных экспериментов позволяют судить о физических механизмах перемагничивания в рассматриваемой системе. Так, можно предположить, что в образце существует некоторое количество иглоподобных гранул, составляющих значительный угол или даже перпендикулярных внешнему полю. Их магнитные моменты не будут направлены вдоль поля даже в наибольшем из использованных в эксперименте полей (600 Э). Это объясняет тот факт, что отражение нейтронов с переворотом спина I_{SF} остается заметным вплоть до самых больших полей, при которых продольная (параллельная полю) компонента намагниченности бислоя CoCu/Co уже практически не меняется. В предельно большом внешнем поле все магнитные моменты будут направлены вдоль поля, и отражение нейтронов с переворотом спина будет отсутствовать. Были проведены спектральные измерения для характерных точек на кривой намагничивания. Однако простые модели не дают удовлетворительной подгонки полученных зависимостей; требуется более детальная разработка модели магнитных взаимодействий в системе нанослоев ГФ/Ф.

5.1.9. Исследование и оптимизация суперполяризующих нейтронных покрытий CoFe/TiZr с нанопрослойками Ti.

кфмн Н.К.Плешанов

Нанослой с отрицательным нейтронным потенциалом на границах магнитных и немагнитных слоев в нейтронных покрытиях могут подавить отражение нейтронов с нежелательным спином на один или даже на два порядка величины [1]. Таким образом, нанотехнология открывает возможность создавать нейтронные оптические поляризаторы и анализаторы нового поколения. Были проведены [2,3] новые эксперименты с суперзеркалами CoFe/Ti/TiZr/Ti ($m=2.5$), которые подтвердили высокий потенциал метода улучшения поляризующих нейтронных покрытий.

В настоящее время производится изучение возможности реконструкции существующего напылительного оборудования под задачу оптимизации и производства суперзеркал и монохроматоров на основе CoFe/TiZr с нанопрослойками Ti («суперполяризующих» покрытий). Для этого требуется наличие 4 магнетронов (и 4 мишеней), в настоящее время в одном процессе можно задействовать не более трех 3 магнетронов.

[1] N.K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A 613 (2010) 15-22. - Superpolarizing neutron coatings: theory and first experiments.

[2] Н.К. Плешанов, А.П. Булкин, В.Г. Сыромятников, Физика твердого тела, т. 52, вып.5 (2010) 954-956. - Экспериментальное подтверждение нового метода улучшения поляризующих нейтронных покрытий.

[3] N.K. Pleshanov, A.P. Bulkin, V.G. Syromyatnikov, Nucl. Instrum. Methods A (2010) [doi:10.1016/j.nima.2010.06.006](https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.06.006). - A new method for improving polarizing neutron coatings

5.1.10. Разработка и испытание формирователя неполяризующего и поляризующего пучков, а также прототипа широкоапертурного веерного анализатора для нейтронных рефлектометров.

ктн А.Ф.Щебетов, кфмн Н.К.Плешанов, кфмн В.Г.Сыромятников

После анализа экспериментальных данных, полученных на прототипе данного устройства, для нейтронного рефлектометра Super-ADAM (ILL, Grenoble, France) создан формирователь нейтронного монохроматического пучка, фильтрующий высшие порядки отражения от кристаллического монохроматора и создающий расходящийся/коллимированный неполяризованный/поляризованный пучки (для 4 режимов работы на приборе).

Все зеркала формирователя с тыльной стороны были покрыты эмульсией с окисью гадолиния. Это позволило значительно улучшить качество пропускаемых пучков на выходе устройства путем поглощения в гадолинии паразитных нейтронов. В поляризационных модах устройства пучок имеет поляризацию $P=0.96$. Это значение существенно выше, чем аналогичное полученное для прототипа, но все-таки меньше расчетной величины в связи с тем, что средняя величина поляризующей эффективности анализатора, используемого в этих измерениях ниже, чем аналогичная величина для фильтра-поляризатора.

Был произведен в ПИЯФ и аттестован в GKSS веерный анализатор с прямыми стенками для нейтронного рефлектометра NERO в GKSS (Geesthacht). Анализатор, установленный перед ПЧД с размерами $250 \times 250 \text{ мм}^2$, состоит из 90 каналов и перекрывает площадь $90 \times 160 \text{ мм}^2$. Средняя поляризующая эффективность составила 0.98, среднее пропускание нейтронов с нужным спином 0.58 (среднее пропускание через отдельные каналы 0.70).

Для работы с широкоапертурным двухкоординатным детектором требуются компактные нейтронные анализаторы с релаксационным поляризующим суперзеркальным покрытием. Для создания прототипа такого анализатора с покрытием CoFe/TiZr были приобретены кварцевые блоки. Проведены измерения спектрального коэффициента пропускания нейтронного пучка. В связи с отсутствием финансирования работ по полировке пластин (для изготовления суперзеркал шероховатость пластин должна быть не более 1 нм) данная деятельность была приостановлена.

5.1.11. Развитие нейтронной оптики и методов исследования

А.П.Булкин, Н.К.Плешанов

Этап 2010 г.

Реализация нейтронной рефлектометрии с режимом векторного анализа поляризации. Разработка стратегии измерений с использованием различных схем полной нейтронной рефлектометрии: создание необходимого оборудования для реализации полной нейтронной рефлектометрии, рассмотрение возможностей этих схем для решения задачи прямого восстановления глубинных (послойных) профилей плотности длины когерентного рассеяния и вектора намагниченности (решение обратной задачи рассеяния).

Получение магнитных жидкостей с разной дисперсностью наночастиц, с разными диспергирующими средами, а также разработка методов получения жидких многослойных систем с магнитными и немагнитными носителями.

Проведение исследований потенциала нового метода улучшения поляризующей эффективности нейтронных покрытий и факторов, влияющих на эффективность суперполяризующих нейтронных покрытий, оптимизация их состава и технологических условий изготовления.

1) - Приобретены монокристаллы пирографита для изготовления монохроматора. Проведено тестирование полученных монокристаллов, определены их параметры (мозаичность, коэффициент отражения), которые необходимы для оптимизации расположения монокристаллов на поверхности монохроматора.

2) - Разработана проектная документация на узлы крепления датчиков "угол-код". Изготовление планируется на 2011 год.

5.1.12. Увеличение эффективности нейтронного Фурье диффрактометра высокого разрешения

А.П.Булкин, В.А.Кудряшов

Этап 2010 г

Проведение сравнительного анализа существующих нейтронных диффрактометров высокого разрешения.

Поиск возможной схемы построения детекторных систем для нейтронных диффрактометров высокого разрешения.

Поиск оптимальной схемы построения детекторной системы и расчет ее нейтронно-физических характеристик, такие как активный телесный угол, область углов рассеяния тета, величина разрешающей способности для отдельных элементов детекторной системы.

Расчет требования к необходимой точности реализации элементов детекторной системы.

Сравнительный анализ действующих нейтронных диффрактометров высокого разрешения показал, что Фурье-методика позволяет реализовать высокое разрешение при сравнительно коротких пролетных базах порядка 20 м, в то время как диффрактометры, построенные по классической схеме, требуют длину пролетных баз порядка 100 и более метров.

Проведенный математический анализ показал, что Фурье-метод наиболее целесообразен на импульсных источниках нейтронов, в то время как на стационарных источниках его эффективность в большинстве случаев низка. Найден ряд специфических особенностей Фурье-метода, объясняющих заметные искажения формы дифракционных пиков в экспериментальных спектрах. Предложен дисковый детектор обратного рассеяния с телесным углом регистрации нейтронов 1.5 стерад. Показано, что применение такого детектора может во много раз увеличить скорость проведения экспериментов.

5.1.13. Разработка и создание низкотемпературного узла образца на основе крио рефрижератора фирмы LEYBOLD VACUUM для порошкового нейтронного 48 детекторного суперпозиционного диффрактометра.

к.ф.м.н. Ульянов В.А.

На основе рефрижератора модель RGD 210 фирмы LEYBOLD VACUUM разработан и создан низкотемпературный узел образца для порошкового нейтронного 48 детекторного суперпозиционного диффрактометра, который размещен на 9-ом нейтронном канале реактора ВВР-М. В результате тестовых испытаний получена нижняя температура порядка 10К. Для получения более низкой температуры необходимо использовать другой более мощный рефрижератор, например модель SRDK - 415 фирмы Sumitomo Heavy Industries.

5.1.14. Разработка одно и двух координатного нейтронного детектора высокого пространственного разрешения (< 100 мкн) с конверторами нейтронов ^{157}Gd , ^6Li , ^{10}B на базе быстродействующей плоскопараллельной газовой камеры.

с.н.с. Ивочкин В.Г., к.ф.м.н. Ульянов В.А., с.н.с. Малышев А.Л.

Этап 2010 года.

Разработка, создание и нейтронные испытания модели одно координатного нейтронного детектора высокого пространственного разрешения с конвертором нейтронов ^{157}Gd , на базе быстродействующей плоскопараллельной газовой камеры.

За 2010 год была разработана и создан прототип однокоординатного нейтронного детектора высокого пространственного разрешения с конвертором нейтронов ^{158}Gd , на базе быстродействующей плоскопараллельной газовой камеры. Для проведения нейтронных испытаний на 9-ом канале реактора ВВР-М был создан стенд. Прототип детектора был

установлена на нейтронном пучке, спектр которого сформирован изогнутым нейтроноводом с максимумом интенсивности при длине волны порядка 1.3 Å. Падающий на детектор пучок коллимировался щелями из Cd. В результате был измерен профили прямого пучка и отраженного от нейтронного суперзеркала пучка.

Было получено, что пространственное разрешение модели одно координатного детектора составляет < 500 мкм. При этом эффективность составила ~ 60 %.

5.1.15.Трехосный нейтронный спектрометр СНК-3

ФТИ Дфмн С.Б. Вахрушев

1 - Приобретены монокристаллы пирографита для изготовления монохроматора.

Проведено тестирование полученных монокристаллов, определены их параметры (мозаичность, коэффициент отражения), которые необходимы для оптимизации расположения монокристаллов на поверхности монохроматора.

2 - Разработана проектная документация на узлы крепления датчиков "угол-код". Изготовление планируется на 2011 год.

5.1.16. Детекторы тепловых нейтронов. (ОТД ОФВЭ ПИЯФ РАН)

Д.С.Ильин, С.Н.Коваленко, А.Г.Крившич, А.В.Надточий, В.А.Соловей, М.Р. Колхидашвили
Этап 2010

Создание ПЧД – детекторов и оборудование помещения для их испытания.

1- *Разработка нового типа ПЧД на основе многопроволочной пропорциональной камеры – монитора тепловых нейтронов.* Этот прибор предназначен для мониторинга интенсивности и измерения профиля пучка тепловых нейтронов на экспериментальных установках. Разработан проект прибора, создание прототипа планируется в 2011 г. В рамках проекта разработана новая линия задержки, которая располагается в газовом объеме детектора.

2. Разработка технологий и технологического оборудования:

1) Разработка и создание системы доочистки Гелия-3. Эта система предназначена для очистки газа от примесей перед заполнением в рабочий объем детектора. Система прошла испытания, идет работа по подготовке оборудования к наполнению баллонов очищенным газом.

2) **Сборка и наладка вакуумной системы с масс-спектрометром, которая предназначена для исследования газовой выделения материалов, а также анализа состава газовой смеси.** Работа запланирована на декабрь 2010 г.

Освоение технологии изготовления кварцевых электродов для ПЧД на базе ПИЯФ РАН

А) Разработка технологии подготовки подложек для вакуумной металлизации, нанесения масок и травления. Под эти задачи на базе корпуса №66а (ПИЯФ РАН) проводится ремонт помещений.

Б) Разработка технологии вакуумной металлизации. Для этой задачи на базе корп. №66а проводится ремонт помещений.

3. Участие в совместной работе с GKSS (Германия) по транспортировке экспериментального оборудования в ПИЯФ РАН на реактор ПИК.

1) Непосредственное участие к подготовке детекторных систем и систем обеспечения к транспортировке. Работа запланирована на декабрь 2010г.

2) Подготовка корпуса №66а к приему и испытанию оборудования:

А) На к. №66а проводятся ремонтные работы кровли, реконструируется сеть электроснабжения, водоснабжения, отопление и освещение, а также проводится косметический ремонт помещений, строится чистая комната для возможного ремонта детекторов.

Б) Для оснащения стенда тестирования детекторов и проверки регистрирующей электроники детекторов будет закуплен (к. 2010г.) цифровой осциллограф LeCroy WJ 352a и рабочая станция.

Проект 5.2

Повышение безопасности и улучшение параметров высокопоточного реактора ПИК

Руководитель проекта:

проф. А.Н. Ерыкалов

Исследование выгорания топлива в реакторе ПИК в рамках программы MCNP

Программа MCNP нейтронно-физических расчетов реактора ПИК была дополнена модулем MURE, позволяющим рассчитывать накопление продуктов деления и ядер тяжелых элементов в облученном топливе реактора ПИК. С целью верификации модуля были проведены расчеты остаточного тепловыделения за счет радиоактивных ядер – продуктов деления и актинидов. Знание остаточного энерговыделения от облученного топлива важно как для оценки последствий аварии с локальной потерей теплоносителя, так и для планирования операций с отработанным топливом реактора ПИК. Результаты расчетов сравнивались с имеющимися экспериментальными данными по энерговыделению от единичного акта деления ядер урана - 235 и 238, а также плутония – 239. Проводилось также сравнение расчетного энерговыделения от ТВС водо-водяных реакторов под давлением (типа PWR), после длительной выдержки в хранилище, с экспериментальными данными. Продemonстрирована достаточная для применений точность расчетов (лучше 15%) остаточного энерговыделения от облученного ядерного топлива комплексом программ MCNP-MURE в диапазоне времен выдержки от 10 секунд до 10 лет.

По результатам работы подготовлена статья в один из Российских ядерно-физических журналов.

- Исследование реактора ОКЛО

Уточнение сценария работы реактора на основе результатов изотопного анализа образцов породы.

На основе анализа изотопного состава образца SC52 -1472 зоны 3 реактора ОКЛО были определены параметры работы реактора в этой зоне: длительность функционирования реактора, количество воды в зоне, температура топлива, удельная мощность тепловыделения за счет делений ядер. Существенное уточнение неопределенностей указанных параметров позволило значительно снизить неопределенности в значении теоретического сечения захвата нейтрона ядром ^{149}Sm в активной зоне. Сравнение рассчитанного таким образом сечения и экспериментального сечения, полученного по выгоранию ^{149}Sm в образце, позволило установить новые существенно более сильные ограничения на временные вариации постоянной тонкой структуры.

По результатам работы опубликован препринт: M.S. Onegin. Investigation of the fundamental constants stability based on the reactor Oklo burn-up analysis ArXiv:1010.6299

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)

1. Полностью подготовлен и готов к регулярной работе комплекс состоящий из 3-х рентгеновских установок рентгеноструктурного анализа. Начаты исследования, в том числе, новых железосодержащих сверхпроводников.
2. Практически завершен монтаж экспериментальных зон, включая установку коллимационных систем, в зале экспериментального комплекса ИЯИ РАН, биологические «бетонные» защитные зоны и комбинированные ловушки для гамма и нейтронных излучений и **ряд нейтронографических установок**(ГОРИЗОНТ, МНС, ГЕРКУЛЕС и КРИСТАЛЛ).
3. В ноябре проведен сеанс работы на новом импульсном источнике тепловых нейтронов ИН06. В результате на самом мощном в России ускорительном импульсном источнике нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН, осуществлен физический пуск **нейтронографических установок** ГОРИЗОНТ (ИЯИ-ПИЯФ), МНС (ФИ РАН-ИЯИ), ГЕРКУЛЕС (ИЯИ-ИФВД-РНЦ КИ) и КРИСТАЛЛ. Получены первые спектры и нейтронограммы поликристаллического абразива на основе синтетического алмаза-карбонадо и сплава с нулевой матрицей TiZr, часть из которых представлены на рисунках.

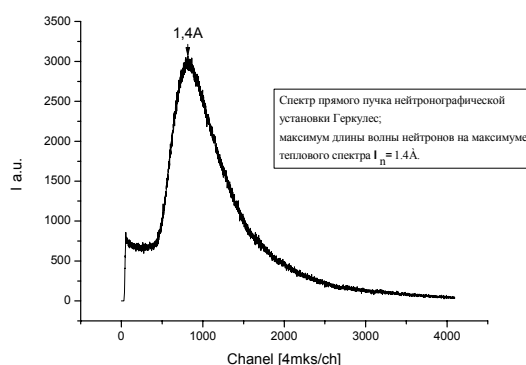


Рис.1 Спектр прямого пучка тепловых нейтронов на нейтронографической установке высокого давления ГЕРКУЛЕС (ИЯИ-ИФВД-РНЦ КИ).

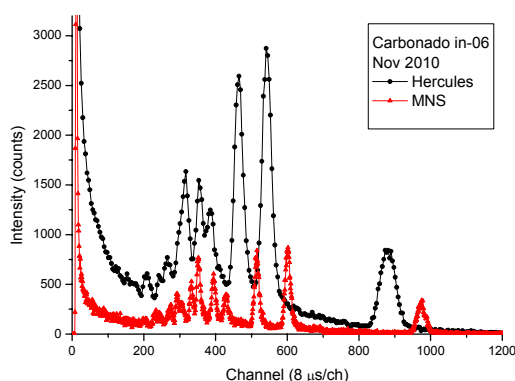


Рис2. Нейтронограммы поликристаллического абразива на основе синтетического алмаза-карбонадо, измеренные на установках ГЕРКУЛЕС (ИЯИ-ИФВД-РНЦ КИ) и МНС (ФИ РАН-ИЯИ) при углах рассеяния близких к 90 град.

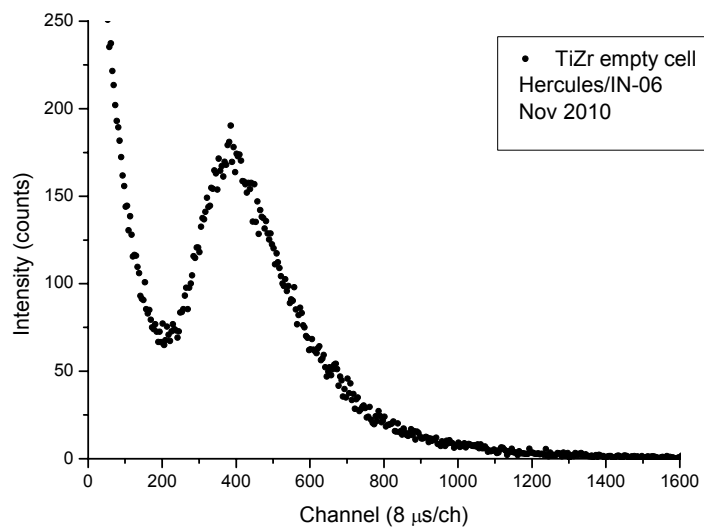


Рис.3. Нейтронограмма сплава с нулевой матрицей TiZr для элементов камер высокого давления и контейнеров образцов для нейтронографических измерений.

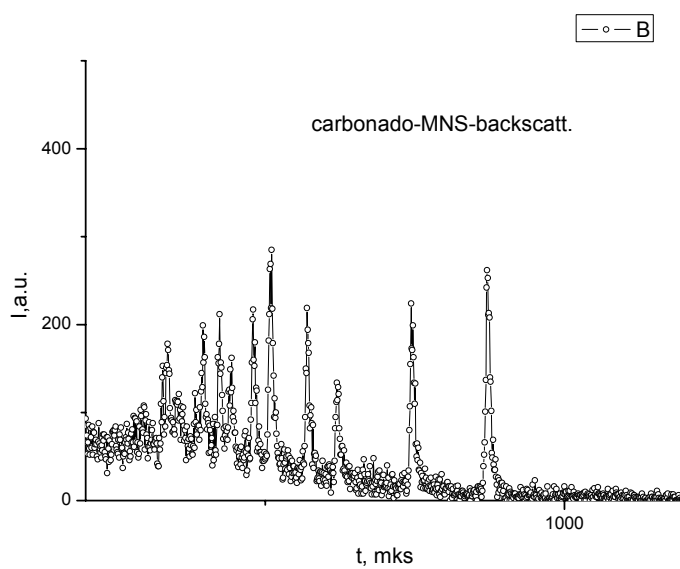


Рис.4. Нейтронограмма поликристаллического абразива на основе синтетического алмаза-карбонадо, измеренная на установке МНС (ФИ РАН-ИЯИ) с помощью детектора обратного рассеяния и фокусировкой по времени пролета

Проект 5.4.

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

Руководитель проекта:

проф. А.П. Серебров, ПИЯФ

Для реактора ВВР-М ПИЯФ разработан проект высокоинтенсивного источника ультрахолодных нейтронов (УХН) для научных исследований в области фундаментальной физики и изучения наноструктур. В источнике будет использоваться сверхтекучий гелий, который позволит достичь плотности ультрахолодных нейтронов 10^4 см^{-3} , что примерно в 1000 раз превышает плотность существующих в мире источников ультрахолодных нейтронов.

Источник ультрахолодных нейтронов на реакторе ВВР-М будет являться новым поколением в пучковых технологиях для атомной техники вследствие использования впервые внутри реактора сверхтекучего гелия для получения пучка ультрахолодных нейтронов очень высокой интенсивности.

Такой источник создаст уникальные возможности изучения фундаментальных задач таких как поиск электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона с целью решения проблемы *CP*-нарушения, прецизионные исследования β -распада нейтрона с целью проверки Стандартной Модели элементарных частиц и взаимодействий. Обе задачи имеют принципиальное значение для физики элементарных частиц и космологии. Они ориентированы на то, чтобы ответить на вопросы о возможности существования новых суперчастиц в процессах, определивших возникновение Вселенной. Обладая самым интенсивным источником ультрахолодных нейтронов, реактор ВВР-М станет международным центром фундаментальных исследований с ультрахолодными нейтронами.

В настоящее время в ПИЯФ:

1. разработан проект источника УХН на основе сверхтекучего гелия,
2. проведены измерения в тепловой колонне реактора, показывающие реальную возможность её модернизации [],
3. проведены детальные расчёты плотности УХН на выходе нейтронотводов[],
4. установлен низкотемпературный гелиевый рефрижератор мощностью 3 кВт при температуре 20 К,
5. монтируется гелиевый ожижитель производительностью 50 л/час,
6. закуплено и монтируется оборудование для откачки паров гелия,
7. разработан проект демонтажа тепловой колонны,
8. разработан проект хранилища радиоактивных элементов тепловой колонны,
9. ведётся подготовка экспериментального оборудования для проведения научных исследований.

Создание высокоинтенсивного источника ультрахолодных нейтронов позволит проводить эксперименты с нейтронами в широком диапазоне длин волн. С этой целью на реакторе ВВР-М дополнительно к залу для работы с тепловыми нейтронами будут созданы залы для работы с ультрахолодными нейтронами, с очень холодными нейтронами и с холодными нейтронами.

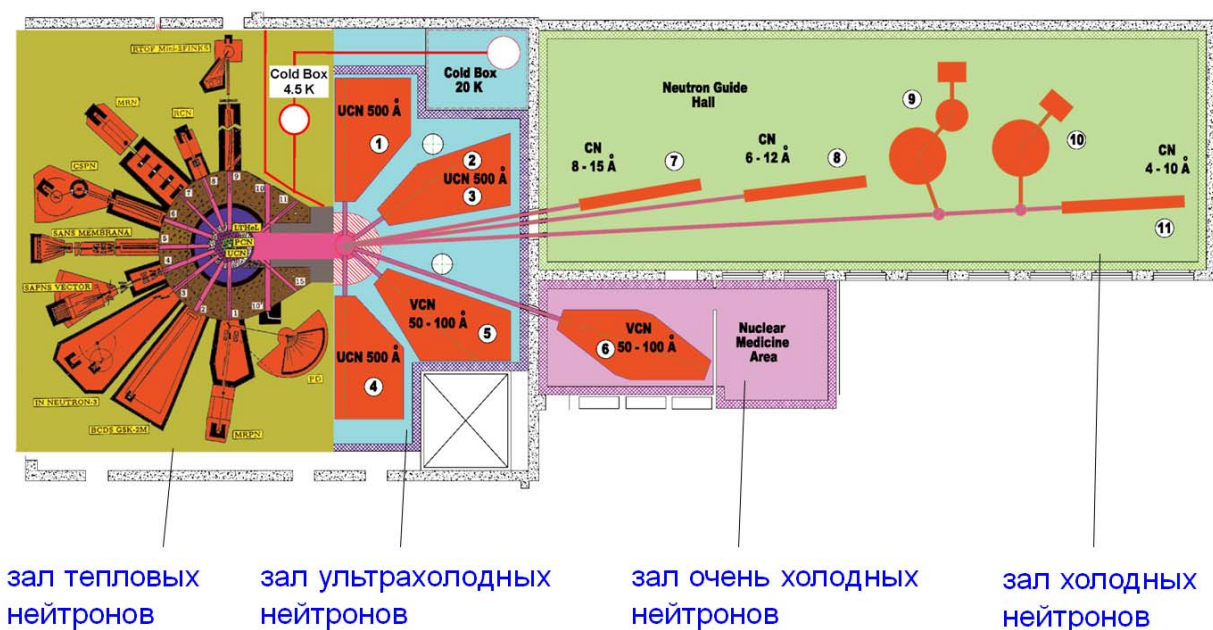


Рис 6. Экспериментальные залы реактора ВВР-М. Схема размещения источника холодных и ультрахолодных нейтронов, комплекса экспериментальных установок в главном зале реактора и комплекса экспериментальных установок в нейтроноводных залах: 1,2,3,4 – установки для фундаментальных исследований на ультрахолодных нейтронах. 5 - ОХН дифрактометр, 6 - ОХН - спектрометр, 7 – установки для фундаментальных исследований с холодными нейтронами.

Координатор Программы
профессор Федоров В.В.