Томск РНИК 2025

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2025), Тезисы докладов, г. Томск, 29 сентября — 3 октября 2025 г. г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2025, 233 с. (РНИКС-2025) –Текст: электронный.

В сборнике тезисов докладов включены материалы Конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2025). Место проведения – г. Томск, ТПУ. Время проведения 29 сентября — 3 октября 2025 г.

Ответственные за выпуск – *М. С. Сыртанов, А. Ф. Губкин*
Технический редактор – *П. А. Заяц*

Организаторы:

Спонсоры:

Оглавление

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНФЕРЕНЦИИ

М. В. КОВАЛЬЧУК (*НИЦ «Курчатовский институт»*)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Л. Г. СУХИХ (*ТПУ*)	*председатель*
А. С. ГОГОЛЕВ (*ТПУ*)	*заместитель председателя*
А. М. ЛИДЕР (*ТПУ*)	*заместитель председателя*
О. Ю. ДОЛМАТОВ (*ТПУ*)	*заместитель председателя*
Н. А. ГРИГОРЬЕВА (*ИФМ УрО РАН*)	*председатель публикационного комитета*

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

А. Е. БЛАГОВ (*НИЦ «Курчатовский институт»*)	*сопредседатель*
Н. В. МУШНИКОВ (*ИФМ УрО РАН*)	*сопредседатель*
А. Ф. ГУБКИН (*ИФМ УрО РАН*)	*заместитель председателя*
Е. А. КРАВЦОВ (*ИФМ УрО РАН*)	*заместитель председателя*

М. В. АВДЕЕВ (*ОИЯИ*)
В. Л. АКСЕНОВ (*ОИЯИ*)
П. А. АЛЕКСЕЕВ (*НИЦ «Курчатовский институт»*)
А. М. БАЛАГУРОВ (*ОИЯИ*)
А. В. БЕЛУШКИН (*НИЦ «Курчатовский институт», ОИЯИ*)
В. И. БОДНАРЧУК (*ОИЯИ*)
В. В. ВОРОНИН (*НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ*)
С. В. ГРИГОРЬЕВ (*НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ*)
Д. П. КОЗЛЕНКО (*ОИЯИ*)
Т. В. КУЛЕВОЙ (*НИЦ «Курчатовский институт» — ККТЭФ*)
А. И. КУРБАКОВ (*НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ*)
А. В. МИРМЕЛЬШТЕЙН (*РФЯЦ–ВНИИТФ*)
А. Н. ПИРОГОВ (*ИФМ УрО РАН*)
Н. К. ПЛЕШАНОВ (*НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ*)
С. В. РОГОЖКИН (*НИЦ «Курчатовский институт» — ККТЭФ*)
Р. А. САДЫКОВ (*ИЯИ РАН*)
В. Т. ЭМ (*НИЦ «Курчатовский институт»*)

ЛОКАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

М. С. СЫРТАНОВ (*ТПУ*)
Т. А. ПАК (*ТПУ*)
М. А. МОРОЗОВА (*ТПУ*)

ТЕМАТИКИ

Пленарные доклады
29.09 Концертный зал, 30.09 Концертный зал, 1.10 Концертный зал, 2.10 Концертный зал, 3.10 Концертный зал

Секция 1. Нейтронные исследования в физике магнитных явлений
29.09 Концертный зал, 30.09 Концертный зал

Секция 2.
Приборная база нейтронографии.
Инструменты *(29.09 Танцевальный зал)*
Аппаратно-методическая база *(30.09 Танцевальный зал)*
Источники нейтронов *(1.10 Танцевальный зал)*
Элементы нейтронной техники *(1.10 Зал Танцевальный зал)*
Программное обеспечение и обработка данных *(2.10 Танцевальный зал)*

Секция 3. Нейтронные исследования объектов культурного наследия
29.09 Зал торжеств

Секция 4. Поверхности, тонкие пленки и многослойные структуры
29.09 Зал торжеств

Секция 5. Специальная секция: «Синхротронное излучение и лазеры на свободных электронах»
30.09 Зал торжеств, 2.10 Зал торжеств

Секция 6. Центры пучковых исследований: текущий статус и перспективы
30.09 Концертный зал

Секция 7. Материаловедение и химия твердого тела
1.10 Концертный зал

Секция 8. Некристаллические материалы, полимеры, жидкости и биологические системы
1.10 Зал торжеств

Секция 9. Прикладные и индустриальные исследования с нейтронами
2.10 Концертный зал

Секция 10. Фундаментальные исследования с нейтронами
2.10 Танцевальный зал

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

РЕЗОНАНСНАЯ НЕЙТРОННАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ

В. Л. Аксенов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
E-mail: ksenov@nf.jinr.ru

Во всех стандартных курсах квантовой механики имеется раздел, посвященный изучению свойств уравнения Шредингера на примере систем в одном измерении, приводятся различные схемы вычисления коэффициентов отражения и прохождения через потенциальные барьеры. Решение этих задач составляет основу рефлектометрии.

В конечной прямоугольной потенциальной яме при определенных условиях возникает явление резонанса, когда в некотором интервале энергий интенсивность волны сильно возрастает. Этот эффект имеет чисто волновую природу – в резонаторе происходит конструктивная интерференция между падающей и отраженной волнами. Если рассматривать пространственное распределение волновой функции, то такое усиление волнового поля проявляется в виде усиленных стоячих волн. Наибольшее усиление наблюдается в режиме полного отражения.

В обычной рефлектометрии измеряют коэффициенты отражения и прохождения. Чтобы измерить волновую функцию, надо поместить зонд, например, тонкий слой поглощающего нейтроны вещества, в область пучности стоячей волны. Тогда нейтронный пучок будет ослаблен, а выход продуктов ядерной реакции после захвата нейтронов увеличится (Рис. 1).

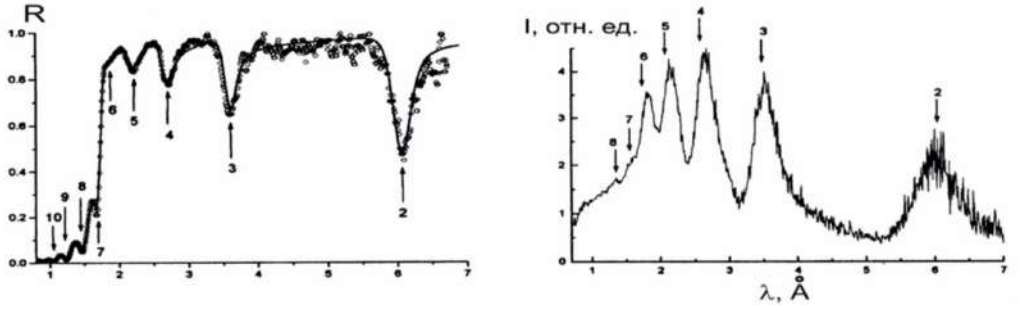

Рис. 1. Слева: зависимость от длины волны нейтронов λ коэффициента отражения зеркально отраженных нейтронов $R(\lambda)$, точки – экспериментальные данные, сплошная кривая – расчет. Справа: экспериментальная зависимость от длины волны нейтронов λ интенсивности счета альфа частиц и тритонов $I(\lambda)$, образованных захватом нейтронов ядрами изотопа ^{6}Li (σ = 945 барн).

Использование резонансного усиления нейтронного волнового поля и составляет основу резонансной нейтронной рефлектометрии, которая может служить хорошим дополнением к стандартной в случае слабо возмущенных структур.

Резонансная нейтронная рефлектометрия (РНР) появилась в середине 1990-х годов вслед за рентгеновской. В пионерских работах [1] изучалась полимерная пленка, в которую вносили в качестве зонда пленку гадолиния. В резонаторе усиливался выход гамма-квантов. Систематическое развитие метод получил в Дубне, где мы расширили спектр вторичного излучения на заряженные частицы и продукты ядерного деления. На рис. 1 показаны типичные спектры РНР при регистрации вторичного излучения из зонда в виде заряженных частиц [2].

Принципиально новым шагом стало распространение метода в область магнитных систем и использование поляризованных нейтронов, когда в резонатор в пучность стоячей волны помещается магнитно-неколлинеарный слой, чувствительный к поляризации нейтронов [3]. В эксперименте регистрируется усиление деполяризации падающего поляризованного пучка. На рис. 2. показан вид спектров РНР в задаче об изучении влияния сверхпроводимости на магнитное состояние квази-двумерной наноструктуры сверхпроводник/ферромагнетик при регистрации поляризованных нейтронов с переворотом спина.

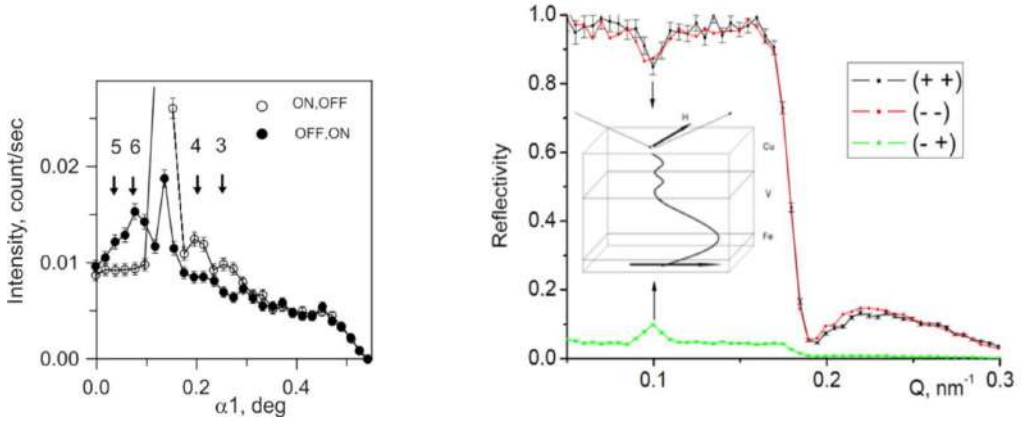

Рис. 2. Слева: Интенсивность отраженного пучка нейтронов с переворотом спина (светлые символы для перехода «−+», темные символы для перехода «+−») в зависимости от конечного угла скольжения. Исследована резонансная структура. Индексами n = 3, 4, 5, 6 указаны максимумы интенсивности, которые соответствуют резонансам по длине волны внутри резонатора. Справа: Коэффициент отражения без переворота спина R^{++} и R^{--} и с переворотом спина для тонкой пленки Cu/V/Fe.

Теоретические основы РНР даны в работе [4]. В настоящее время на реакторе ИБР-2М создан измерительный комплекс РНР с использованием всех видов вторичного излучения и поляризованных нейтронов [5].

В докладе рассматриваются принципы полной (трехмерной) рефлектометрии и приближения теории, позволяющие использовать решения одномерных задач квантовой механики; общая схема описания резонансов при рассеянии на одномерных потенциалах; зондирование волновой функции по резонансному усилению вторичного излучения и по отражению поляризованных нейтронов в заданном спиновом состоянии; обсуждаются актуальные методические и физические задачи.

1. H. Zhang, P. Gallaghr, S. Satija et al. PRL **79**, 19, 3044 (1994).
2. V. Aksenov, Yu. Nikitenko, F. Radu, et al., Physica B **276–278**, 946 (2000).
3. V. Aksenov, Yu. Nikitenko. Physica B **267–268**, 313 (1999).
4. В. Л. Аксенов, В. К. Игнатович, Ю. В. Никитенко, Кристаллография **51**, 5, 23 (2006).
5. В. Л. Аксенов, В. В. Жакетов, Ю. В. Никитенко, ЭЧАЯ **54**, 4, 898 (2023).

.

НОВЫЕ ЭЛЕКТРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Е. В. Антипов[1,2]

[1]Химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[2]Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: evgeny.antipov@gmail.com

Бурный прогресс в массовом производстве литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) для крупных электрохимических источников энергии (стационарных накопителей в энергетике, в электромобилях) диктует необходимость интенсификации исследований в области натрий-ионных аккумуляторов (НИА), которые наряду с очевидным недостатком (меньшей величиной удельной энергии) в сравнении с ЛИА обладают целым рядом важных преимуществ, включая более низкую стоимость, большую удельную мощность, возможность использования алюминиевых токосъемников на обоих электродах и др.

Удельные энергетические характеристики ЛИА и НИА, в основном, определяются свойствами используемых электродных материалов. Исследования этих материалов различными дифракционными (рентгеновскими и нейтронными) и спектроскопическими методами в режиме operando позволяет получать важную информацию о механизме интеркаляционных процессов, фазовых превращениях, изменении степени окисления переходных металлов и др..

В докладе будут представлены: современное состояние и тенденции развития производства литий-ионных аккумуляторов в мире и в России, перспективы натрий-ионных аккумуляторов, результаты наших исследований новых электродных материалов для аккумуляторов с помощью operando дифракционных и спектроскопических методов с акцентом на взаимосвязи между химическим составом, условиями синтеза, кристаллической структурой и электрохимическими свойствами материалов.

Работа выполнена в рамках государственного задания МГУ № АААА-А21-121011590088-4.

.

СТАНОВЛЕНИЕ ФУРЬЕ-ДИФРАКТОМЕТРИИ, ИССЛЕДОВАНИЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ЭКСПЕРИМЕНТОВ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ НА РЕАКТОРЕ ИБР-2

А. М. Балагуров

Лаборатория нейтронной физики имени И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна, Россия
E-mail: bala@nf.jinr.ru

В развитии комплекса спектрометров на реакторе ИБР-2 и развитии методов проведения экспериментов на них было несколько ключевых моментов, определивших на годы вперед тематику научных исследований. В методе дифракции нейтронов такими моментами были:
— создание первого в мире фурье-дифрактометра высокого разрешения на импульсном источнике нейтронов и развитие метода фурье-дифрактометрии,
— развитие методов измерения нейтронограмм от микрообразцов в камерах высокого давления с наковальнями,
— развитие методов анализа необратимых переходных процессов в конденсированных средах в реальном времени.

Определяющую роль в реализации на ИБР-2 перечисленных методов, продолжающих и в настоящее время успешно развиваться, сыграли В. А. Трунов (ПИЯФ, Гатчина), В. А. Соменков (НИЦ КИ, Москва) и Г. М. Миронова (ЛНФ ОИЯИ), соответственно. В докладе будут представлены их краткие научные биографии и приведены примеры научных достижений, ставших возможными благодаря созданным на ИБР-2 дифрактометрам и развитым экспериментальным методам.

.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ЦЕНТР НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ НА БАЗЕ РЕАКТОРА ПИК

В. В. Воронин

НИЦ«Курчатовский институт» — ПИЯФ, Гатчина, Россия
E-mail: Voronin_VV@pnpi.nrcki.ru

Будет представлен текущий статус и планы по созданию Международного центра нейтронных исследований на основе исследовательского реактора ПИК (НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина), который станет самым мощным источником нейтронов для работы на выведенных пучках.

Реактор ПИК (пучковый исследовательский корпусной) представляет собой источник нейтронов с рекордными параметрами, призванный стать флагманом нейтронных исследований в России. Он представляет собой водо-водяной корпусной реактор, где легкая вода (H_2O) используется как теплоноситель, а тяжелая вода (D_2O) как отражатель и замедлитель нейтронов. Плотность потока тепловых нейтронов в отражателе до $1{,}2 \cdot 10^{15}$н/см^{2}с.

Для вывода нейтронного излучения из отражателя реактора ПИК, а также облучения образцов, реактор ПИК снабжен значительным числом экспериментальных каналов.

В настоящее время реактор ПИК выведен на энергетический режим работы, в марте 2022г. достигнута тепловая мощность 7 МВт. Введены в эксплуатацию первые 5 станций нейтронного рассеяния, проведены первые эксперименты.

С 2020 года реализуется полномасштабная программа создания приборного парка для проведения экспериментальных исследований на выведенных пучках нейтронов. В конце 2024 года изготовлены и поставлены 11 станций первой очереди. Окончание программы и ввод в эксплуатацию 20 станций различного назначения, а также источников нейтронов различного спектрального состава ожидается в ближайшие два года.

.

LIPID MEMBRANE DESTABILIZATION INDUCED BY AMYLOID-BETA PEPTIDE IN THE SYSTEMS MIMICKING PRECLINICAL ALZHEIMER'S DISEASE

S. A. Kurakin[1], *O. I. Ivankov*[1], *T. N. Murugova*[1], *D. R. Badreeva*[1], *E. B. Dushanov*[1,2], *E. V. Ermakova*[1], *A. I. Kuklin*[1,3], *and N. Kučerka*[1,4]*

[1]Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
[2]Department of Biophysics, Dubna State University, Dubna, Russia
[3]Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia
[4]Faculty of Pharmacy, Comenius University Bratislava, Bratislava, Slovakia
E-mail: kucerka@nf.jinr.ru

The amyloid-beta (Aβ) peptide is considered a key factor in Alzheimer's disease (AD) ever since the discovery of the disease. The understanding of its damaging influence has however shifted recently from large fibrils observed in the inter-cellular environment to the small oligomers interacting with a cell membrane.

By means of small angle neutron scattering (SANS), we have observed for the first time a spontaneous reformation of extruded unilamellar vesicles (EULVs) to discoidal bicelle-like structures (BLSs) and small unilamellar vesicles (SULVs). These changes in the membrane self-organization happen during the thermodynamic phase transitions of lipids and only in the presence of Aβ [1]. The complementary experimental data and molecular dynamics (MD) simulations results revealed further the structural arrangements of the observed morphologies. We show by using solid-state ^{31}P nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy that lipids are found located not only in the flat bilayered part of BLS but also around its perimeter, which is corroborated by the results of coarse-grained (CG) MD simulations. Peptides, on the other hand, appear to mix randomly with lipids in ULVs, while colocalizing with the lipids at the perimeter of BLS and aiding thus a formation of stable bicelle-like object consisting of a single type of lipids and Aβ peptides [2]. Importantly, despite Aβ peptides affecting the elasto-mechanical properties of membrane itself, the observed morphological transformations caused by their disruptive effect were not prevented by the additional presence of cholesterol or melatonin [3], nor by the presence of charged lipids in the membrane [4] or calcium ions in solution [5]. The scattering methods used in these studies provided instrumental information on a level of supramolecular assemblies, while spectrometry allowed obtaining information on the molecular level. Finally, molecular dynamics simulations provided details unachievable by experimental approaches, though the validation role of the latter cannot be undermined. Altogether, the recent advances in research results prove these complementary approaches the most appropriate for tackling the complex issues of biomembrane interactions [6].

1. Ivankov: Amyloid-beta peptide (25-35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes. Sci Rep 11 (2021) DOI: 10.1038/s41598-021-01347-7.
2. Kurakin: Arrangement of lipid vesicles and bicelle-like structures formed in the presence of Aβ(25-35) peptide. BBA-Biomembranes (2024) DOI: 10.1016/j.bbamem.2023.184237.
3. Ivankov: Cholesterol and melatonin regulated membrane fluidity does not affect membrane's breakage triggered by amyloid-beta peptide. Biophys Chem (2023) DOI: 10.1016/j.bpc.2023.107023.
4. Ivankov: Anionic lipids modulate little the reorganization effect of amyloid-beta peptide on membranes. General Physiology and Biophysics (2023) DOI: 10.4149/gpb_2022052.
5. Kurakin: Calcium ions do not influence the Aβ(25-35) triggered morphological changes of lipid membranes. Biophys Chem (2024) DOI: 10.1016/j.bpc.2024.107292.
6. Kurakin: Lipid membrane destabilization induced by amyloid-beta peptide in the systems mimicking preclinical Alzheimer's disease. Natural Science Review (2025) DOI: 10.54546/NaturalSciRev.100202.

.

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ: НАУЧНЫЕ ЗАДАЧИ И НОВЫЕ ТРЕНДЫ В СОЗДАНИИ ПРИБОРНОЙ БАЗЫ

С. Е. Никитин

Институт физики имени Л. В. Киренского, Красноярск, Россия
E-mail: nikitinse@iph.krasn.ruh

Метод неупругого нейтронного рассеяния (INS) остается уникальным инструментом для изучения динамики магнитной и кристаллической структуры, особенно в квантовых сильно-коррелированных системах, таких как спиновые жидкости, топологические магнетики и тяжёлофермионные системы.

Современные исследования ставят сложные задачи, зачастую требующие измерения слабых диффузных сигналов в большом объеме обратного пространства, работы с маленькими образцами ($\leq$0.1 г) и высокого энергетического разрешения ($\leq$0.1 meV). В ответ на эти вызовы разрабатываются новые спектрометры с мультидетекторными системами, позволяющие значительно увеличить эффективность измерений и, таким образом, сократить время эксперимента.

В этом докладе я рассмотрю несколько примеров современных спектрометров использующих призматическую концепцию, включая как концепты-дизайны, так и инструменты, уже внедрённые в пользовательские программы [1]. На примере исследований магнитной динамики во фрустрированных треугольных магнетиках со структурой делафоссита [2, 3] и альтермагнетике MnF_2 [4] мы продемонстрируем, как современные INS-спектрометры расширяют возможности изучения экзотических квантовых состояний вещества. Кроме того, будет проведено сравнительное обсуждение преимуществ и ограничений метода INS в сопоставлении с методом неупругого рассеяния рентгеновских лучей — быстро развивающейся синхротронной методики, также применяемой для анализа магнитной и структурной динамики.

1. F. Grotil et al., Rev. Sci. Instr. **87**, 035109 (2016).
2. T. Xie et al., npj Quantum Matter., **8**, 48 (2023).
3. T. Xie et al., Phys. Rev. Lett. **133**, 096703 (2024).
4. V. C. Morano et a., Phys. Rev. Lett. **134**, 226702 (2025).

.

АЛЬТЕРМАГНЕТИЗМ, КИТАЕВСКАЯ СПИНОВАЯ ЖИДКОСТЬ И ДРУГИЕ НОВЫЕ ЯВЛЕНИЯ В МАГНЕТИЗМЕ

С. В. Стрельцов

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

В последние годы были открыты принципиально новые типы квантовых состояний, анализ которых дополняет классические представления о ферро- и антиферромагнетиках [1]. В данном докладе будут обсуждаться альтермагнетики — материалы, сочетающей черты ферро- и антиферромагнетизма, а также их уникальные транспортные свойства [2]. Отдельное внимание уделено китаевской спиновой жидкости — экзотическому квантовому состоянию, возникающему в фрустрированных магнетиках с сильной спин-орбитальной связью [1,3]. Рассматриваются экспериментальные проявления этих явлений, включая спектроскопические и нейтронографические данные, а также результаты теоретических расчетов. Наконец, планируется обсуждение киральных систем с сильной взаимосвязью между магнонной и фононной подсистемами.

1. С.В. Стрельцов и Д.И. Хомский, Успехи Физических Наук **187**, 1205 (2017).
2. S.V. Streltsov, S.-W. Cheong unpublished.
3. P.A. Maksimov, A.V. Ushakov, A.F. Gubkin, G.J. Redhammer, S.M. Winter, A.I. Kolesnikov, A.M. dos Santos, Z. Gai, M.A. McGuire, A. Podlesnyak, S.V. Streltsov PNAS **121**, e2409154121 (2024).

.

Секция 1.

Нейтронные исследования в физике магнитных явлений

Приглашенный доклад

НЕЙТРОНОГРАФИЯ ХИРАЛЬНЫХ КВАЗИ-2D МАГНЕТИКОВ НА ПРИМЕРЕ $MnPbTeO_6$ И $MnSnTeO_6$, ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ ОБЩНОСТЬ И РАЗЛИЧИЕ

А. И. Курбаков

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

*E-mail: kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru

Исследовались проявления необычного магнетизма в материалах, демонстрирующих явления сильных фрустраций обменных взаимодействий и 2D магнетизм. Изучаемые соединения принадлежат к семейству материалов, которые проявляют нелинейные физические свойства и поэтому являются пьезоэлектриками и сегнетоэлектриками, фотокатализаторами, элементами нелинейно-оптических устройств с генерацией второй гармоники и т.д. Также они интересны как новые многообещающие мультиферроики из-за сочетания хиральности кристаллического строения с дальним магнитным упорядочением. Представлено комплексное исследование структурных, магнитных, диэлектрических, термодинамических и резонансных свойств двух родственных соединений $MnPbTeO_6$ и $MnSnTeO_6$, являющихся квазидвумерными слоистыми магнетиками на основе сотовых слоев $[MnTeO_6]^{2-}$ с тригональным расположением магнитных Mn ионов. Магнитные слои разделены родственными *p*-элементами Pb и Sn, в кислородном октаэдрическом окружении, с ns^2np^2 электронами на внешнем энергетическом уровне. При этом их валентности разные, что приводит к разной валентности Mn и формуле исследуемых соединений $Mn^{4+}Pb^{2+}Te^{6+}O_6$ и $Mn^{2+}Sn^{4+}Te^{6+}O_6$. Отметим, что если у первого состава разделительный слой состоит только из ионов Pb, то у второго из ионов Sn и Te.

Нейтронной порошковой дифракцией (NPD) установлено, что оба состава кристаллизуются в хиральные тригональные пространственные группы:
$Mn^{4+}Pb^{2+}Te^{6+}O_6$ в P312, №149 ($a = b = 5.1010$ Å, $c = 5.3951$ Å),
$Mn^{2+}Sn^{4+}Te^{6+}O_6$ в P321, №150, ($a = b = 8.7823$ Å, $c = 4.7935$ Å) [1,2] (рис.1).

Выполнены измерения температурных зависимостей магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости, полевых зависимостей намагниченности и линии поглощения ЭПР, диэлектрической проницаемости.

Магнитная структура $MnPbTeO_6$ при $T = 1.5$ K определялась по низкотемпературной NPD на холодных нейтронах на дифрактометре DMC, SINQ, PSI (Швейцария), $\lambda = 1.886$ Å. Она оказалась довольно сложной и описывается магнитным волновым вектором **k** = (1/3 1/3 0.4077). Симметрийный анализ магнитной структуры проводился как методом неприводимых представлений, так и подходом с использованием групп магнитной суперсимметрии. Полученная магнитная структура имеет форму спирали, распространяющейся вдоль направления *c*, а магнитные моменты полностью расположены в плоскостях и образуют треугольную конфигурацию со 120°-структурой. Магнитные моменты в слое естественным образом вращаются друг относительно друга при переходе от слоя к слою [3]. Магнитная структура $MnSnTeO_6$ при $T = 1.5$ K определялась по низкотемпературной NPD на дифрактометре SPODI, MLZ (Германия), $\lambda = 1.548$ Å. Она хорошо описывается магнитным волновым вектором **k** = (0 0 0.183). Таким образом, обе магнитные структуры соизмеримы в сотовой плоскости *ab*, с несоизмеримостью в направлении укладки слоев *c*. С помощью первопринципных и модельных

расчётов показано, что магнитное основное состояние $MnSnTeO_6$ имеет сложную природу, формируется в результате фрустраций и описывается набором циклоид. Продемонстрировано, что доминирующим для ионов Mn является обменное взаимодействие между четвёртыми соседями, причём лишь половиной из них. Механизм этого взаимодействия – сверх-сверхобменный, через перекрывающиеся *p*-орбитали двух кислородов, с разными ионами Mn. Связи ведут себя по-разному в двух типах доменов (хиральность) из-за различия супер-суперобменных взаимодействий. В итоге получено прекрасное согласие результата моделирования температурной зависимости магнитной восприимчивости методом Монте-Карло для классической модели Гейзенберга с S = 5/2 и использованием рассчитанных обменных взаимодействий, с экспериментальным поведением восприимчивости, а предсказанный набор циклоид в основном состоянии полностью подтвержден моделью спиновой структуры, построенной по результатам обработки NPD данных [1].

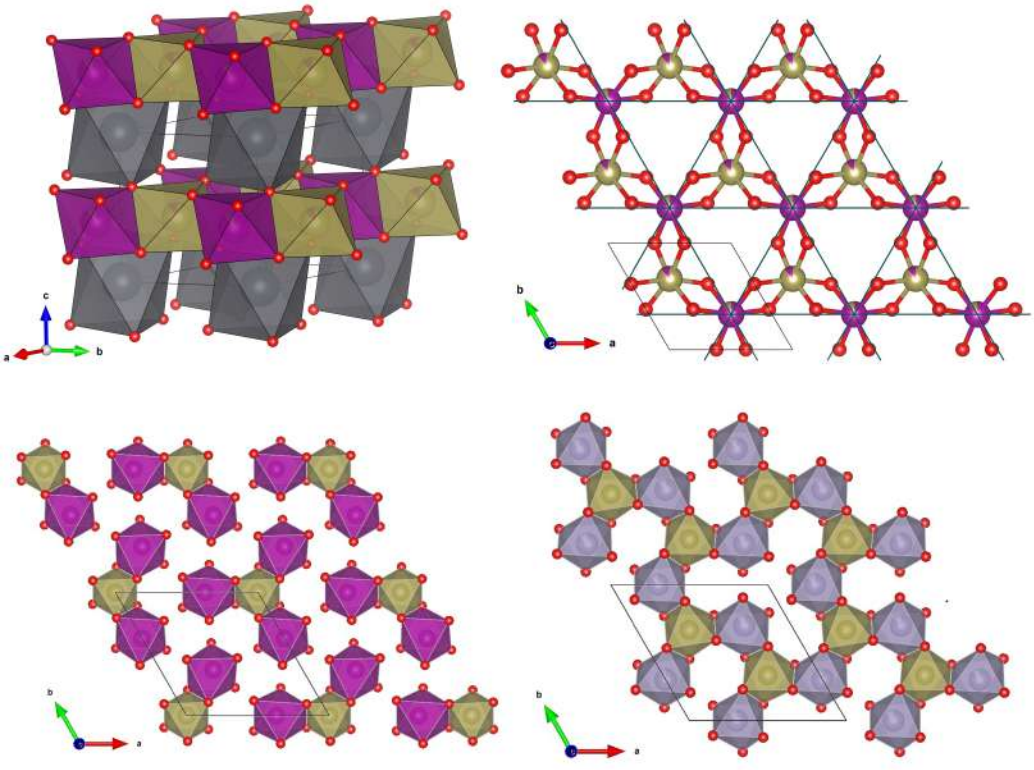

Рис. 1. 3D структура $MnPbTeO_6$, P312, №149 с геометрией магнитного слоя (вверху) и два слоя $MnSnTeO_6$, P321, №150 (внизу) из анализа данных NPD.

Для понимания магнитных свойств $PbMnTeO_6$ также предлагается модель Гейзенберга с треугольной решеткой S = 3/2 в качестве эффективной основы. Т.к. наблюдаемое основное состояние представляет собой неколлинеарную 120° спиновую структуру, то ожидается, что взаимодействие ближайших соседей (J_1) будет доминирующим. Мы оцениваем эффективное значение J_1 путем подгонки экспериментальных темпера-

турных зависимостей магнитной восприимчивости χ, и магнитной части удельной теплоемкости C_m, а также кривой намагниченности M к спиновой модели. Зависимости $\chi(T)$, рассчитанная методом HTE, $M(B)$ и $C_m(T)$, рассчитанные методом DMRG сравниваются с экспериментальными. Наилучшие результаты дает $J_1 = 12 \pm 2$K. Используя это значение J_1, температура Вейсса оценивается как $\theta = -S(S+1)J_1 = -32(32+1)J_1 = -45 \pm 7.5$ K. Это согласуется с экспериментальным значением $\theta = -38$ K, полученным из подгонки $\chi(T)$ в парамагнитной области. Показано, что наблюдаемое спиральное упорядочение вдоль направления укладки слоев может быть обусловлено фрустрированными межслойными связями или наличием межслоевого взаимодействия Дзялошинского-Мория [3].

Сочетание хиральности с дальним магнитным порядком у $MnSnTeO_6$ ($T_N \approx 10$ K) и $MnPbTeO_6$ ($T_N \approx 20$ K) делает их перспективными материалами с возможными уникальными мультиферроическими свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-12-00217).

1. E.A. Zvereva, et al. Inorganic Chemistry **59**, 1532-1546 (2020) +Supporting Information, 6 p.
2. M.D. Kuchugura, A.I. Kurbakov, E.A. Zvereva, et al. Dalton Trans. **48**, 17070-17077 (2019).
3. A.I. Kurbakov, A.N. Korshunov, S.Nishimoto. Phys. Rev. B. **111** 0144418 (2025).

Приглашенный доклад

НЕЙТРОННЫЙ МАГНИТНЫЙ ФОРМФАКТОР В ИССЛЕДОВАНИЯХ f-ЭЛЕКТРОННОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ

П. С. Савченков[1,2], *П. А. Алексеев*[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия
[2]НИЯУ «МИФИ», г. Москва, Россия
*E-mail: savch92@gmail.com

Нейтронные исследования в целом (дифракция и спектроскопия) являются весьма результативным методом исследования, применительно к системам с сильными электронными корреляциями. Это обусловлено, в частности, эффективным взаимодействием нейтронов с магнитной подсистемой исследуемых объектов. Магнитный формфактор (МФФ) входит во все измеряемые величины, содержащие зависимость от передачи импульса в процессе рассеяния нейтронов. Он определяет характер этой зависимости, являясь результатом интерференции нейтронной волны на пространственном распределении орбитального и спинового магнитных моментов незаполненных (*f*- или *d*-) электронных оболочек.

В докладе обсуждаются основные результаты измерений нейтронных магнитных формфакторов для редкоземельных систем с сильными электронными корреляциями. Показано, что в ряде случаев, за счет использования методов нейтронной спектроскопии, удается получить уникальную, с точки зрения развития адекватных физических представлений, информацию о состоянии валентной нестабильности в *f*-электронной системе. Детально обсуждаются исследования магнитного формфактора для промежуточновалентных систем на основе Sm (SmB_6, SmS) и Eu (типа $EuCu_2Si_2$) и их значение для развития реалистичных представлений о природе промежуточновалентного состояния.

1. П. А. Алексеев, В. Н. Лазуков, П. С. Савченков, УФН (2025) *принята к печати*.

Устный доклад

МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ СОЕДИНЕНИЯ Dy_3Co: 2k-АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ СИСТЕМЫ С НЕСКОЛЬКИМИ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКА

А. Ф. Губкин[1,2]*, *А. Е. Теплых*[1], *А. Н. Пирогов*[1,2], *Н. В. Мушников*[1,2], *Н. В. Баранов*[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*E-mail: agubkin@imp.uran.ru

Бинарные редкоземельные интерметаллиды типа R_3T (R – 4f-элемент, T – 3d(4d)-переходный металл) обладают орторомбической кристаллической структурой типа Fe_3C с пространственной группой *Pnma*. Для данных систем характерны сложные магнитные фазовые диаграммы с большим количеством магнитных фазовых переходов, а также сложные низкотемпературные магнитные состояния, которые описываются комбинацией неприводимых представлений. Атомы переходного металла не обладают собственным магнитным моментом в R_3T. Многие члены семейства R_3T обладают большим магнитокалорическим эффектом в интервале температур 20—100 K, подходящим для ожижения технических газов методами магнитокриогенной техники [1,2]. Одним из ярких представителей семейства R_3T является соединение Dy_3Co, для которого характерно сложное низкотемпературное магнитное состояние с большим количеством индуцированных полей и температурой магнитных фазовых переходов и высокий магнитокалорический эффект [3,4]. Тем не менее, магнитная структура данного соединения остается до конца невыясненной, равно как и неизвестной остается природа низкотемпературного фазового перехода в магнитоупорядоченной области. Одной из причин, осложняющих решение данной задачи является высокое сечение поглощения медленных нейтронов ядрами атомов Dy. В настоящем докладе будут представлены результаты комбинированного исследования магнитного состояния Dy_3Co методами порошковой дифракции нейтронов и при помощи магнитных измерений на моно- и поликристаллических образцах.

На рисунке 1 (слева) представлены температурные зависимости намагниченности, измеренные на монокристаллическом образце Dy_3Co. Из рисунка видно, что кривые измеренные при приложении поля вдоль кристаллографических направлений a и c демонстрируют аномалию при температуре Нееля T_N = 42 K в то время, как кривая, измеренная при приложении поля вдоль оси b, демонстрирует подъем в точке Нееля и яркую аномалию в точке T_t =33 K, указывающую на фазовый переход от одной магнитной структуры к другой. Анализ данных нейтронной дифракции, измеренной при температуре T = 4.2 K, показал, что низкотемпературное магнитное состояние Dy_3Co ниже T_t = 33 K описывается моноклинной магнитной пространственной группой №14.78 $P2_1/c'$ [базис=(1,0,-1), (0,1,0), (0,0,2), начало=(1/2,0,0)], которая получается при пересечении двух изотропных подгрупп связанных с двумя активными параметрами порядка: $[\boldsymbol{k}_{19}]$mГ1− и $[\boldsymbol{k}_{23}]$mU1+, где $\boldsymbol{k}_{19}$ = 0 соответствует Г-точке первой зоны Бриллюэна, $\boldsymbol{k}_{23}$=(½ 0 ½) соответствует U-точке первой зоны Бриллюэна (в системе обозначений CDML). Более того, уточнение по методу Ритвельда показало, что для описания конфигурации магнитных моментов в рамках указанной магнитной ячейки требуются моды вторичного параметра порядка $[\boldsymbol{k}_{19}]$mГ4−, который разрешен симметрией системы.

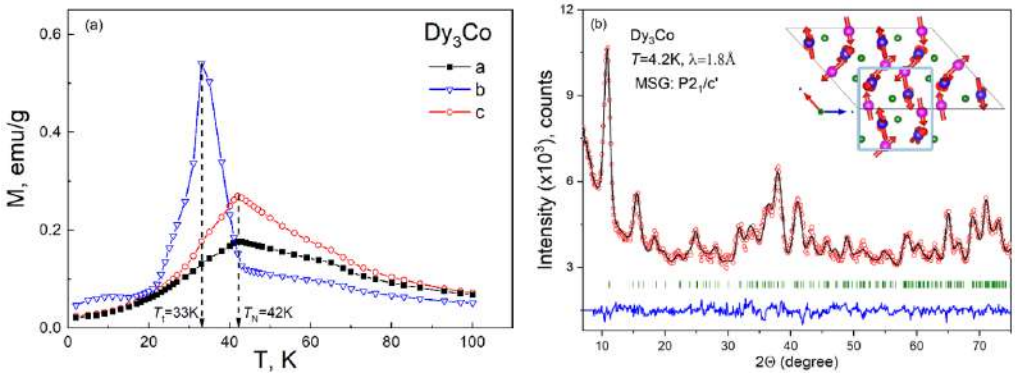

Рис. 1. (*a*) Намагниченность как функция температуры, измеренная при приложении магнитного поля вдоль кристаллографических направлений *a*, *b*, и *c* монокристалла Dy_3Co. (*b*) Результаты уточнения магнитной структуры по данным нейтронной дифракции, полученным при температуре T = 4.2 K.

При нагревании образца выше T_t = 33 K пропадает вклад от параметра порядка $[\boldsymbol{k}_{23}]$mU1+ и, следовательно, от вторичного параметра порядка $[\boldsymbol{k}_{19}]$mГ4−. Таким образом, симметрия магнитной подсистемы в интервале температур $T_t < T < T_N$ является более высокой и описывается орторомбической магнитной пространственной группой $Pn'm'a'$ (№62.449), определяемой единственным параметром порядка $[\boldsymbol{k}_{19}]$mГ1−. Любопытно отметить, что активация симметрийных мод связанных с $[\boldsymbol{k}_{23}]$mU1+ и $[\boldsymbol{k}_{19}]$mГ4− при температурах ниже T_t, приводит к росту проекций магнитных моментов на кристаллографическое направление *b*, в то время как, в интервале температур $T_t < T < T_N$ активны симметрийные моды с проекциями магнитных моментов в плоскости (*ac*). Это объясняет существование яркой аномалии на температурной зависимости намагниченности, измеренной вдоль при приложении магнитного поля вдоль направления *b* при температуре T_t = 33 K.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ для ИФМ УрО РАН.

1. W. Liu, T. Gottschall , F. Scheibel , et al., J. Alloys Compd. **995** 174612 (2024).
2. A. Herrero, A. Oleaga, A.F. Gubkin, A. Salazar, N.V. Baranov, J. Alloys Compd. **808** 151720 (2019).
3. N.V. Baranov, E. Bauer, R. Hauser, A. Galatanu, Y. Aoki, and H. Sato, Eur. Phys. J. B **16**, 67 (2000).
4. J. Shen, J-L. Zhao, F-X. Hu et al., Appl. Phys. A **99**, 853–858 (2010).

Устный доклад

РОЛЬ АНТИСИММЕТРИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ-МАНГАНАТАХ RMn_2O_5

И. А. Зобкало

НИЦ КИ — ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: zobkalo_ia@pnpi.nrcki.ru

В семействе RMn_2O_5 (R = редкоземельный элемент) электрическая поляризация возникает вследствие появления в них магнитного порядка, так что эти соединения относят к несобственным, или магнитным мультиферроикам. В контексте изучения физических механизмов магнитоэлектрических взаимодействий, приводящих к возникновению электрической поляризации, магнитные свойства этих материалов вызывают особенный интерес. Магнетизм RMn_2O_5 связан с двумя марганцевыми системы: одна образована ионами Mn^{3+}, расположенными вблизи основания кислородной пирамиды, и вторая – ионами Mn^{4+} — в окружении кислородных октаэдров; а также с магнитной системой редкоземельного элемента в случае, конечно, если он обладает магнитным моментом. В результате в RMn_2O_5 возникают сложные схемы магнитных взаимодействий, приводящие к несоразмерным магнитным структурам с характерными векторами распространения $\boldsymbol{k} = (0.5 - \delta_x, 0, 0.25 + \delta_z)$.

В RMn_2O_5 явление мультиферроичности чаще всего объясняется с помощью модели симметричной обменной стрикции [1], что связано с почти коллинеарным магнитным упорядочением при $\delta_x = \delta_z = 0$. Однако некоторые экспериментальные результаты указывают на возможность существования альтернативного магнитного механизма, ответственного за возникновение электрической поляризации, основанного на «обратном эффекте Дзялошинского-Мория (ДМ)», где смещения атомов происходят вследствие минимизации энергии взаимодействия ДМ [2]. Такой механизм можно назвать «антисимметричной стрикцией».

С помощью дифракции поляризованных нейтронов были выполнены исследования на монокристаллах RMn_2O_5 (R = Eu, Tb, Nd), что позволило получить экспериментальную верификацию применимости той или иной модели для описания механизмов мультиферроичности в этих соединениях [3 – 6]. Для измерений были использованы различные методы дифракции поляризованных нейтронов: метод XYZ-поляризационного анализа, метод SNP (сферическая нейтронная поляриметрия), «полуполяризационный» метод (поляризация падающего на образец пучка нейтронов известна, после рассеяния анализ поляризации не проводится) [7].

Для всех измеренных кристаллов наблюдалось хиральное рассеяние нейтронов. Например, измерения интенсивности рассеянных нейтронов для направлений поляризации падающих на кристалл нейтронов вдоль и против вектора рассеяния, выполненные на $TbMn_2O_5$, показывают наличие хирального рассеяния во всех трех магнитно упорядоченных фазах [4]. Хиральное рассеяние наблюдалось также в соединениях $EuMn_2O_5$ [3], $NdMn_2O_5$ [5] и $Nd_{0.8}Tb_{0.2}Mn_2O_5$ [6]. При этом, в $NdMn_2O_5$ температура, при которой наблюдалось появление электрической поляризации, соответствует температуре появления хирального рассеяния, тогда как несоразмерная нехиральная магнитная структура в этом соединении формируется при более высоких температурах.

Важным физическим аспектом для данных нейтронных экспериментов является тот факт, что именно антисимметричное взаимодействие ДМ определяет направление закручивания магнитных спиралей в этих кристаллах, и, т.о. обеспечивает наличие хирального вклада в магнитное рассеяние.

Более того, этот тип рассеяния отсутствовал при тех температурах, при которых отсутствует электрическая поляризация. О связи антисимметричного ДМ-взаимодействия с электричеством свидетельствует и тот факт, что в ходе исследований удалось изменить заселенность хиральных доменов путем приложения внешнего электрического поля [4 – 6].

Анализ магнитных сателлитов для всех изученных соединений позволяет также сделать вывод о том, что в них сосуществуют несоразмерные магнитные структуры с близкими векторами распространения $\boldsymbol{k} = (0.5 - \delta_x, 0, 0.25 + \delta_z)$, по-видимому, связанные с небольшим различием в упорядочении магнитных подсистем Mn^{3+} и Mn^{4+}. При этом, в некотором температурном диапазоне для обоих подсистем $\delta_x = \delta_z = 0$, и распространение обоих магнитных подсистем происходит когерентно, что является благоприятным обстоятельством для эффективности обменно-стрикционного механизма, согласно которому электрическая поляризация пропорциональны скалярному произведению соседних спинов $P \sim (\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2)$.

Проведенные нами эксперименты позволяют сделать вывод, что для адекватных моделей мультиферроичности в механизмах RMn_2O_5 необходимо учитывать как симметричные, так и антисимметричные обменные взаимодействия. При этом, в несоизмеримой фазе поляризация возникает вследствие механизма антисимметричной стрикции – «обратного эффекта» ДМ. Усиление электрической поляризации в соизмеримой магнитной фазе (там, где она есть), происходит благодаря обменно-стрикционному механизму, что связано с когерентным распространением двух магнитных упорядоченных подсистем: Mn^{3+} и Mn^{4+}.

1. P.G. Radaelli et al., J.Phys.: Condens. Matter **20**, 434213 (2008).
2. I.A. Sergienko et al., Phys. Rev. B **73**, 094434 (2006).
3. I.A. Zobkalo et al., Solid State Phys. **38**, 725 (1996).
4. I.A. Zobkalo et al., J. Phys.: Condens. Matter **30**, 205804 (2018).
5. I.A. Zobkalo et al., Phys. Rev. B **101**, 064425 (2020).
6. I.A. Zobkalo et al., IEEE Trans. Magn. **58**, 1 (2022).
7. И.А. Зобкало, Кристаллография **66**, 214 (2021).

Устный доклад

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ КОБАЛЬТА

С. Е. Кичанов, О. Н. Лис, Н. Т. Нгуен, Е. В. Лукин, Т. Н. Вершинина, Д. П. Козленко, Н. О. Голосова*

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*E-mail: ekich@nf.jinr.ru

Изучение кристаллической и магнитной структуры низкоразмерных магнитных соединений представляет интерес благодаря их уникальным физическим свойствам. К ним относятся явления магнитного фрустрации, сегнетомагнетизм, формирование экзотических магнитных состояний, и др. С этой точки зрения, соединение $Ca_3Co_2O_6$ является ярким примером магнитной системой с уникальными магнитными фазами, обусловленными геометрической топологией кристаллической структуры. С одной стороны, эти соединения являются интересными модельными магнитными материалами для изучения особенностей геометрии магнитных взаимодействий вдоль и между структурными одномерными цепочками, а с другой стороны, существуют особенности сложной магнитной структуры этого соединения, которые очень чувствительны к допированию или изменению внешних условий.

В докладе освещаются результаты исследований влияния легирования марганцем на структурные и магнитные свойства соединения $Ca_3Co_2O_6$. Представлены детальные исследования структурных и магнитных свойств соединений $Ca_3Co_{2-x}Mn_xO_6$ (x = 0, 0.1, 0.3 и 0.4) с использованием методов рентгеновской и нейтронной дифракции.

Также, представлены результаты исследований разупорядоченных перовскитных кобальтитов с допированием марганца. В последнее время все больше внимания уделяется упорядоченным двойным перовскитам с редкоземельными ионами в позиции *A* и ионами кобальта и марганца в качестве катионов *B* и *B*. Различные валентности ионов марганца, изменения спиновых состояний ионов кобальта и частичное разупорядочение магнитных катионов способствуют формированию уникальных магнитных свойств в этих типах двойных перовскитах. В идеальной упорядоченной структуре двойных перовскитов позиции ионов Co^{2+} и Mn^{4+} чередуются, а сверхобменное магнитное взаимодействие между ионами кобальта и марганца приводит к образованию ферромагнитного (ФМ) упорядочения. Разупорядочение катионов в двойном перовските может вызвать увеличение двойных обменных взаимодействий Mn^{4+}–O–Mn^{4+} или Co^{2+}–O–Co^{2+}, которые усиливают антиферромагнитные (АФМ) взаимодействия.

Кроме того, структурные искажения в октаэдрических единицах MnO_6 и CoO_6 вызывают слабые магнитные взаимодействия следующих ближайших соседей по пути Mn–O–Co–O–Mn, что приводит к магнитострикционному сегнетоэлектричеству из-за кооперативного смещения ионов редкоземельных и переходных металлов. В докладе представлены результаты исследования кристаллической и магнитной структуры орторомбических соединений La_2CoMnO_6 и Y_2CoMnO_6 методами нейтронной и рентгеновской дифракции в диапазоне температур 15–300 К. Были исследованы температурные изменения параметров элементарной ячейки и межатомные связи для обоих соединений. Обнаружены аномалии в температурном поведении параметров решетки и искажении кислородных октаэдров, связанные с формированием магнитного упорядочения при низких температурах.

Эта работа была поддержана совместным грантом Российского научного фонда, РНФ №24-42-04002, https://rscf.ru/project/24-42-04002/.

Устный доклад

МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ПИРОКСЕНА НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТА $SrCoGe_2O_6$

К. А. Корчигин[1], *П. А. Максимов*[2], *С. В. Стрельцов*[1], *Х. Цао*[3], *А. Подлесняк*[3], *Ю. Суи*[4], *А. Ф. Губкин*[1]*

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[3]Ок-Риджская национальная лаборатория, Ок-Ридж, США
[4]Харбинский политехнический университет, Харбин, Китай
*E-mail: agubkin@imp.uran.ru

Пироксены широко распространены в природе и представляют собой целый класс природных минералов. Среди прочих можно выделить клинопироксены $_2O_6$ (– одно- или двухвалентный металл, – двух- или трёхвалентный переходный металл, – Si или Ge) обладающие моноклинной кристаллической структурой с пространственной группо C2/c. Недавно было показано, что клинопироксен $SrCoGe_2O_6$, обладающий квазиодномерными зигзагообразными цепочками атомов Co ориентированными вдоль кристаллографического направления *c* (см. рисунок 1(*a*)), является перспективной платформой для изучения эффектов Китаевской физики [1].

Изучение макроскопических свойств $SrCoGe_2O_6$ на монокристаллическом образце показало, что при охлаждении в $SrCoGe_2O_6$ наблюдается два магнитных фазовых перехода: переход из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченное при температуре Нееля T_N = 9 K и дополнительный переход неизвестной природы при температуре $T_t \sim 7$ K. Эти результаты противоречат магнитной фазовой диаграмме $SrCoGe_2O_6$, опубликованной в работе [2]. Таким образом, целью данной работы является уточнение магнитной фазовой диаграммы соединения $SrCoGe_2O_6$, методом нейтронной дифракции на монокристаллическом образце.

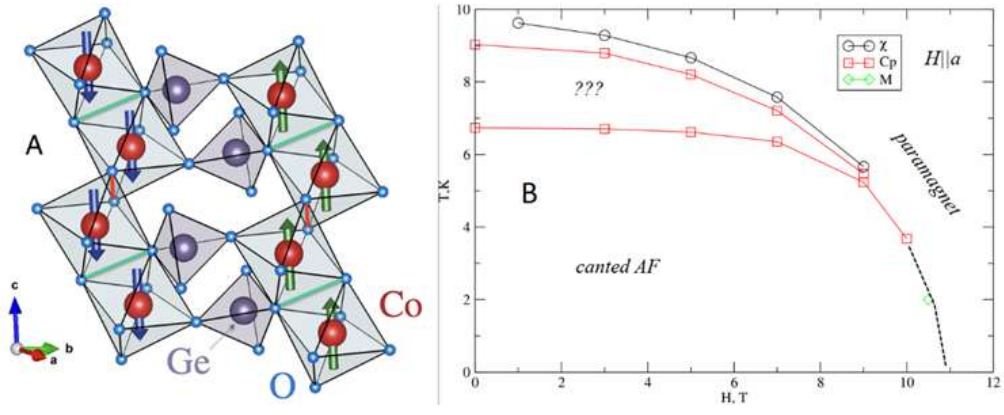

Рис. 1. (*a*) Модель магнитной структуры соединения $SrCoGe_2O_6$. Стронций не показан для наглядности. (*b*) Магнитная фазовая диаграмма соединения $SrCoGe_2O_6$, построенная по данным измерений магнитной восприимчивости и теплоемкости на монокристаллическом образце.

Нейтрон-дифракционный эксперимент проводился на четырехкружном дифрактометре НВ-3А, смонтированном на горизонтальном экспериментальном канале реактора HFIR (ORNL, USA) на монохроматичном пучке нейтронов с длиной волны λ = 1.54 Å. Анализ данных нейтронной дифракции подтвердил реализацию антиферромагнитного упорядочения, описываемого магнитной пространственной группой $P2_1/c.1'C[C2/c]$ (№14.84), ниже температуры Нееля. Вместе с тем природа низкотемпературного фазового перехода пока остается невыясненной, т.к. наличие в образце двойника не позволяет получить высокое качество фита. Работа по поиску закона двойникования и учета вклада от двойника в интенсивности Брэгговских пиков продолжается.

Работа выполнена в рамках Госзадания Минобрнауки для ИФМ УрО РАН.

1. P. A. Maksimov, A. V. Ushakov et al., Proc. Natl. Acad. Sci. **121(43)**, e2409154121 (2024).
2. L. Ding et al., Journal of Materials Chemistry C. **4**, 4236 (2016).

ВЫБОР НЕМАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ КАМЕР ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ, ПРИМЕНЯЕМЫХ В НЕЙТРОННОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И МУРН

В. С. Литвин[1,2]*, *Р. А. Садыков*[1], *Д. А. Бучный*[1], *Д. Н. Трунов*[1]

[1]Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия
[2]Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
*E-mail: vlitvin@inr.ru

Установка «Горизонт» [1] на импульсном источнике нейтронов «ИН-06» ИЯИ РАН предназначена для исследований двумерных нанообъектов методом нейтронной рефлектометрии. Благодаря вертикальной плоскости рассеяния возможно исследование жидких образцов, например пленок на поверхности жидкости. Также установка может применяться для исследований методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) в щелевой геометрии.

В состав установки входят 7-метровый изогнутый нейтроновод, коллимирующие щели, опционально — отклоняющее немагнитное супезеркало NiMo/Ti с m = 2, которое может быть заменено на поляризатор для исследования магнитных образцов, виброустойчивый стол образца и двухкоординатный детектор нейтронов. Для работы на нейтронографических установках источника «ИН-06», в частности для установки «Горизонт», были изготовлены криостат замкнутого цикла (4–300 К), вакуумная печь и магнитное устройство на основе постоянных магнитов с полем 0,12–1,2 Тл. Также ведется разработка немагнитных камер высокого давления для МУРН и нейтронной рефлектометрии. Для выбора оптимального материала для изготовления камер, пригодных для МУРН и нейтронной рефлектометрии, необходимо измерение спектров МУРН на образцах сплавов.

На установке «Горизонт» получены спектры МУРН и исследована структура немагнитных жаропрочных сплавов на основе Ni, Mo и Ti, которые могут быть использованы как материал для изготовления нейтронографических устройств для исследований в магнитных полях, в том числе нейтронными методами. Также сследована структура немагнитного сплава 40ХНЮ (Ni — основной, Cr — 38-41%, Al — 3.3-3.8%) до и после упрочняющего отжига. Установлено, что упрочняющий отжиг приводит к образованию наночастиц и, как следствие, к увеличению интенсивности МУРН. Также исследованы структуры таких немагнитных сплавов, как 38ХНВЮ (Ni — осн., Cr — 36–39%, W — 5%, Al — 3,0–3,8%), и ВТ-8 (Ti — осн., Al — 6-7%, Mo — 2,8–3,8%). Измерения проводились в щелевой геометрии. Полученные спектрометры приводятся на рис. 1(*a*). Образцы были изготовлены в виде пластин толщиной 5 мм. Кроме того, были получены спектры МУРН на образцах жаропрочного сплава MoTiC (основа Mo, Ti — 10%, C — 3%) и сплава БрБ2 (Cu — осн., Be — 1,8–2,1%) в виде прутков диаметром 12 мм в качестве моделей камер высокого давления (рис. 2(*b*)).

Из сравнения полученных кривых можно сказать, что наилучшими материалами для камер являютя сплавы MoTiC и ВТ-8 , т. к. их сечения рассеяния в диапазоне Q = 0,02–2 $Å^{-1}$ на 2 и 3 порядка соответственно меньше, чем у 40ХНЮ.

Также планируется проводить малоугловые измерения на установке МНС, также на источнике ИН-06 [2]. Для этого установка была дооснащена двухкоординатным детектором нейтронов, аналогичным детектору установки «Горизонт», получены первые спектры [3].

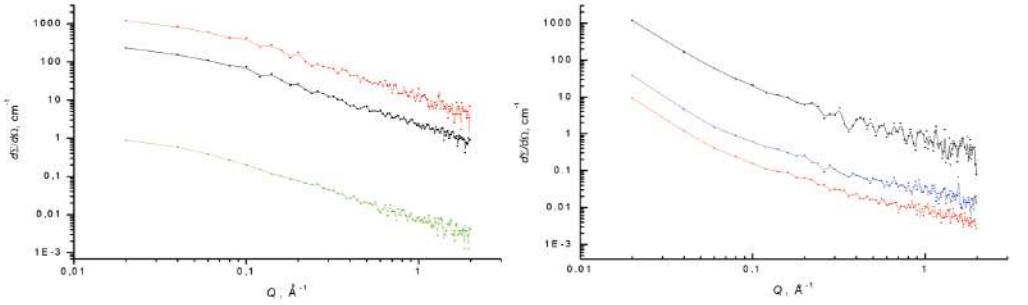

Рис. 1. (*a*) Спектры МУРН на сплавах 40ХНЮ (красный), MoTiC(зеленый), ВТ-8 (синий) и 38ХНВЮ(черный). Образцы — пластины толщиной 5 мм. (*b*) Спектры МУРН на сплавах: 40ХНЮ — черный, БрБ2 — синий и MoTiC (основа Mo, Ti — 10%, C — 3%) — красный. Образцы — прутки диаметром 12 мм.

1. В.С. Литвин, Д.А. Бучный, В.А. Ульянов, В.Г. Сыромятников, А.П. Булкин, А.А. Столяров, Д.Н. Трунов, С.Н. Аксенов, С.И. Поташев, Р.А. Садыков, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. **7**, 3 (2021).
2. С.П. Кузнецов, В.С. Литвин, В.Н. Марин, Д.Н. Трунов, С.Н. Аксенов, Ю.Б. Лебедь, И.В.Мешков, Р.А. Садыков, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. **5**, 29 (2018).
3. В.С. Литвин, Д.А. Бучный, А.В. Чураков, Д.Н. Трунов, С.Н. Аксенов, В.Д. Бербенцев, В.Н. Марин, И.В. Мешков, Садыков Р.А. Международный научно-исследователь-ский журнал. **7**(145), 3 (2024).

Устный доклад

РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СЛАБОГО ЗОННОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА MnSi С ГЕЛИКОИДАЛЬНОЙ КОНИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

А. А. Повзнер[1], *И. Д. Манько*[2]

[1]Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Наиболее изученный прототип спинтронных материалов – слабый зонный ферромагнетик MnSi с взаимодействием Дзялошинского-Мория, демонстрирует сложную картину, наблюдаемую вблизи фазового перехода на экспериментах по малоугловому рассеянию нейтронов [1].

В области дальнего порядка нейтронографические исследования во внешнем магнитном поле, например [1-3], согласуются с теорией Янсена-Бака, демонстрируя дифракционный пик геликодиальной конической структуры, однако вблизи температуры Кюри-Нееля наблюдается гексагональная вихревая структура, называемая скирмионной решеткой. Её дифракционные пики соответствуют тройке волновых векторов, расположеных под фиксированным углом [2]. При температуре фазового перехода происходит аномальный скачок интенсивности рассеяния нейтронов [1,3], возникает диффузное кольцо рассеяния нейтронов, которое характеризуется волновыми векторами, направленными стохастичести [1,2]. За пределами верхней границы флуктуаций диффузные кольца исчезают.

Первопринципное DFT-моделирование [4] обнаруживает на поверхности Ферми области протекторатов Берри, указывающих на возможность топологического перехода со сдвигом химического потенциала системы при фазовом переходе во флуктуационную фазу. В настоящей работе первопринципное моделирование электронной структуры работы [4] было дополнены GGA-исследованием тонкой структуры плотности электронного состояния вблизи уровня энергии Ферми, определяющим параметры функционала Гинзбурга-Ландау [5]. Проведенный анализ уравнений магнитного состояния позволяет рассмотреть фазовую диаграмму, включающую скирмионную и флуктуационную области. Показано, что скирмионная и флуктуационная области характеризуются вкладом тройных спиновых корреляций, как флуктуаций распределения спиновой и зарядовой плотности, возникающих в следствие топологического перехода в области вырождения Берри. Анализ вклада тройных корреляций приводит к особенности интенсивности рассеяния и параметра поляризации нейтронов, наблюдаемым на эксперименте. Сдвиг химического потенциала за пределы области вырождения Берри приводит к исчезновению спиновых корреляций.

Результаты получены в рамках задания Министерства Науки и Высшего Образования, контракт № FEUZ-2023-0015.

1. M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Boni, C. Pfleiderer. Phys. Rev. B **87**, 134407 (2013).
2. Е. В. Алтынбаев, Н. М. Чубова, С. В. Григорьев. Кристаллография **67**, 1, 120 (2022).
3. C. Pappas. Phys. Rev. B **83**, 224405 (2011).
4. M.A. Wilde, M. Dodenhoft, A. Niedermayr, A. Bauer, M.M. Hirschmann, K. Alpin, A.P. Schnyder, C. Pfleiderer, Nature **594**, 374–379 (2021).
5. M. Brando, D. Belitz, F. M. Grosche, and T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **88**, 25006 (2016).

Устный доклад

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$

Н. В. Мушников, Е. Г. Герасимов, А. М. Барташевич, П. Б. Терентьев, М. А. Семкин, А. Н. Пирогов*

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

*E-mail: mushnikov@imp.uran.ru

Интерметаллические соединения RMn_2Si_2 (R – редкоземельный металл) демонстрируют разнообразие магнитных структур и фазовых переходов, при которых наблюдаются большие значения магнитострикции, магнитосопротивления, магнитокалорического эффекта. Соединения кристаллизуются в тетрагональную структуру типа $ThCr_2Si_2$, в которой одноименные атомы располагаются в отдельных атомных слоях. Атомы Mn обладают магнитным моментом, и сильное внутрислойное обменное взаимодействие Mn–Mn обеспечивает температуры магнитного упорядочения подрешетки марганца выше комнатной. Редкоземельная подрешетка упорядочивается при значительно более низких температурах. В магнитоупорядоченном состоянии конкуренция внутрислойных и межслойных обменных взаимодействий Mn–Mn, R–Mn и $R - R$, а также магнитной анизотропии, обуславливает существование различных магнитных структур и магнитных фазовых переходов, сопровождающихся аномальным изменением физических свойств.

Тип межслойного упорядочения Mn–Mn в RMn_2Si_2 зависит от расстояния между атомами марганца в слое, $d_{Mn-Mn} = a/\sqrt{2}$, где – параметр решетки. В соединениях с d_{Mn-Mn} меньше критического значения $d_c \approx 0.287$ нм реализуется антиферромагнитный порядок, а при $d_{Mn-Mn} > d_c$ – ферромагнитный. Дополнительно на формирование магнитного упорядочения при низкой температуре оказывает существенное влияние магнитная анизотропия. Изменяя параметры кристаллической решетки и магнитную анизотропию в квазитройных соединениях $R_{1-x}R'_xMn_2Si_2$ можно управлять магнитными структурами и магнитными фазовыми переходами.

В $LaMn_2Si_2$ расстояние между атомами Mn превышает d_c, и соединение упорядочивается ферромагнитно ниже температуры = 305 K. При этом наблюдается одноосная анизотропия с полем анизотропии около 60 кЭ при 4.2 K. В $TbMn_2Si_2$ вследствие лантаноидного сжатия параметры решетки оказываются значительно меньше, и $d_{Mn-Mn} < d_c$. Мы исследовали магнитную структуру и свойства системы $La_{1-x}Tb_xMn_2Si_2$. С помощью порошковой дифракции нейтронов установлено, что при низкой температуре с ростом ферромагнитный порядок, характерный для $LaMn_2Si_2$, изменяется на антиферромагнитный, а затем на ферримагнитный. Вследствие большой одноосной магнитной анизотропии ионов Tb при антиферромагнитном упорядочении марганца подрешетка тербия находится во фрустрированном состоянии, и в интервале концентраций от 0.27 до 0.4 не упорядочивается. При x = 0.6 и 0.8 в области температур менее 28 K ($x = 0.6$) и 48 K ($x = 0.8$) обнаружено одновременное сосуществование антиферромагнитной и ферримагнитной структур.

Формирование магнитных структур при различных температурах было проанализировано в модели трех подрешеток с отрицательными межподрешточными обменными взаимодействиями. Модель позволяет описать изменение угла отклонения моментов Mn от c-оси и оценить параметры обменных взаимодействий.

Исследование поддержано Российским научным фондом, проект № 23-12-00265.

Устный доклад

ИЗМЕРЕНИЕ СПИНВОЛНОВОЙ ДИНАМИКИ В ГЕЛИКОИДАЛЬНЫХ МАГНЕТИКАХ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

К. А. Пшеничный и С. В. Григорьев*

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

*E-mail: pshenichnyi_ka@pnpi.nrcki.ru

Соединения $Fe_{1-x}Co_xSi$ и $Mn_{1-x}Fe_xSi$ являются твердыми растворами с кристаллической структурой типа B20. В этих соединениях ниже T_c образуется несоизмеримая спиновая спираль с малым волновым вектором $k \ll 1/a_0$, где a_0 - постоянная решетки [1]. Появление такой магнитной структуры обусловлено антисимметричным обменным взаимодействием Дзялошинского-Мория (ДМ), связанным, в свою очередь, с отсутствием центра симметрии в расположении магнитных атомов марганца, железа и кобальта (модель Бака-Йенсена [2]). Согласно этой модели, спиральный порядок стабилизируется за счёт ферромагнитного обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского-Мория, при этом волновой вектор определяется как $k = SD/A$, где A — жёсткость спиновых волн, D - константа взаимодействия Дзялошинского-Мория. С приложением магнитного поля формируется однодоменная коническая структура с $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$, которая остается стабильной вплоть до критического поля H_{c2}, когда происходит переход из конического состояния в ферромагнитное, при этом $g\mu_B H_{c2} = Ak^2$ [3].

Методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов нами были экспериментально измерены такие параметры магнитной системы как волновой вектор спирали k, критическое поле H_{c2} , и жесткость спиновых волн в широком температурном диапазоне в соединениях $Mn_{1-x}Fe_xSi$ с $x = 0.0, 0.03, 0.06, 0.09$ [4,5], $Fe_{1-x}Co_xSi$ с $x = 0.25, 0.30, 0.50$ [6], и соединении Cu_2OSeO_3 [7]. Эксперименты показали, что модель Бака-Йенсена на количественном уровне хорошо описывает характерные параметры системы во всем температурном диапазоне от 0 до критической температуры T_c. Установлено также, что спин-волновая жесткость A слабо меняется с температурой для каждого отдельного соединения, являясь конечной величиной при T_c и, тем самым, демонстрируя, что упорядочение в спиновую спираль описывается переходом первого рода. Жесткость спиновых волн A существенно меняется с концентрацией x для соединений $Fe_{1-x}Co_xSi$ и $Mn_{1-x}Fe_xSi$. В докладе представлены зависимости $A(x)$ и дана интерпретация нетривиального поведения, согласующаяся с моделью Бака-Йенсена [2,3].

1. С. Григорьев и др., Физика твердого тела **52**, 5, 852 (2010).
2. P. Bak, M.H. Jensen, J. Phys. C **13**, L881 (1980).
3. S.V. Maleyev,, Phys. Rev. B. **73**, 174402 (2006).
4. S.V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, P. Kizhe, and S. V. Maleyev, Phys. Rev. B **92**, 220415(R) (2015).
5. S. V. Grigoriev, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, K. A. Pschenichnyi, D. Menzel, A. Heinemann, and G. Chaboussant, Phys. Rev. B **97**, 024409 (2018).
6. S. V. Grigoriev, K. A. Pschenichnyi, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, A. Heinemann, D. Honnecker, and D. Menzel, Phys. Rev. B **100**, 094409 (2019).
7. S. V. Grigoriev, K. A. Pschenichnyi, E. V. Altynbaev, A. Heinemann, and A. Magrez, Phys. Rev. B **99**, 054427 (2019).

Устный доклад

СПИНОВАЯ ДИНАМИКА РЕДКОЗЕМЕЛЬНОЙ ПОДСИСТЕМЫ ОРТОФФЕРИТА $TmFeO_3$

С. А. Скоробогатов, В. В. Вальков, К. А. Шайхутдинов, С. Е. Никитин*

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия
*E-mail: saskorobogatov@iph.krasn.ru

Неослабевающий интерес к редкоземельным ортоферритам ($RFeO_3$, где R – редкоземельный ион) вызван большим количеством уникальных свойств, обнаруженных в них. Наиболее изученным является спонтанный спин-ориентационный переход (СС-ОП) [1], характеризуемый изменением направления спонтанной намагниченности в кристалле при изменении температуры. Обнаружены и другие эффекты, такие как: сверхбыстрое вращение намагниченности, индуцированное лазерным импульсом [2], анизотропная эволюция магнитной энтропии [3] возникновение солитонных решеток [4], возникновение квазиодномерных магнитных цепочек [5] и изменение температурной ширины СС-ОП при приложении гидростатического давления [6]. Исследуемые соединения относятся к пространственной группе №62. Магнитные характеристики определяются двумя магнитными подрешетками: антиферромагнитно упорядоченной, сильно связанной подрешетки ионов Fe^{3+} с температурой Нееля $T_N \approx 600$—700 К и подрешетки редкоземельного иона, упорядочение которой наступает при $T < 10$ К. Устоявшимся является мнение о том, что уникальные магнитные свойства ортоферритов напрямую связанны с $3d$-$4f$ взаимодействием, возникающим между магнитными подрешетками. Однако, построение универсальной микроскопической модели наталкивается на ряд трудностей.

В данном исследовании продолжается работа над ортоферритом $TmFeO_3$. Ранее, нашей группой был проведен анализ данных неупругого рассеяния нейтронов, полученных в Oak Ridge National Laboratory [7]. В упомянутой работе содержалась исчерпывающее описание спиновой динамика подсистемы Fe^{3+} иона. Обработка экспериментальных данных и их описание с использованием линейной спин-волновой теории позволило выявить анизотропию между обменными взаимодействиями в ab-плоскости и вдоль оси- в координатной установке $Pbnm$ группы №62. Также была определена эффективная константа анизотропии.

Кроме возбуждений в подсистеме Fe^{3+} иона, в работе были представлены низкоэнергетические возбуждения, приведенные на Рисунке 1. Данные возбуждения были ассоциированы с уровнями кристаллического поля иона Tm^{3+}, возникающими в следствии его взаимодействия с кристаллическим окружением. Для описание такого рода возбуждений использовалась модель точечного заряда, которая позволила с неплохой точностью описать энергию первого возбуждения, расположенного на $\sim$2 мэВ, этот результат также совпал с классическими оптическими работами [8, 9], посвященными данному классу соединений. В рамках примененной модели были рассчитаны зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля, которые воспроизвели поведение и абсолютные значения намагниченности, наблюдаемой в эксперименте [7].

Однако, вышележащий уровень, а также дисперсию обоих уровней невозможно описать в рамках одного из использованных подходов. Таким образом, описание наблюдаемой дисперсии уровне кристаллического поля Tm^{3+} иона является ключевой задачей этого исследования.

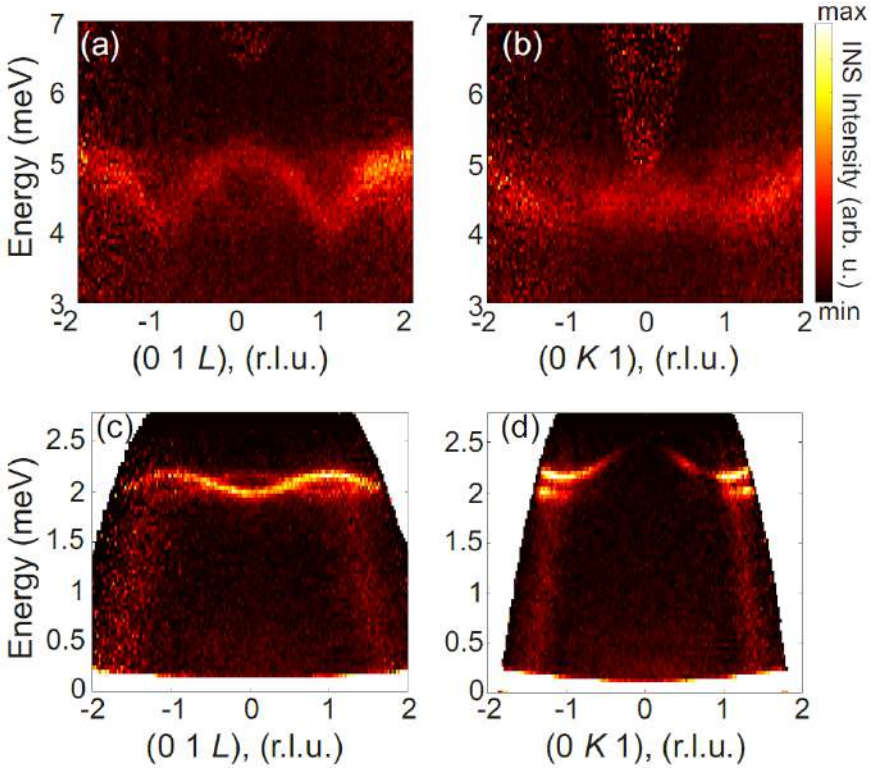

Рис. 1. (*a*) Спектры низкоэнергетических возбуждений в соединении $TmFeO_3$, измеренные вдоль направлений обратного пространства (01*L*) (*a*, *c*) и (0*K*1) (*b*, *d*), при температуре 1.7 K. Измерения проводились при энергии падающих нейтронов до 12 мэВ (*a*, *c*) и 3.3 мэВ (*b*, *d*), при обработке выполнялось интегрирование вдоль ортогональных направлений на величину 0.1 r.l.u. [7].

На текущем этапе развития модель включает в себя слабое обменное взаимодействие в подсистеме Tm–Tm, спин-орбитальное взаимодействие, влияние кристаллического окружения и вклада Зеймана. Опираясь на экспериментальные спектры неупругого рассеяния нейтронов, а также магнитометрические данные, полученные на высококачественных монокристаллах, предполагается адаптировать рассматриваемую модель. Развитие модели на примере данного соединения может стать важным вкладом в понимание природы 3*d*-4*f* взаимодействия.

1. R. L. White, J. Appl. Phys. **40**, 1061 (1969).
2. A. V. Kimel et al., Nature (London) **435**, 655 (2005).
3. Y. J. Ke et al., Sci. Rep. **6**, 19775 (2016).
4. S. Artyukhin et al., Nature Mater. **11.8**, 694–699 (2012).
5. S. E. Nikitin et al., Phys. Rev. B. **98**, 064424 (2018).
6. S. A. Skorobogatov et al., Phys. Rev. B. **108**, 054432 (2023).
7. S. A. Skorobogatov et al., Phys. Rev. B **101**, 014432 (2020).
8. A. P. Malozemoff and R. L. White, Solid State Commun. **8**, 665–668 (1970).
9. A. P. Malozemoff, J. Phys. Chem. Solids **32**, 1669–1685 (1971).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ ДИНАМИКИ $Mn_{0.9}Fe_{0.1}Si$ МЕТОДАМИ НЕУПРУГОГО НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ

И. Н. Хороший[1]*, *С. Е. Никитин*[1], *А. С. Суханов*[2], *А. А. Подлесняк*[3]

[1]ИФ СО РАН, Россия, Красноярск
[2]Центр электронных корреляций и магнетизма, Университет Аугсбурга, Аугсбург, Германия
[3]Национальная лаборатория Оук-Ридж, США
*E-mail: ivan.xoroshij@mail.ru

MnSi представляет собой металлический хиральный магнетик, занимающий одно из центральных мест в современных исследованиях физики конденсированного состояния. В этом соединении конкуренция между изотропным обменным взаимодействием и антисимметричным взаимодействием Дзялошинского-Мории приводит к формированию геликоидального магнитного порядка ниже температуры фазового перехода T_C = 29 K и волновым вектором, направленным вдоль направления (111). Особый интерес к MnSi обусловлен обнаружением в нем скирмионной фазы, проявляющей топологический эффект Холла [1–3].

В этой работе мы исследуем эволюцию магнитной структуры и спиновой динамики в легированном соединении, $Mn_{0.9}Fe_{0.1}Si$, индуцированную магнитным полем с помощью метода упругого и неупругого рассеяния нейтронов. Соединение образует гелимагнитную структуру с критической температурой упорядочения $_C$ 5 K, что существенно ниже, чем в чистом MnSi, и волновым вектором, направленным вдоль (110). Наши данные показывают, что приложение магнитного поля вдоль направления (001) подавляет несоразмерную фазу в 0.6 T, а предварительное охлаждение в магнитном поле приводит к переориентации спиновой спирали вдоль направления приложенного поля [4].

Данные по спектроскопии полученные в высоких магнитных полях $\gg$ 0.6 T, показывают присутствие магнитной моды с параболической дисперсией, которая смещается вверх по энергии при увеличении магнитного поля от 4 T до 8 T. Минимум дисперсии находится на несоразмерном волновом векторе соответствующем периодичности геликоидального упорядочения. Примечательно, что магнитная мода была обнаружена только на волновом векторе $q^+ = (00\Delta)$ направленом вдоль магнитного поля, но отсутствуем на противоположном, $q^- = (00 - \Delta)$, что может быть обусловлено монохиральной структурой исследуемого образца. Путем аппроксимации полевой зависимости дисперсии магнонной моды мы вычислили g-фактор и оценили эволюцию спиново-волновой жесткости. Кроме того, наши данные показывают значительную анизотропию жесткости спин-волновой моды между направлениями лежащими вдоль и поперёк магнитного поля.

1. J. Kindervater et al., Phys. Rev. B **101**, 104406 (2020).
2. С. М. Стишов и А. Е. Петрова, Успехи физических наук, **187(12)** (2017).
3. С. В. Григорьев и др., Фундаментальные проблемы современного материаловедения 3.1 (2006):
4. С. В. Григорьев и др., Физика твердого тела **52(5)** (2010).

МЕДЛЕННАЯ МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В ОРТОФЕРРИТЕ $HoFeO_3$

К. А. Шайхутдинов, С. Е. Никитин, С. А. Скоробогатов, М. С. Павловский

Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

Одним из интересных с точки зрения магнитных свойств классов оксидных соединений являются ортоферриты с общей формулой $RFeO_3$ [1,2]. В последние годы интерес к данным соединениям вновь вырос в связи с открытием в них таких интересных явлений как мультиферроизм ниже температуры упорядочения редкоземельной подсистемы [3], индуцированное лазером сверхбыстрое перемагничивание доменных стенок [4], формирование солитонной решетки в соединении $TbFeO_3$ [5] и др.

В данной работе проведено экспериментальное исследование частотных зависимостей действительной и мнимой частей магнитной восприимчивости монокристалла ортоферрита $HoFeO_3$ как при приложении внешнего магнитного поля, так и при H = 0 Т в температурном диапазоне = 4.2 – 100 К. Была обнаружена аномальная медленная спиновая динамика в $HoFeO_3$ с характерными временами релаксации τ порядка 1 миллисекунды при температурах до 60 К. Такое поведение характерно для молекулярных магнетиков и объясняются эффектами квантового туннелирования намагниченности, вызванными сильной одноосной анизотропией. В данной работе мы рассматриваем возможные сценарии, объясняющие подобное поведение намагниченности в монокристаллах ортоферритов путем рассмотрения гамильтониана кристаллического электрического поля.

1. R. L. White, J. Appl. Phys. **40**, 1061 (1969).
2. K. P. Belov, A. K. Zvezdin, A. M. Kadomtzeva, and P. Z. Levitin, Orientational Transitions in the Rare-Earth Magnets (Nauka,Moscow, 1979), in Russian.
3. Tokunaga, Yusuke, et al., Nature materials **8.7**, 558–562 (2009).
4. A. V. Kimel, et al., Nature 435.7042, 655–657 (2005).
5. S. Artyukhin, M. Mostovoy, N. P. Jensen, et al., Nature materials 11.8, 694–699 (2012).

Секция 2.

Приборная база нейтронографии

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПРОЕКТА «РАЗВИТИЕ АППАРАТНО-МЕТОДИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НАУЧНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ НА ИСТОЧНИКАХ НЕЙТРОНОВ РАЗНОГО ТИПА»

В. И. Боднарчук

ЛНФ ОИЯИ, Дубна, Россия
*E-mail: bodnarch@nf.jinr.ru

ОИЯИ получен грант Министерства науки и образования РФ на период 2025–2027 гг в форме субсидии в целях обеспечения реализации мероприятий Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры по теме «Развитие аппаратно-методической базы для решения научных и прикладных задач на источниках нейтронов различного типа».

ОИЯИ является ведущей организацией в гранте, в котором принимают участие еще 4 организации: НИЦ КИ – ПИЯФ, ИЯИ РАН, ИФМ УрО РАН, Государственный университет «Дубна». ОИЯИ уже являлся получателем аналогичного гранта в 2021-2024 гг., в котором тематика решаемых задач во многом совпадает с тематикой гранта, полученного в текущем году. Поэтому цели и задачи нового проекта являются логичным продолжением предыдущего, и должны внести заметный вклад в развитие экспериментальной инфраструктуры на станциях нейтронного рассеяния на источниках нейтронов в Российской Федерации.

Доклад посвящен обзору, как достигнутых результатов в рамках выполненного проекта 2021–2024 гг., так и задач, которые предстоит решать в следующие 3 года.

Приглашенный доклад

ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ НЕЙТРОННОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО КОМПЛЕКСА НА БАЗЕ РЕАКТОРА ИР-8: ПРОВОДИМЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРОГНОЗЫ РАЗВИТИЯ

П. А. Борисова

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: Borisova_PA@nrcki.ru

Методы исследования (дифракции, рассеяния и визуализации) с использованием нейтронных пучков, реализованные на исследовательских станциях и стендах, предоставляют уникальные возможности для анализа структуры различных материалов, металлических полуфабрикатов и изделий. Применение этих методов позволяет получать ценные данные как фундаментального, так и прикладного значения, что нередко способствует развитию технологий получения новых или улучшенных материалов и повышению качества изделий из них.

Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8 (НИК ИР-8) функционирует, используя экспериментальные станции на выведенных нейтронных пучках горизонтальных каналов. За последние 5 лет основные направления исследований, проводимых с использованием оборудования НИК ИР-8 фокусировались на изучении кристаллической и магнитной структуры твердых тел, анализе напряженно-деформированного состояния материалов, исследовании внутреннего строения объектов с использованием методов нейтронной радиографии и томографии, включая работы по аппаратно-методическому развитию. Эта деятельность была направлена на расширение экспериментальных возможностей и создание устойчивой исследовательской инфраструктуры на базе реактора ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт».

КОМПАКТНЫЙ ИСТОЧНИК НЕЙТРОНОВ DARIA – СТАТУС РАБОТ

Т. В. Кулевой

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: kulevoy@itep.ru

Компактные источники нейтронов (КИН) – это современная тенденция развития исследовательских методик с использованием рассеяния нейтронов. Под КИН понимают источники нейтронов малой мощности, работающие на базе импульсных ионных или электронных ускорителей. В рамках Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры под руководством НИЦ «Курчатовский институт» группой специалистов ведущих научных центров страны ведется разработка проекта компактного источника нейтронов DARIA (Dedicated for Academic Research and Industrial Application) на основе линейного резонансного ускорителя протонов, призванного обеспечить научное сообщество современным источником нейтронов.

В 2021-2024 годах при поддержке гранта Министерства образования выполнены работы по разработке, созданию и тестированию ключевых элементов установки. Были созданы источник ионов на основе электронно-циклотронного резонанса, полномасштабные макеты секции резонатора с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой (RFQ) и резонатора с трубками дрейфа (DTL), макет гибридной квадрупольной линзы, макеты мишенной сборки на основе бериллия, а также разработаны экспериментальные каналы под нейтронные пучки, генерируемые на установке. В докладе представлены и обсуждаются достигнутые результаты.

Приглашенный доклад

ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ ИСТОЧНИКА УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ ДЛЯ РК ПИК

В. А. Лямкин, А. П. Серебров, А. К. Фомин, А. О. Коптюхов, Д. В. Прудников, Г. О. Бородинов, П. А. Хазов, А. В. Сиротин, С. Н. Иванов*

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

*E-mail: lyamkin_va@pnpi.nrcki.ru

Доклад посвящен текущему состоянию нового источника ультрахолодных нейтронов на основе сверхтекучего гелия для исследований в области физики фундаментальных взаимодействий на реакторе ПИК [1].

Нейтроноводная система источник УХН рассчитана на установку до четырёх научных станций. На первом этапе эксплуатации источника планируется установка ЭДМ спектрометра с чувствительностью измерений 10^{-27} *е*·см/год и два эксперимента по измерению времени жизни нейтрона с точностью 0,1 сек – с гравитационной и магнитной ловушками [2]. Планируемая плотность УХН в закрытой камере источника – 2.2×10^3 см$^{-3}$ [3].

Для данного источника УХН была спроектирован и реализован уникальный технологический криогенный комплекс для работы со сверхтекучим гелием в условиях реакторной установки. Оборудование комплекса полностью изготовлено и проходит процесс полномасштабных испытаний для отработки режимов работы источника УХН и получения эксплуатационного опыта.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 23-72-10007.

1. М.В. Ковальчук, В.В. Воронин, С.В. Григорьев, А.П. Серебров, Кристаллография **66**, 191 (2021).
2. A. K. Fomin, A. P. Serebrov, Physics of Particles and Nuclei **56**, 928 (2025).
3. А.П. Серебров, В.А. Лямкин, А.К. Фомин, М.С. Онегин, ЖТФ **92**, 899 (2022).

ПОРОШКОВЫЙ ДИФРАКТОМЕТР ДЛЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО РЕАКТОРА ИРТ-Т

Е. В. Москвин[1]*, *К. Бескончин*[2], *Н. А. Коваленко*[1], *И. А. Бедретдинов*[1]

[1]НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
[2]Томский Политехнический Университет, Томск, Россия
*E-mail: moskvin_ev@pnpi.nrcki.ru

В докладе рассматривается статус реализации проекта нейтронного порошкового дифрактометра, который планируется построить и разместить на 8 канале исследовательского реактора ИРТ-Т Томского политехнического университета (ТПУ).

Особенностями дифрактометра является высокий угол отклонения монохроматора ($2\Theta_M$ = 150°), отказ от использования коллиматоров, вертикально фокусирующий монохроматор, предложение использовать высокоразрешающий позиционно-чувствительный сцинтилляционный детектор с отказом от сканирования по углу. Все эти меры позволяют добиться высокой производительности при сохранении высокой разрешающей способности в диапазоне рассеянных углов $10° \leq 2\Theta_S \leq 160°$. Прибор является аналогом недавно введенного в эксплуатацию порошкового дифрактометра PEARL в Техническом университете Дельфта, Голландия с похожими характеристиками [1].

Из-за невозможности получить кристаллы монохроматора с достаточной отражающей способностью пришлось изменить геометрию нейтроновода с прямого на расходящийся. Расходящийся нейтроновод выполнен по новой ступенчатой технологии, он изготовлен в НИЦ КИ – ПИЯФ и доставлен в ТПУ. Также выполнены расчеты новой защиты, а также разработана рабочая конструкторская документация на весь дифрактометр и комплексную систему защиты трех каналов: 7, 8 и 9.

Авторы выражают благодарность сотрудникам ТПУ М. Сыртанову, А. Лидеру и М. Аникину за плодотворные дискуссии и техническую поддержку. Работы выполнены в рамках договора № 18693/66-200-1/2022 от 13.12.2022. .

1. L. van Eijck, et al, J. Appl. Cryst. **49**, 1398 (2016).

Приглашенный доклад

СВОЙСТВА КОМПАКТНОГО НЕЙТРОННОГО СУПЕРЗЕРКАЛЬНОГО ТРАНСМИССИОННОГО ПОЛЯРИЗАТОРА НОВОГО ТИПА

В. Г. Сыромятников[1,2]*, *С. Ю. Семенихин*[1], *М. В. Ласица*[1]

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru

В работах [1,2] предложен и кратко рассмотрен новый нейтронный трансмиссионный суперзеркальный кинк (ломаный) поляризатор. В работе [3] рассмотрено предложение по увеличению светосилы этого поляризатора за счет добавления второго элемента – прямого поляризующего нейтроновода. При этом значительно, в несколько раз увеличился, угловой диапазон выходящего пучка с высокой поляризацией. Этот поляризатор предназначен для работы в малых магнитных полях, в которых можно использовать реманентные свойства поляризующих суперзеркал. В работе [4] рассмотрен поляризатор, у которого его элементы (кинк и прямой нейтроновод) находились в насыщающих магнитных полях. Кроме того, между этими элементами был добавлен спин-флиппер. Показано, что основные параметры этого поляризатора высоки и он может быть использован для ряда нейтронно-физических установок нового исследовательского реактора ПИК (Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт» — Петербургский институт ядерной физики).

В данной работе обсуждается рассматриваемый компактный нейтронный трансмиссионный суперзеркальный поляризатор с новой магнитной системой. Использование этой магнитной системы позволяет оптимизировать конструкцию поляризатора и уменьшить его длину. Получены и обсуждены основные параметры поляризатора в зависимости от характеристик элементов этого поляризатора. Проведено сравнение рассматриваемого поляризатора с известными трансмиссионными нейтронными поляризаторами.

1. В.Г. Сыромятников, Патент РФ № 2624633 на изобретение. Приоритет от 21.06.2016.
2. V.G. Syromyatnikov, V.M. Pusenkov, Journal of Physics: Conf. Ser. **862** 012028 (2017).
3. V.G. Syromyatnikov, ArXiv:1911.02936 [physics.ins-det].
4. V.G. Syromyatnikov, ArXiv:2412.00223 [physics.ins-det].

РАЗРАБОТКА БРЭГГОВСКОГО МОНОХРОМАТОРА ДЛЯ ИСТОЧНИКА ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ

В. С. Шпилевская[1,2]*, *Г. В. Кулин*[1], *А. И. Франк*[1]

[1]Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
*E-mail: shpilevskaya@jinr.ru

В Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка Объединённого института ядерных исследований ведется работа над концептуальным проектом источника ультрахолодных нейтронов (УХН), создание которого планируется на реакторе ИБР-2М. В основу концепции источника положена идея замедления импульсного потока очень холодных нейтронов (ОХН) магниторезонансным методом непосредственно перед ловушкой до энергии УХН с последующим их импульсным накоплением в этой ловушке [1].

Работа над проектом источника УХН требует проведения ряда методических экспериментов с ОХН, которые в настоящее время неосуществимы ОИЯИ. Поэтому на первом этапе работ по проекту планируется создать тестовый канал, обеспечивающий широкий спектр ОХН. В планируемом источнике ОХН, которые после замедления конвертируются в УХН, соответствует узкий диапазон продольных компонент скоростей [1]. Все методические эксперименты желательно проводить с близким к необходимому диапазоном скоростей ОХН, поэтому планируемый тестовый канал будет оснащён монохроматором, позволяющим сформировать пучок нейтронов с продольными компонентами скоростей 20±1 м/с.

Для монохроматизации пучка тепловых или холодных нейтронов обычно используются кристаллические монохроматоры. Известно, что направление дифракционных максимумов при заданной длине волны λ падающих нейтронов и конкретном межплоскостном расстоянии d в кристалле определяется условием Вульфа-Брэгга:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \qquad (1)$$

где θ – угол скольжения, n – порядок дифракционного максимума. Для медленных нейтронов, таких как ОХН, длина волны составляет десятки и сотни ангстрем, что значительно превышает межплоскостные расстояния в кристаллах. В данной работе для монохроматизации пучка ОХН предлагается использовать брэгговское зеркало, представляющее собой периодическую структуру чередующихся слоёв никеля и титана, которые характеризуются высоким и низким эффективными потенциалами [3] соответственно. Расчёт оптимальных толщин слоёв проводился так, чтобы для каждого из слоев этой пары для нормальной компоненты $v_\perp$ происходила конструктивная интерференция.

При проектировании монохроматора одним из требований было сохранить после монохроматизации исходное направление пучка, а потому была выбрана геометрия из двух брэгговских зеркал, расположенных под углом θ=45° к оси пучка. При таком угле падения нейтронов со скоростью 20 м/с их нормальная компонента $v_\perp$ будет равна 14÷15 м/с, а соответствующие толщины слоёв составят d_{Ti} = 102.4 Åи d_{Ni} = 39.95 Å.

Из-за наличия углового расхождения исходного пучка условию Вульфа-Брэгга могут удовлетворить нейтроны вне желаемого диапазона скоростей, из-за чего возникает необходимость его коллимации. Необходимая степень коллимации определяется условием:

$$\Delta\theta = \frac{\pi\hbar\Delta\upsilon}{\upsilon^2 m_n a\cos\theta'} \qquad (2)$$

где Δυ – разброс скоростей после монохроматизации, d – толщина бислоя, $\hbar$ – постоянная Планка, m_n – масса нейтрона. Полагая Δυ = 2 м/с, получаем Δθ = 5.4°. Поскольку

коллимация требуется лишь по одному направлению, возможно применение обычного многощелевого коллиматора.

Численное моделирование брэгговского монохроматора показало, что после монохроматизации доля нейтронов с продольными компонентами скоростей 20 $\pm$ 1 м/с по отношению к доле таких же нейтронов в исходном спектре уменьшается на порядок.

Было проведено сравнение предлагаемого подхода с подходом на основе механической селекции скоростей [4]. Было показано, что при той же степени коллимации степень монохроматизации в случае использования селектора скоростей оказывается в два раза хуже.

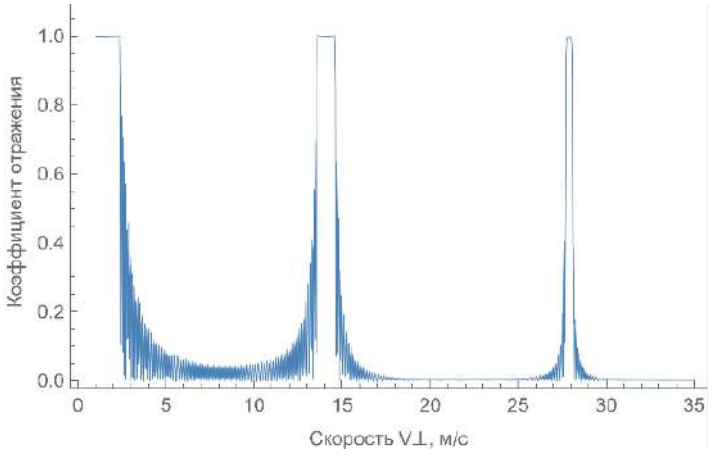

Рис. 1. Коэффициент отражения брэгговского зеркала в зависимости от компоненты скорости, нормальной к его поверхности.

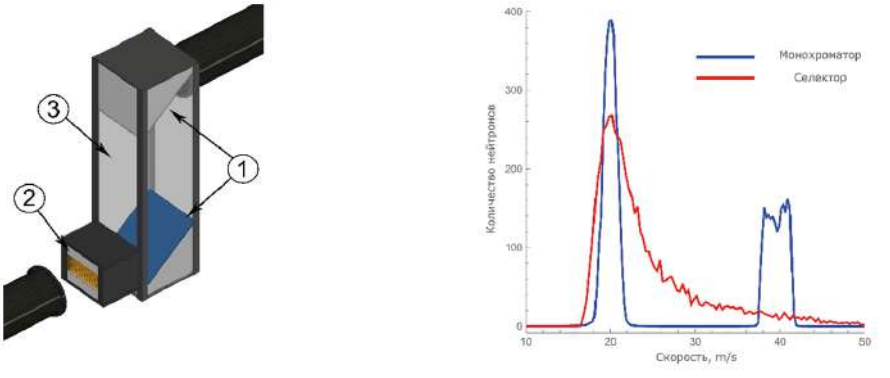

Рис. 2. 3D дизайн брэгговского монохроматора: 1 - брэгговские зеркала, 2 -многощелевой коллиматор, 3 - вертикальный нейтроновод из плоских никелевых зеркал (слева); распределение нейтронов после прохождения монохроматора или селектора (справа).

1. А. И.Франк, Г. В. Кулин, М. А. Захаров, Письма в ЭЧАЯ **20 (4)**, 664 – 667 (2023).
2. R. Golub, D. Richardson, S. K. Lamoreaux, Ultra-cold neutrons, Adam Hilger, New York, (1991).
3. Т. Кылышбек, Диссертация на соискание степени доктора философии (PhD), (2022).

Устный доклад

АВТОМАТИЗАЦИЯ УПРАВЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОМ ОБОРУДОВАНИЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО МАГНИТА

А. В. Алтынов, А. Н. Черников*

ОИЯИ, Дубна, Россия
*E-mail: altbady@jinr.ru

Для дифрактометра ДН-12 реактора ИБР-2 в отделе комплекса спектрометров создан сверхпроводящий магнит в виде пары Гельмгольца с максимальным полем 4.77 Тл при токе 300 А с использованием материала, обладающего свойством высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Криостат магнита имеет горизонтальную шахту для загрузки камеры высокого давления, которая вводится в зону высокого магнитного поля. Температура камеры высокого давления может изменяться при помощи электрического нагревателя в диапазоне (3.6 – 150) К, а сама камера охлаждается криокулером замкнутого цикла в составе криостата-вставки, который вводится в шахту вместе с камерой высокого давления. Температура обмоток магнита устанавливается в диапазоне 20 – 40 К и поддерживается криокулером замкнутого цикла.

Комплекс управления магнитом был разработан для сверхпроводящего магнита с шахтным криостатом. В состав комплекса оборудования обеспечения работы магнита входят криокулеры замкнутого цикла, источник тока на 300 А, вакуумный пост, контрольно-измерительная аппаратура. Подача и отключение питания аппаратуры комплекса объединено в шкафу управления. Реализована логика последовательного включения элементов комплекса. Включение аппаратуры вне рабочих параметров невозможно. Аппаратура окружения сверхпроводящего магнита обеспечивает такие параметры магнита, как магнитная индукция, температура ВТСП катушки и токопроводов в криостате. Ядром системы является источник тока и два криокулера. Последовательность включения всех элементов окружения выполнена таким образом, чтобы предотвратить работу аппаратуры магнита вне безопасного диапазона температур и предотвратить его непроизвольный переход в нормальное состояние, в этом случае обеспечивается аварийное снятие тока с ВТСП катушки.

Переключение режимов управления «ручной» и «автоматический» может производиться без отключения питания комплекса. Вывод информации на компьютер пользователя осуществляется по интерфейсу RS485.

Устный доклад

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОЙ И АППАРАТНОЙ ЧАСТИ ДЛЯ ВРЕМЯПРОЛЕТНОГО 2-КООРДИНАТНОГО НЕЙТРОННОГО ДЕТЕКТОРА

И. С. Бредихин

ООО «Гамматек»
+7 905 765 00 09
*E-mail: ivan@gammatech.pro

Современные эксперименты в области ядерной физики требуют высокоточной регистрации и обработки сигналов с детекторов. Диджитайзеры играют ключевую роль в создании автономных измерительных комплексов, обеспечивая необходимую точность и надёжность. Сложность экспериментов приводит к появлению всё новых требований к цифровой электронике не только по скорости оцифровки, но и по всё усложняющейся обработке данных.

Одной из таких задач является 2D-нейтронная времяпролетная спектрометрия, для реализации которой требуется оцифровывать и корреляционно обрабатывать в режиме времени на ПЛИС более 5 каналов с частотой событий более 105 имп/сек по каждому каналу. Такой функционал был разработан и реализован на базе диджитайзеров D125-16, что позволило достичь пространственного разрешения в 2 мм с точностью определения меток времени события на уровне 1 нс. Будут описаны детали технической реализации программно-аппартаной части.

Отдельная часть доклада будет уделена обзору линейки моделей диджитайзеров от ООО «Диджитайзер», их техническим характеристикам, алгоритмам потоковой обработки данных, реализуемым на уровне прибора, а также, и их применению в экспериментах, включая спектроскопию, измерения методом времени пролёта (TOF режим), регистрацию парных событий.

Таблица 1. Таблица сравнения ключевых параметров и областей применения диджитайзеров

Модель	Каналов	МВыб/с	Бит	Применение
МКА-250	2	250	16	Спектроскопия & работа в режиме МКА
D125-16A	16	125	14	Спектроскопия & работа в режиме МКА. Продвинутая обработка (усиление, форма)
D500-4/8/16	4 / 8 / 16	500	14	Средне-быстрые детекторы, суб-нс времена вместе с хорошим разрешением по энергии
D1000-2/4	2 / 4	1000	16	Сверхбыстрые детекторы (алмазные, MPCs, SiPMs). Изучение процессов с пикосекундным разрешением

Устный доклад

НЕЙТРОННЫЙ ФУРЬЕ-СТРЕСС-ДИФРАКТОМЕТР ФСД НА РЕАКТОРЕ ИБР-2: РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕРНИЗАЦИИ

Г. Д. Бокучава, И. В. Папушкин, А. А. Богдзель, Е. И. Литвиненко, В. М. Милков, М. М. Подлесный*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
+7 905 765 00 09
*E-mail: Gizo.Bokuchava@jinr.ru

В докладе представлены результаты модернизации нейтронного фурье-стресс-дифрактометра ФСД на импульсном реакторе ИБР-2 в ОИЯИ (г. Дубна), проведённой в 2022–2025 гг. В рамках модернизации установлены новые модули детекторов АСТРА (14 шт.) при углах рассеяния $2\theta = \pm 90°$, что позволило увеличить телесный угол детекторной системы примерно в два раза по сравнению с предыдущей конфигурацией. После возобновления работы реактора ИБР-2 в 2025 г. были выполнены юстировка и настройка детекторов, а также проведены тестовые измерения для оценки их характеристик. Полученные значения разрешения составили $\Delta d/d \approx 2.3\times10^{-3}$ для детектора обратного рассеяния BS и $\Delta d/d \approx 4.5\times10^{-3}$ для детекторов АСТРА при d = 2 Å и максимальной скорости вращения прерывателя Ω_{max} = 6000 об/мин. Также внедрена новая система сбора данных на основе дигитайзера CAEN DT5560SE, работающая в режиме list-mode. По сравнению с предыдущей системой на базе блоков МПД, дигитайзер CAEN обеспечивает более высокую точность регистрации сигналов за счёт уменьшенного времени дискретизации (8 нс) и большей емкости нового формата «сырых» данных (64 бита). Результаты тестовых экспериментов показали, что использование дигитайзера для накопления данных позволяет увеличить интенсивность спектров примерно в 1.5 раза за счет лучшего алгоритма обработки сигналов детектора и выбора оптимальных параметров.

Устный доклад

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННОГО ЛИНЕЙНОГО НЕЙТРОННОГО СЧЕТЧИКА С ОРГАНИЧЕСКИМ ОТРАЖАТЕЛЕМ НЕЙТРОНОВ

Д. А. Бучный[1]*, *В. С. Литвин*[1,2], *Д. Н. Трунов*[1], *В. Н. Марьин*[1], *С. Н. Аксенов*[1], *Р. А. Садыков*[1]

[1]Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия
[2]Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия
*E-mail: buchnyy@inr.ru

В ИЯИ РАН разработаны линейные сцинтилляционные счетчики нейтронов на основе ZnS(Ag)/^{6}LiF и твердотельных фотоумножителей [1]. Сочетание компактности, технической простоты и эффективности регистрации потоков нейтронов данными приборами позволяет объединять их в массивы детекторов, регистрирующие одновременно множество дифрактограмм в широком диапазоне переданных импульсов при порошковой времяпролетной дифракции нейтронов.

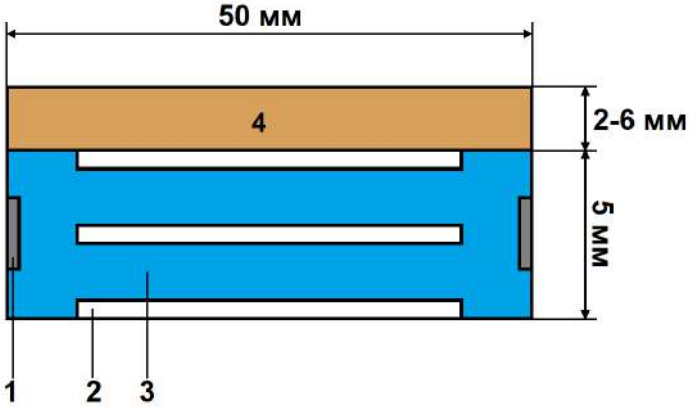

Рис. 1. Конструкция линейного счетчика нейтронов: 1 – кремниевый фотоумножитель, 2 – пластина ZnS(Ag)/^{6}LiF сцинтиллятора, 3 – ПММА-световод, 4 – пластина-отражатель.

В данной работе построена Монте-Карло модель линейного сцинтилляционного нейтронного счетчика [2] и рассмотрена возможность модернизации его посредством добавления пластины органического материала на тыловой стороне счетчика, которая выступает в качестве дополнительного рассеивателя-отражателя нейтронов (Рисунок 1). Проведено численное исследование для оптимизации геометрии прибора и аттестации его рабочих характеристик как составляющей блока детекторов нового порошкового дифрактометра ИЯИ РАН, в т.ч. модельный эксперимент по рассеянию потока тепловых нейтронов на эталонном образце поликристаллического алмаза с целью оценки разрешающей способности возможной экспериментальной установки, которая может достигать 2% при угле дифракции 150°. Также проведен сравнительный анализ нескольких вариантов конструкции счетчика с варьированием числа и эффективности слоев сцинтиллятора на основе ZnS(Ag)/^{6}LiF, направленный на снижение затрат сцинтилляционного материала при минимальных потерях в эффективности регистрации нейтронов. Во всех случаях пластина-отражатель из ПММА дает выигрыш числа поглощаемых в слоях сцинтиллятора нейтронов, значение которого составляет 7 – 12% относительно изначального для длин волн нейтронов близких к 1Å.

1. В.Н. Марин и др., Письма в ЖТФ Т. **41** (18), 96 – 101 (2015).
2. Д.А. Бучный и др., Поверхность **12**, 38 – 47 (2022).

Устный доклад

ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ DARIA ДЛЯ ИНДУСТРИАЛЬНОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Н. А. Григорьева[1]*, *Н. А. Коваленко*[2,3], *С.В. Григорьев*[2,3]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[3]Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова НИЦ «КИ», Гатчина, Россия
*E-mail: n.a.grigorieva@yandex.ru

Исследование тонких пленок или многослойных структур методом нейтронной рефлектометрии (НР) одновременно дает информацию о пространственном распределением ядерной плотности вещества и о профиле намагниченности вдоль нормали к поверхности (зеркальное отражение) или в плоскости пленки (незеркальное отражение). Иными словами, из НР экспериментов получают значения толщины слоев, величину и пространственное распределение намагниченности в каждом слое, динамику изменения в структуре магнитных доменов, корреляцию шероховатости между слоями и флуктуации магнитной структуры вблизи интерфейса, то есть характеристики пленок, определяющие их индустриальное применение.

В классической схеме НР, при углах скольжения нейтронного пучка на образце $\theta = 1 \div 30$ мрад и длине волны нейтрона в несколько ангстрем, величина переданного импульса составляет $Q = 10^{-3} \div 10^{-1}$ Å^{-1}, что обеспечивает пространственное разрешение от 1 до 100 нм. В работе рассматриваются два рефлектометра, работающих по времени пролета нейтронов заданной спектральной ширины, для компактного источника нейтронов DARIA (Dedicated for Academical Research and Industrial Application) [1] на мишенных сборках с тепловым замедлителем нейтронов с нейтронным спектром от 0.5 до 4 Åи потоком $\Phi = 3.86 \times 10^8$н·см$^{-2}$с$^{-1}$ и составным замедлителем (водный предзамедлитель + мезитиленовый криогенный блок) для производства тепловых и холодных нейтронов со спектром λ от 0.5 до 10 Åи потоком $\Phi = 5.86 \times 10^8$ н·см$^{-2}$с$^{-1}$. В программном пакете McStas [2] разработаны полные математические модели обеих установок [3]. Показано, что при заданном относительном разрешении рефлектометров по переданному импульсу $\Delta q/q$:

$$\Delta q/q = ([\Delta L/L]^2 + [\tau/T_\lambda]^2 + [\Delta\theta/\theta]^2)^{1/2},$$

включающему $\Delta L/L$ — относительное разрешение при измерении длины времяпролетной базы, τ/T_λ — разрешение по времени пролета нейтронов и $\Delta\theta/\theta$ — разрешение по углу отражения, поток нейтронов на образце составляет $\Phi = 5.13 \cdot 10^4$ н/сек/см^2 для рефлектометра с тепловым предзамедлителем (L = 8 м) и $\Phi = 3.91 \cdot 10^4$ н/сек/см^2 для рефлектометра с криогенным замедлителем (L = 14 м), что сравнимо с потоками на реальных рефлектометрах, работающих на импульсных источниках нейтронов средней мощности.

Предложенная схема времяпролетных рефлектометров позволяет решать широкий круг задач по исследованию тонких пленок и многослойных структур. В работе рассматриваются типичные примеры рефлектометрических исследований, сделанных на импульсных источниках нейтронов средней мощности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No.075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

1. К. А. Павлов, П. И. Коник, Н. А. Коваленко, и др., Кристаллография **67**, 1, 5 – 20 (2022).
2. P. K. Willendrup, K. Lefmann, Journal of Neutron Research **22**, 1, 1 – 16 (2020).
3. Н. А. Григорьева, Н. А. Коваленко, С. В. Григорьев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **12**, 114 – 129 (2024).

Устный доклад

КОМПЛЕКС ТРЕХОСНЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ НА РК ПИК

М. Х. Юзвюк, О. В. Усманов, И. А. Зобкало*

НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: yuzvyuk_mh@pnpi.nrcki.ru

Метод трехосной спектроскопии даёт возможность изучать динамику кристаллической решетки, магнитные возмущения, природу фазовых переходов, а также влияние различных внешних факторов, таких как давление, температура, поля, на динамику решётки и другое. Основное преимущество этого метода заключается в возможности настройки спектрометра для измерений в любой точке обратного пространства или пространства энергия-импульс.

На высокопоточном реакторе ПИК в г. Гатчина планируется размещение комплекса трехосных спектрометров, который включает в себя 3 установки:

1. Трехосный спектрометр тепловых нейтронов IN1;
2. Трехосный спектрометр холодных нейтронов IN2;
3. Трехосный спектрометр поляризованных нейтронов IN3.

Основные параметры трех установок приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры трехосных спектрометров на реакторе ПИК.

	IN1	**IN2**	**IN3**
Энергетический диапазон E_i, мэВ	15 – 100	2.3 – 36	15 – 100
Монохроматор, двойной фокусирующий	HOPG(002), Ge(220), Si(111)	HOPG(002), Si(111)	HOPG(002)
Анализатор, двойной фокусирующий	HOPG(002), Si(111)		HOPG(002)
Энергетическое разрешение ΔE	0.8; 3 мэВ	$\leq$ 25 мкэВ	$\leq$ 0.8 мэВ
Поляризация нейтронов	–	$\geq$ 95 % (опция)	$\geq$ 95 %
Сечение пучка на позиции образца, мм^2	10×10 ÷ 30×30		
Интенсивность пучка на позиции образца, н/с/см^2	$\sim 1.0 \cdot 10^9$ при E_i = 36 – 80 мэВ)	$\sim 2.0 \cdot 10^8$ при E_i = 2.3 мэВ)	$\sim 1.1 – 4.1 \cdot 10^8$ при E_i = 36 – 80 мэВ)

Спектрометр IN1 предназначен для исследования неупругого рассеяния нейтронов на коллективных возбуждениях в твердом теле. Научные задачи:

- Исследование фононов, магнитных возбуждений;
- Изучение критических явлений вблизи фазовых переходов (ФП) в материалах с различным типом упорядочения;
- Изучение влияния внешних факторов на природу фазовых переходов и динамику решетки;

• Разделение рассеяния от коллективных возбуждений и от медленно релаксирующих кластеров с ближним порядком.

Спектрометр IN2 предназначен для исследований с высоким разрешением низкоэнергетических возбуждений в твердых телах. Типичными приложениями являются исследования сложных магнитных структур и динамики. Научные задачи:
• Исследования динамики кристаллической и магнитной решетки;
• Спектры магнитных возбуждений;
• Критическое рассеяние и явления, связанные с фазовыми переходами;
• Слабые статические магнитные моменты ($10^{-2}\mu_B$);
• Магнитные многослойные структуры;
• Исследования низколежащих уровней кристаллического поля (CEF);
• Отделение неупругого от квазиупругого рассеяния;
• Исследование спиновых волн в квантовых спиновых системах или энергии возбуждений в сильно коррелированных электронных системах.

Спектрометр IN3 ориентирован на разделение магнитных и кристаллических возбуждений при энергиях до 100 мэВ, что очень важно для исследований соединений со взаимодействующими параметрами порядка, эффективное решение задач для ситуаций, когда магнитные и решеточные возбуждения близки по энергии или импульсу. Научные задачи:
• Исследования динамики кристаллической и магнитной решетки;
• Спектры магнитных возбуждений;
• Критическое рассеяние и явления, связанные с фазовыми переходами;
• Магнитные многослойные структуры;
• Отделение неупругого от квазиупругого рассеяния;
• Исследование спиновых волн в квантовых спиновых системах или энергии возбуждений в сильно коррелированных электронных системах;
• Исследования соединений с малыми размерами и сложной схемой магнитных взаимодействий, спин-решеточных взаимодействий.

Устный доклад

УЧЕТ ФОНА В НЕЙТРОННОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ С 2D ПОЗИЦИОННО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ ДЕТЕКТОРОМ

Н. Н. Исакова[1]*, *А. И. Калюканов*[1], *И. П. Макарова*[2] , *В. Т. Эм*[1]

[1]Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия
[2]Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

*E-mail: Isakova_NN@nrcki.ru

При работе с нейтронным монохроматическим пучком нейтронов есть ряд особенностей, которые следует учитывать, как при постановке эксперимента, так и при обработке данных. В том числе низкая интенсивность излучения, по сравнению с рентгеновским или синхротронным излучением. Это приводит к низкой интенсивности дифракционных отражений, при интенсивность дифракционных максимумов может быть настолько мала, что стандартные методы обработки данных не будут включать их в кристаллографические расчеты. Однако определение интегральных интенсивностей слабых дифракционных отражений и включение их в расчеты также важно, поскольку они содержат информацию для структурного анализа.

Два важных параметра, которыми можно охарактеризовать дифракционные отражения, – это соотношение сигнал/фон и соотношение $I/\sigma(I)$, где I – интегральная интенсивность отражения, а σI – стандартное отклонение этой величины. Учет фона в экспериментальных данных позволяет повысить соотношение $I/\sigma(I)$ для слабых отражений и включить их интегральные интенсивности в последующую обработку данных.

Разработана методика учета фона, которая позволяет при работе с позиционно- чувствительным детектором в условиях высокого фона и низкой интенсивности дифракционных максимумов включить в структурный анализ отражения с первоначальной оценкой $I/\sigma(I) < 3$, не искажая их интегральные интенсивности.

Методика учета фона, заключается в получении карты распределения фона по усредненным значениям для каждого пикселя детектора, после чего эти значения вычитаются из экспериментальных данных. Кроме того для снижения разброса значений в каждой точке применяется сглаживание данных методом скользящего среднего, адаптированного к двумерному массиву данных. Результат такой обработки данных показан на Рис.1. Данная методика позволяет сохранить интегральные интенсивности дифракционных отражений и при этом увеличить отношение интегральных интенсивностей к стандартному отклонению $I/\sigma(I)$.

Предложенная методика была апробирована на экспериментальных данных, полученных на станции МОНД реактора ИР-8 (НИЦ КИ) [1]. На станции МОНД были получены кристаллографические данные для монокристалла $Cs_4(HSO_4)_3(H_2PO_4)$.

Эти монокристаллы являются представителями семейства суперпротоников $MmHn(AO_4)(m+n)/2{\cdot}yH_2O$ (M = K, Rb, Cs, NH_4; AO_4 = SO_4, SeO_4, HPO_4, $HAsO_4$) [2]. После применения разработанной методики удалось включить в массив экспериментальных данных значительное количество слабых отражений, не учтенных при первом уточнении структуры, и существенно повысить точность измерений интенсивности дифракционных отражений [3].

После учета фона и применения фильтрации шумов количество независимых отражений, использованных для структурного анализа, увеличилось в ~1.8 раза: 525 неза-

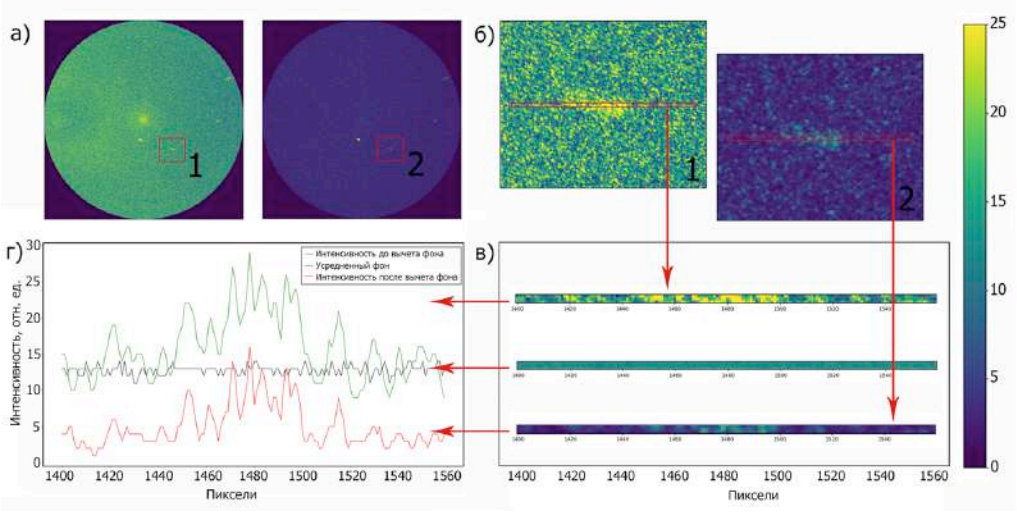

Рис. 1. Зарегистрированный фрейм до вычета фона (слева) и после (справа) (*а*); область отражения до вычета фона (слева) и после (справа) (*б*); профиль отражения до вычета фона, усредненный фон и профиль отражения после вычета фона (*в, г*).

висимых отражений на 106 уточняемых параметров по сравнению с 293 отражениями первоначально.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ "Курчатовский институт". Экспериментальные нейтронографические исследования проведены на оборудовании УНУ НИК ИР-8.

1. А. И. Калюканов, Н. Н. Исакова, Тез. докл. конф. по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред. Екатеринбург, (2023)..
2. I. Makarova, V. Grebenev, E. Dmitricheva et al, Acta Cryst. B. **72**, 133 (2016).
3. I. P. Makarova, N. N. Isakova, A. I. Kalyukanov et al, Acta Cryst. B. **80**, 201 (2024).

Устный доклад

ПРОЕКТ МОДЕРНИЗАЦИИ СТАНЦИИ НЕЙТРОННОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ «ДРАКОН» НА РЕАКТОРЕ ИР–8

А. И. Калюканов, М. М. Мурашев*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: Kalyukanov@mail.ru

Многоцелевая станция нейтронной визуализации «ДРАКОН» [1] расположена на горизонтальном пучке тепловых нейтронов на реакторе ИР-8 и является универсальным инструментом неразрушающего исследования и контроля во многих областях науки: физике, биологии, материаловедении, инженерии, археологии и науках о земле [2]. Прибор предназначен для визуализации макроструктуры объектов методами нейтронной радиографии и томографии с субмиллиметровым пространственным разрешением. Станция является единственным прибором в России и одним из восьми приборов в мире, где реализована возможность использования монохроматического нейтронного излучения в широком диапазоне длин волн. Станция «ДРАКОН» с 2016 года успешно работает в пользовательском режиме и входит в состав Уникальной научной установки нейтронного исследовательского комплекса ИР-8 (УНУ НИК ИР-8).

Доклад посвящен разработке проекта модернизации и математическому моделированию [3] существующей станции нейтронной визуализации «ДРАКОН». Представлены результаты по улучшению пространственного разрешения и увеличения размера пучка нейтронов на месте образца без значительного снижения потока нейтронов.

1. В. А. Соменков и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **9**, 93 (2019).
2. N. Kardjilov at all., Materials Today **21**, 652 (2018).
3. K. Lefmann and K. Nielsen, Neutron news **10**, 20 (1999).

ИСТОЧНИК ОХН НА ИБР-2 КАК НАЧАЛЬНЫЙ ЭТАП СОЗДАНИЯ ИСТОЧНИКА УХН

А. И. Франк, Г. В. Кулин, А. А. Попов, В. А. Курылев, В. С. Шпилевская, М. А. Захаров*

Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия
*E-mail: kulin@jinr.ru

В ЛНФ ОИЯИ на 3-канале реактора ИБР-2 планируется создать источник ультрахолодных нейтронов (УХН) высокой яркости [1]. В основе концепции планируемого источника лежит принцип импульсного накопления нейтронов, позволяющий получить значительный выигрыш в плотности нейтронного газа в материальной ловушке. Для сохранения импульсной структуры потока нейтронов в процессе их транспортировки, что абсолютно необходимо для осуществления принципа импульсного накопления, предложено получать УХН путём замедления более быстрых, очень холодных нейтронов (ОХН) непосредственно перед ловушкой магниторезонансным устройством, градиентным спин-флиппером [1, 2]. Зеркальный нейтроновод должен транспортировать ОХН от конвертора к флипперу-замедлителю, сохраняя их продольную скорость, при этом возникают довольно жесткие требования к поверхности нейтроновода.

Было принято решение на первом этапе на месте расположения будущего источника УХН до конца 2027 года создать источник-прототип, тестовый источник ОХН. В главный чертах его конструкция будет иметь много общего с конструкцией проектируемого источника УХН, позволяющих проверить правильность предлагаемых для последнего технических решений. При этом тестовый источник ОХН будет иметь ряд важных отличий, упрощающих его создание, в частности, будет отсутствовать флиппер-замедлитель.

Рис. 1. Схема источника-прототипа, тестового источника ОХН.

В отличие от основного источника, где планируется использовать жидководородный конвертор, в источнике-прототипе планируется использовать криогенный конвертор на основе мезитилена, не требующий принятия сложных мер безопасности.

Для подавления фона нейтронов со скоростями выше 50 м/с планируется использовать комбинацию прерывателя пучка с S-образным нейтроноводом. Так как предполагается иметь дело со средним во времени потоком нейтронов, то к внутренней поверхности нейтроновода тестового источника не будет предъявляться столь жестких

требований как к нейтроноводу источника УХН. В качестве нейтроновода предполагается использовать шлифованные и по возможности полированные нержавеющие трубы внутренним диаметром 110 мм.

Создание тестового источника на 3-канале реактора ИБР-2 потребует создания соответствующей инженерной инфраструктуры, обеспечивающей возможность перемещения источника из рабочего в дежурное положение с закрытым шибером. Схожая инженерная инфраструктура будет необходима для основного источника.

Для проведения экспериментальных исследований канал тестового источника УХН планируется оснастить монохроматором на основе многослойных брэгговских зеркал, а также прерывателем для возможности проведения времяпролетных измерений. Монохроматор позволит сформировать пучок нейтронов с продольными компонентами скоростей $v = 20 \pm 1$ м/с.

С источником-прототипом ожидается получить умеренный поток ОХН и УХН, что позволит выполнить большой объем физических экспериментов по отработке элементов будущего источника. В частности, планируется провести ряд экспериментальных исследований позволяющих выбрать материал нейтроновода для планируемого источника УХН, обеспечивающий необходимые временные характеристики транспорта ОХН.

Источник-прототип будет работать в течение относительно длительного периода работы над проектом и в конце будет заменен основным источником. Наличие такого источника позволит получить первый практический опыт работы с нейтронами молодежной части группы, которой предстоит построить источник УХН и начать на нем физические исследования. При достаточных потоках ОХН ряд физических исследований с ними можно начать и на тестовом источнике.

1. A.I. Frank, G.V. Kulin, M.A. Zakharov et al. arXiv:2412.06460; PEPAN Vol. 56, issue 5 (2025) в печати.
2. A. A. Popov, K. S. Osipenko, V. I. Scherbakov et. al. arXiv:2503.10878.

ДЕТЕКТОР НЕЙТРОНОВ НА ОСНОВЕ ФОТОДИОДА С КОНВЕРТОРНЫМ БОРСОДЕРЖАЩИМ СЛОЕМ

В. В. Матюхов[1,2]*, *А. В. Ищенко*[2], *Ю. А. Саламатов*[1], *М. В. Макарова*[1], *В. С. Андреев*[2], *Л. В. Викторов*[2], *Е. А. Кравцов*[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*E-mail: vvmatyukhovimpuran@yandex.ru

В современных ядерных технологиях и радиационном мониторинге важную роль играют детекторы нейтронов, обеспечивающие надежное и точное измерение потока частиц. Одним из перспективных направлений является разработка детекторов на основе кремниевых фотодиодов с борсодержащим конверторным слоем [1,2]. Однако, на сегодняшний день в литературе имеется лишь несколько работ по данному направлению исследований.

В данной работе представлены результаты разработки детектора нейтронов на основе серийного кремниевого фотодиода ФД-20-30К, на поверхность кристалла которого нанесены конверторные слои из карбида бора и нитрида бора (B_4C и BN).

Нанесение покрытий производилось методом импульсного лазерного осаждения при комнатной температуре подложки. Абляция борсодержащих мишеней с природным изотопным составом осуществлялась с использованием твердотельного лазера с активной средой из алюмоиттриевого граната, легированного неодимом, на второй гармонике с длиной волны 532 нм и длительностью импульса 10 — 12 нс. Кристалличность структуры и качество поверхности полученных покрытий анализировались методами рентгеновской дифракции и рентгеновской рефлектометрии. Фотодиод с конверторными слоями подключался к зарядочувствительному малошумящему предусилителю и цифровому спектрометру «СПЕКТР-1». Источник нейтронов на основе изотопа ^{252}Cf помещался в сборку из полиэтиленовых замедлителей и располагался рядом с фотодиодом. Дополнительно проводились эксперименты с источниками гамма- (^{241}Am, ^{57}Co, ^{152}Eu, ^{228}Th, ^{60}Co, ^{137}Cs) и альфа-излучения (239Pu) для оценки энергетического диапазона чувствительности детектора. Измерения проведены на фотодиодах без покрытия и с покрытием из B_4C и BN.

Установлено, что напыленные на поверхность фотодиодов покрытия из карбида бора и нитрида бора имеют толщину порядка 50 нм. Рентгенодифракционный анализ покрытий показал, что нитрид бора имеет гексагональную структуру, в то время как карбид бора оказался рентгеноаморфным – дифракционные пики от него отсутствуют. Эксперименты с источником нейтронов показали, что фотодиоды с конверторными борсодержащими слоями способны регистрировать нейтронное излучение. Полученные спектры (рис. 1) согласуются с результатами работы [3], в которой использовался детектор типа «метал-полупроводник-метал» (MSM-структура).

В результате проведенных работ показано, что представленный в работе способ регистрации ионизирующих излучений может быть использован для создания позиционно-чувствительных детекторов нейтронов на основе матриц кремниевых фотодиодов с борсодержащими конверторными слоями.

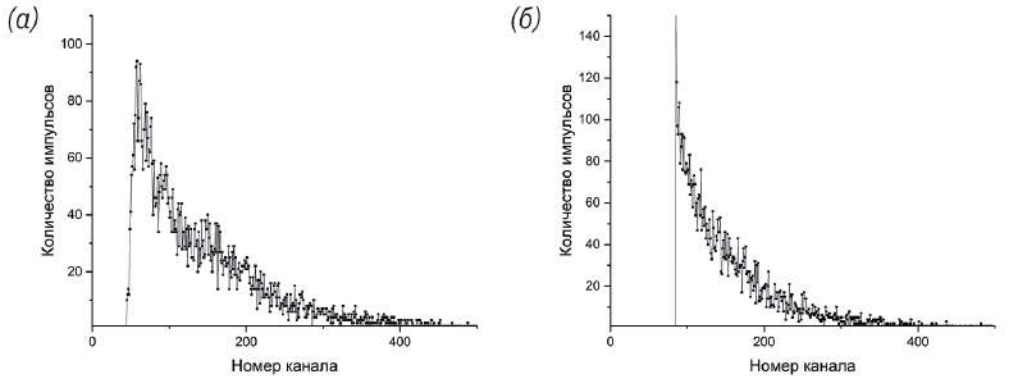

Рис. 1. Спектры, полученные при регистрации излучения изотопа ^{252}Cf фотодиодами с покрытием из BN (*а*) и B_4C (*б*).

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 5 июня 2025 г.

1. K. H. Kang, H. B. Jeon, G. N. Kim, et al. Journal of the Korean Physical Society, **65**, 1374–1378 (2014).
2. P. Chaudhari. A. Singh, A. Topkar, R. Dusane. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **779**, 33–38 (2015).
3. S. Hasan, I. Ahmad. Electron. Meter. **3**, 235–251 (2022).

Устный доклад

НЕЙТРОННЫЙ ГЕНЕРАТОР НА БАЗЕ КАМЕРЫ ИНЕРЦИАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО УДЕРЖАНИЯ ПЛАЗМЫ

И. А. Прокуратов, Ю. В. Михайлов, Б. Д. Лемешко, И. В. Ильичев, Е. Д. Зяблицева*

1Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»), Москва, Россия
*E-mail: YuVMikhaylov@vniia.ru

Системы инерциального электростатического удержания плазмы (ИЭУП) являются одними из распространенных установок, в которых реализуются реакции ядерного синтеза для решения различных прикладных задач. При использовании реакций на изотопах водорода для получения непрерывных потоков нейтронного излучения с констролируемыми параметрами в данном подходе реализуются режимы с газоплазменной нейтронобразующей мишенью и осциллирующими через нее ускоренными ионами, что позволяет обеспечивать стабильность и высокий ресурс работы [1].

В докладе представлены результаты исследований газоразрядной камеры ИЭУП, используемой в качестве излучателя нейтронов. Приводятся основные характеристики разряда, реализуемые на практике и позволяющие получать рабочие режимы с различными нейтронными потоками вплоть до 10^8 нейтр./с. Рассмотрена работа камеры ИЭУП в составе лабораторного макета нейтронного генератора. В ходе испытаний реализованы стабильные рабочие режимы с периодами непрерывной работы от 6 до 9 часов с генерацией нейтронного излучения со средним нейтронным потоком $(1{,}0 \div 1{,}7)\cdot 10^8$ нейтр./с, продемонстрирована стабильная работа в течение длительных промежутков времени.

На основе проведенных исследований и экспериментальных результатов [2] разработан нейтронный генератор с излучателем нейтронов на базе камеры ИЭУП.

1. Neutron Generator System Design Report for Zurich University Neutron Facility. NSD-Fusion Tech. Note NSD-188 Issue 1, Version C 8-1-2010 for Christian Regenfus, University of Zurich. CERN. 2010.
2. I.A. Prokuratov, Yu.V. Mikhailov, B.D. Lemeshko, I.V. Il'ichev, A.K. Dulatov and O.D. Tupina Inertial electrostatic plasma confinement chamber as a source of continuous neutron flux with an energy of 14 MeV. XXXIX Fortov International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2024). March 1 – 6, 2024, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia.

Устный доклад

УСТАНОВКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КРУПНОМАСШТАБНЫХ СТРУКТУР НА КОМПАКТНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ

К. А. Павлов[1]*, *Н. А. Григорьева*[2], *С. В. Григорьев*[1]

[1]НИЦ «Курчатовский институт» — Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина, Россия
[2]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*E-mail: fairy.neutrons@yandex.ru

В рамках разработки приборного парка компактного нейтронного источника DARIA [1,2], предложена концепция двух комплементарных установок для исследования крупномасштабных структур, реализующих методы малоуглового рассеяния нейтронов и нейтронной рефлектометрии и, при этом, адаптированных к работе на одном источнике. Под компактным понимается источник нейтронов, реализованный на низкоэнергетичном (до 13 МэВ) сильноточном (до 100 мА) протонном ускорителе и бериллиевой мишени. Такой источник принадлежит к среднему, либо слабому, классу по светосиле и позволяет разместить лишь несколько (< 10) установок нейтронного рассеяния.

Для установки малоуглового рассеяния нейтронов МУРЕНА ранее была разработана полная математическая модель [3] в программном пакете McStas [4], причем в качестве входных данных использован расчётный спектр холодного замедлителя и проектные параметры установки КИН DARIA, подробно описанные в [1,2]. В дополнение предложен рефлектометр неполяризованных нейтронов низкого разрешения с вертикальной плоскостью рассеяния, для которого заданы временные и спектральные характеристики источника, определённые как оптимальные для метода малоуглового рассеяния – установки МУРЕНА. Прототипом такой установки может служить времяпролётный режим работы рефлектометра РЕВЕРАНС [5].

Для математических моделей обеих установок, разработанных в программном пакете McStas, получены оценки светосилы в позиции образца, подтверждающие возможность реализации обоих методов в условиях компактного источника. Для верификации результатов для обеих установок также проведено численное моделирование эксперимента на простых системах – малоугловое рассеяние нейтронов на растворе твёрдых шаров заданного радиуса и отражение нейтронов на многослойной структуре с заданным периодом для рефлектометрии.

Дальнейшее развитие проекта КИН DARIA заключается в создании источников, однотипных по мощности ускорителя и нейтрон-производящей мишени, но с различным набором установок, зависящим от области применения. Параметры каждого конкретного источника при этом адаптируются, исходя из оптимума условий для проектируемого набора инструментов. Описанная пара установок малоуглового рассеяния и рефлектометрии применима, к примеру, на источнике, создающемся для нужд фундаментальной физики твёрдого тела, либо специализированного для биофизики, химии, исследования жидкостей и полимеров. Для установки МУРН в обоих случаях необходимы детектор с полноценным двумерным пространственным разрешением, а для физики твердого тела (область магнетизма) необходимо сконструировать поляризующую опцию. Предложенная схема рефлектометра отвечает требованиям «биологической» версии источника, благодаря горизонтальной плоскости позиционирования образца,

а в «твердотельной» вариации будет востребована в исследованиях приповерхностных слоёв за счёт сравнительно высокой интенсивности пучка для рассеяния в широкоугольном диапазоне.

1. К. А. Павлов, П. И. Коник, Н. А. Коваленко, Т. В. Кулевой, Д. А. Серебренников, В. В. Субботина, А. Е. Павлова, С. В. Григорьев, Кристаллография **67**, 1, 5–20 (2022).
2. С. В. Григорьев, Н. А. Коваленко, К. А. Павлов, Е. В. Москвин, В. Г. Сыромятников, Н. А. Григорьева, Известия РАН **87**, 11, 1526–1533 (2023).
3. К. А. Павлов, Н. А. Коваленко, Л. А. Азарова, Е. А. Кравцов, Т. В. Кулевой, С. В. Григорьев, Поверхность **7**, 1–9 (2023).
4. P. K. Willendrup, K. Lefmann, Journal of Neutron Research **22**, 1, 1–16 (2020).
5. В. Н. Забенкин, Л. А. Аксельрод, Г. П. Гордеев, Г. П. Диденко, И. М. Лазебник, Поверхность **3**, 31–33 (2018).

Устный доклад

ПРИКЛАДНОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ФКС ПРИБОРОВ ПРИБОРНОЙ БАЗЫ РК ПИК

*В. А. Поляков**, *К. А. Пшеничный*

ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: polyakov_va@pnpi.nrcki.ru

В рамках создания приборной базы реакторного комплекса «ПИК» создаются 18 научных станций для исследования в области физики конденсированного состояния (ФКС приборы) и 7 научных станций для исследований в области ядерной физики.

Для удаленного управления ФКС приборами выбрана сетевая система управления NICOS, написанная изначально в нейтронном центре Майера-Лейбница (Гархинг, Германия) для приборов нейтронного рассеяния. Система управления NICOS позволяет удаленно управлять научными приборами как через интерактивные интерфейсы (графический интерфейс, командная строка), так и через систему скриптов. Пользовательские скрипты NICOS пишутся на языке Python. Этот выбор позволяет использовать гибкие скрипты для сложных алгоритмов и в то же время легкое интерактивное их использование.

Основными преимуществами системы управления NICOS являются гибкость, простота обслуживания и использования, возможность повторного использования, открытость программного кода, наличие широкого мирового сообщества пользователей и разработчиков.

Применение сетевой системы управления NICOS позволяет за короткое время небольшой команде программистов разрабатывать прикладное программное обеспечение для большого количества нейтронных станций.

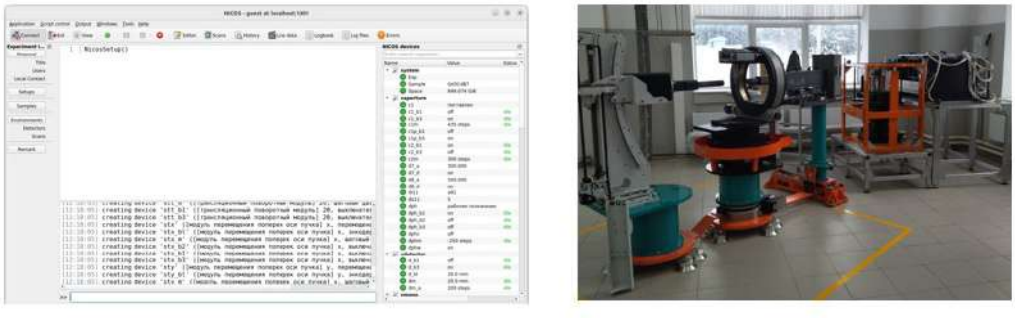

Рис. 1. Четырехкружный дифрактометр DC1. Интерфейс пользователя

Для унификации аппаратного обеспечения принято решение на всех ФКС приборах использовать один тип контроллеров. В рамках программы импортозамещения были выбраны контроллеры SD0100, драйверы движения серии SD и модули ввода/вывода (фирма ООО «Вип Технологии», г. Нижний Новгород).

Для этих контроллеров разработан на аппаратном уровне протокол обмена tango, который был разработан Европейском центре синхротронного излучения в Гренобле

(Франция) для нужд исследовательских учреждений. Преимуществами данного протокола является широкое применение в ведущих исследовательских центрах, открытость программного кода, большой каталог готовых драйверов.

Рис. 2. Модули для системы управления (фирма ООО «Вип Технологии»)

Для отладки прикладного программного обеспечения и тестирования отдельных узлов и элементов научных станций создан испытательный стенд. С помощью испытательного стенда можно тестировать все столы трансляции (поворотные столы, столы линейных перемещений, гониометры и т.д.) и другие системы научных станций (детекторные системы, пневматические системы, вакуумные системы).

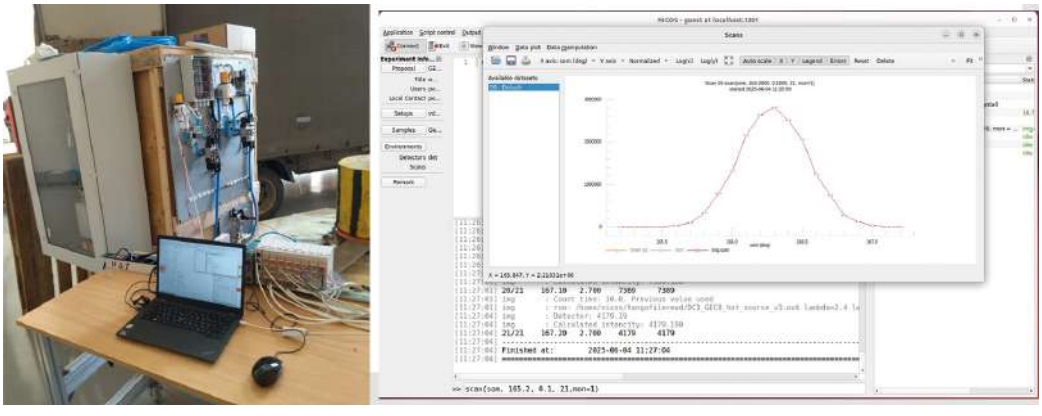

Рис. 3. Слева: испытательный стенд; справа: цифровой двойник четырехкружного дифрактометра DC1

Благодаря открытому программному коду системы NICOS в прикладное программное обеспечение испытательного стенда интегрирован программный пакет McStas, который предназначен для математического моделирования нейтронных установок. Такая интеграция позволит в будущем создавать цифровые двойники научных станций, которые в свою очередь позволят создавать учебные места для подготовки пользователей.

Устный доклад

КОНЦЕПЦИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СПИН-ФЛИППЕРА — ЗАМЕДЛИТЕЛЯ НЕЙТРОНОВ ДЛЯ ИСТОЧНИКА УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА ИМПУЛЬСНОМ РЕАКТОРЕ

А. А. Попов[1,2]*, *К. С. Осипенко*[2], *В. И. Щербаков*[3], *А. И. Франк*[1], *Г. В. Кулин*[1], *В. А. Курылёв*[1,4], *Д. А. Коломенцева*[4]

[1]Объединённый Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия
[2]ГУ «Дубна», Дубна, Россия
[3]SuperOx, Москва, Россия
[4]НИИЯФ МГУ, Дубна , Россия
*E-mail: aapopov@jinr.ru

Несколько ключевых обстоятельств легли в основу концепции источника ультрахолодных нейтронов (УХН) на импульсном реакторе периодического действия. Во-первых, осуществление идеи эффективного импульсного накопления УХН [1] в ловушке позволит получить более высокую плотность УХН по сравнению со усреднённым по времени потоком, а в лучшем случае, сравнимую с плотностью потока в импульсе. Во-вторых, как показано в [2], указанная выше идея может быть осуществлена при замедлении очень холодных нейтронов локальным замедляющим устройством. В качестве последнего предлагается использовать градиентный спин-флиппер [3],[4] в значительных магнитных полях порядка 18 Тл.

Градиентный спин-флиппер способен перевернуть спин нейтронов достаточно широкого диапазона спектра скоростей. Такой процесс осуществляется за счет действия комбинации стационарного градиентного поля и высокочастотного (ВЧ) поля, вращающегося в плоскости, ортогональной направлению стационарного поля. Градиент стационарного поля и амплитуда ВЧ-поля должны слабо меняться в достаточно протяженной области пространства вблизи резонансной области – области переворота спина. Резонансная область характеризуется совпадением угловой скорости вращения ВЧ поля с частотой прецессии Лармора в стационарном поле $\omega_L = \gamma B$.

Вероятность переворота спина в градиентном флиппере определяется параметром адиабатичности k в резонансной области соотношением $k = \gamma B_1/()\upsilon|\partial B_0/\partial z|)$, где γ – гиромагнитное отношение для нейтрона, B_1 – амплитуда ВЧ поля, υ – скорость нейтрона, $\partial B_0/\partial z$ – градиент стационарного поля вдоль основного направления следования нейтронного пучка. При достаточной протяженности области переворота спина и $k > 4$, вероятность переворота спина близка 1 с точностью до процентов. Изменение энергии определяется соотношением $\Delta E = 2\mu B$, где μ – магнитный момент нейтрона, B – резонансное поле, ларморовская частота прецессии нейтрона в котором ω_L равна частоте вращения Ω ВЧ поля.

Магнитная система должна быть обеспечить высокую эффективность переворота спина при максимально возможной величине передаваемой энергии. При этом дисперсия времен замедления нейтронов должна быть наименьшей. Отсюда следует, что области нарастания и спада поля должны быть по возможности короткими, а для того, чтобы параметр адиабатичности k был достаточно большим, они должны быть разделены областью с относительно малым градиентом поля $\partial B_0/\partial z$.

Совместно с компанией изготовителем “СуперОкс” разрабатывается эскизный проект сверхпроводящего стационарного магнита градиентного спин-флиппера. Магнит

будет составлен из набора сверхпроводящих соленоидов с различным внутренним радиусом. Сверхпроводящие соленоиды будут помещены в криостат с теплой областью диаметром 15 см, в которую сможет поместиться резонатор и нейтроновод. Вращающееся ВЧ поле планируется генерировать с помощью резонатора типа «птичья клетка».

Поле в области резонанса имеет величину около 18 Тл, что позволяет замедлять нейтроны со скоростей 20 м/с до 5 м/с. Продольная компонента градиента стационарного поля $\partial B_0/\partial z$ должна находиться в пределах от 1 Тл/м до 1.5 Тл/м. Длина области переворота спина, в которой требуется выдержать указанный продольный градиент должна быть не менее 5 см, а поперечные размеры этой области ограничены окружностью с радиусом 4 см. Радиальная неоднородность поля B_0 в области переворота спина должна быть менее 12 мТл. ВЧ поле должно вращаться с постоянной частотой $f = \Omega/(2\pi) \approx 520$ МГц и иметь амплитуду $B_1 > 0.7$ мТл, сохраняющуюся во всей области переворота спина.

Монте-Карло программа расчета движения нейтрона в нейтроноводе, помещенного в центральный канал соленоида, оперировала с картой магнитного поля флиппера, полученной в отдельном расчете и заданной на трехмерной сетке с шагом 1 мм. Сечение нейтроновода полагалось прямоугольным с размером сторон 80 мм и граничной скоростью 4 м/с.

Рассчитывалось время прохождения практически всей области магнитного поля длиной 1380 мм нейтронами, скорость которых вдоль оси канала лежала в диапазоне от 20.3 до 21.5 м/с. Предполагалось, что в центре области спин нейтрона меняется, так что нейтрон замедляется на всем пути в области магнитного поля. Конечные скорости нейтронов после прохождения флиппера лежали в интервале от 3.5 до 5 м/с. Величина поперечной компоненты скорости при этом практически не менялась и ограничивалась величиной граничной скорости нейтроновода.

Разброс времен замедления в системе составляет 14 мс. Для нейтронов с продольными скоростями в узком диапазоне скоростей 4 – 4.01 м/с разброс времен замедления порядка 1.5 мс.

Результаты работы имеют важное практическое значение для разработки принципиально нового источника УХН. Полученный результат дает основание надеяться, что идея создания источника УХН с импульсным накоплением ловушки, основанная на использования нестационарного замедления нейтронов является реализуемой.

1. Ф. Л. Шапиро, ЭЧАЯ **2**, 4, 975 (1972).
2. А. И. Франк, Г. В. Кулин, Н. В. Реброва, М. А. Захаров, Письма в ЭЧАЯ **20**, 4(249), 669–675 (2023).
3. V. I. Luschikov, Yu. V. Taran, Nucl. Instr. Meth. **228**, 159 (1984).
4. S. V. Grigoriev, A. I. Okorokov, V. V. Runov, Nucl. Instr. Meth. A **384**, 451 (1997).

Устный доклад

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА УПРАВЛЕНИЯ УСТАНОВКАМИ НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ НА ОСНОВЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А. И. Попов[1,2], *А. А. Смирнов*[1], *Д. А. Максимов*[3], *Н. О. Антропов*[2], *Е. А. Кравцов* [1,2]

[1]Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

Современные тенденции в нейтронной физике состоят в выводе из эксплуатации среднепоточных нейтронных реакторов и строительстве вместо них крайне ограниченного числа высокопоточных источников нейтронов. Пучковое время на этих реакторах будет крайне ограничено и, скорее всего, будет предполагать проведение исключительно уникальных экспериментов. Большинство задач в исследованиях конденсированных сред не требуют таких больших потоков нейтронов и решаются на среднепоточных реакторах. Выходом является строительство компактных источников нейтронов, в которых за счет оптимизации небольшого числа инструментов можно добиться тех же потоков нейтронов, как и на среднепоточных реакторах.

Нейтроны на компактном источнике получают за счет низкоэнергетических реакций при бомбардировке протонами мишени, причем, при этом не производятся и используются делящиеся материалы, и установка является экологически чистой. Консорциумом из ведущих российских нейтронных центров разрабатывается проект DARIA (compact neutron source Dedicated to Academic Research and Industrial Applications) по созданию в России сети компактных источников нейтронов, пилотный проект планируется реализовать в Екатеринбурге. Строительство прототипа компактного источника нейтронов DARIA является одной из приоритетных целей для развития различных сфер науки и техники в области физики твердого тела на Урале. На компактном источнике может быть установлено 1–2 мишенных сборки, до 5 различных нейтронных инструментов на каждой.

Одной из основных задач при проектировании установок подобного типа является задание оптимальных параметров времяпролетной оптики, требуемых под конкретные условия эксперимента. Элементы такой оптики включают в себя большое число параметров: время импульса протонного ускорителя, геометрические размеры нейтроноводов, расстояние от замедлителя до формирователя нейтронного импульса, параметры согласующийся между собой прерывателей и тд. Зная влияние каждого из параметров и используя как классические алгоритмы машинного обучения (*k*-ближайших соседей, линейная регрессия, деревья решений и др.), так и современные ансамблевые методы (беггинг, бустинг), а также глубокое обучение с использованием нейронных сетей разной архитектуры, можно производить оптимизационный машинный расчет параметров установки по требованиям к энергетическому спектру и длительности пучка в установке.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021г).

НЕЙРОСЕТЕВОЙ ФРЕЙМВОРК ДЛЯ АНАЛИЗА НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

Н. О. Антропов[1,2], *А. И. Попов*[1,2], *Е. А. Кравцов*[1,2], *А. А. Смирнов*[2], *И. Э. Новосёлов*[2], *Д. А. Максимов*[3]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[3]Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

В данной работе представлен новый подход к постобработке данных времяпролетной нейтронной дифракции. Обрабатываемые данные – двумерные изображения времяпролетной нейтронной дифракции. В работе авторы использовали инструменты глубокого обучения, традиционно применяемые в компьютерном зрении. Решение направлено на поддержку и оптимизацию нейтронных экспериментов за счёт повышения качества и доступности данных.

Авторы предлагают оригинальный метод уточнения и постобработки двумерных изображений нейтронной дифракции (TOF diffraction). Были реализованы следующие архитектуры нейронных сетей: ResNet — для классификации 2D дифракционных картин; U-Net и SuperResolution CNN — для сегментации, фильтрации, снижения шума и усиления интенсивности нейтронного сигнала. Эксперименты показали, что предложенный подход эффективно повышает интенсивность сигнала, улучшает разделение дифракционных пиков и снижает уровень шума.

Устный доклад

РЕАЛИЗАЦИЯ И РАЗВИТИЕ МЕТОДА НЕЙТРОННОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ НА РЕАКТОРЕ ИР-8

Е. О. Серов[1]*, *П. С. Савченков*[1,2], *А. В. Рогачев*[1], *А. И. Калюканов*[1], *В. И. Боднарчук*[1,3,4]

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[4]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
*E-mail: mail@egor-serov.ru

В Курчатовском институте была выполнена работа по реализации метода рефлектометрии поляризованных нейтронов на базе реактора ИР-8.

В рамках данной работы был разработан и введён в эксплуатацию стенд рефлектометрии поляризованных нейтронов «НЕПТУН».

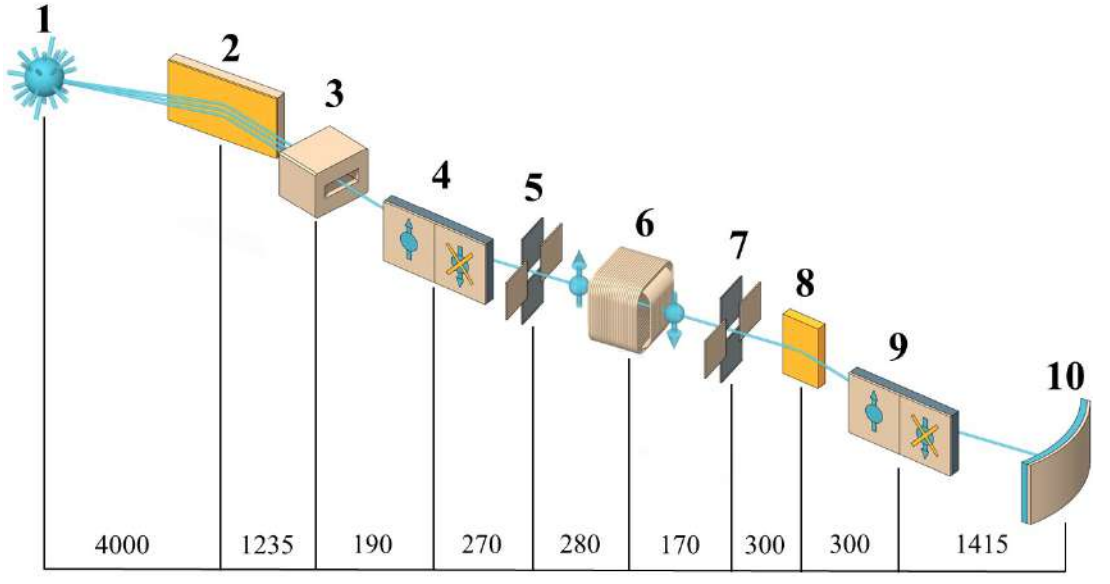

Рис. 1. Оптическая схема стенда нейтронной рефлектометрии: 1 – Реактор ИР-8; 2 – монохроматор Cu(111); 3 – Стальной коллиматор; 4 – Суперзеркало-поляризатор Fe/Si (m=3,6); 5 – регулируемая диафрагма; 6 – Спин-флиппер Мезея; 7 – регулируемая диафрагма; 8 – узел образца; 9 – Суперзеркало-анализатор; 10 – He-3 позиционно-чувствительный детектор.

Конструкция стенда предусматривает реализацию оптической схемы нейтронного рефлектометра с горизонтальной плоскостью отражения и функционалом для работы с поляризованными нейтронами. Монохроматизация полихроматического пучка нейтронов достигается за счёт применения монокристалла меди с ориентацией (111), обеспечивающего отражение нейтронов с длиной волны $\lambda = 1{,}524$ Å. Поляризация пучка осуществляется с помощью суперзеркального поляризатора Fe/Si (m = 3,6), размещённого в постоянном магнитном поле величиной 400 Гс. Управление направлением

поляризации производится посредством спин-флиппера Мезея. Коллимация нейтронного пучка перед образцом обеспечивается системой из двух регулируемых диафрагм, позволяющих контролировать геометрию пучка. Образец фиксируется в магнитном поле 400 Гс на позиционирующем узле с тремя степенями свободы. Регистрация нейтронов осуществляется с помощью одномерного многопроволочного позиционно-чувствительного детектора, заполненного газообразным гелием-3. На стенде «НЕПТУН» проведён ряд экспериментальных сессий, в ходе которых определены предельные параметры установки.

Прибор позволяет исследовать многослойные тонкоплёночные структуры с толщиной отдельных слоёв в диапазоне от 10 до 200 нм.

В докладе рассматриваются оптическая схема стенда, особенности реализации метода на реакторе ИР-8, а также представлены результаты первых экспериментальных исследований.

Устный доклад

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТЕРЕОЛИТОГРАФИЧЕСКОЙ 3D ПЕЧАТИ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПРОТОТИПОВ ПЛАНАРНЫХ ДЕТЕКТОРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРОСТОЙ И СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

*Л. В. Ермакова, И. Ю. Комендо, П. С. Соколов**

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: sokolov-petr@yandex.ru, sokolov_ps@nrcki.ru

Неорганические сцинтилляционные материалы и композиты на их основе имеют широкое применение для регистрации ионизирующего излучения, в том числе нейтронов различных энергий. В последние время широкое распространение получили новые аддитивные методы для формирования объектов различной архитектуры. Они привлекают исследователей своей простотой, доступностью, и прежде всего возможностью варьирования геометрии у изготовляемого объекта в широких пределах, и могут быть использованы в том числе для изготовления различного сорта периодических, - сетчатых или пикселированных экранов с увеличенной рабочей поверхностью. Можно полагать, что данный подход позволит увеличить эффективность регистрации в задачах измерения потоков тепловых нейтронов по сравнению с монолитными непрозрачными сцинтилляционными экранами.

В настоящей работе используя коммерчески доступное оборудование, а именно настольные DLP 3D принтеры, и собственные высокодисперсные порошки сложных оксидов со структурой граната $(Gd,Y)_3(Al,Ga)_5O_{12}$, активированные ионом Ce^{3+} или Tb^{3+}, или их сочетания, были изготовлены пикселированные композиты (Рис. 1). Характерный размер пикселя составил $\sim 240 \times 240 \times 250$ мкм с зазором до 200 мкм между ними на матовых, прозрачных, гибких и жёстких подложках толщиной около 200–400 мкм.

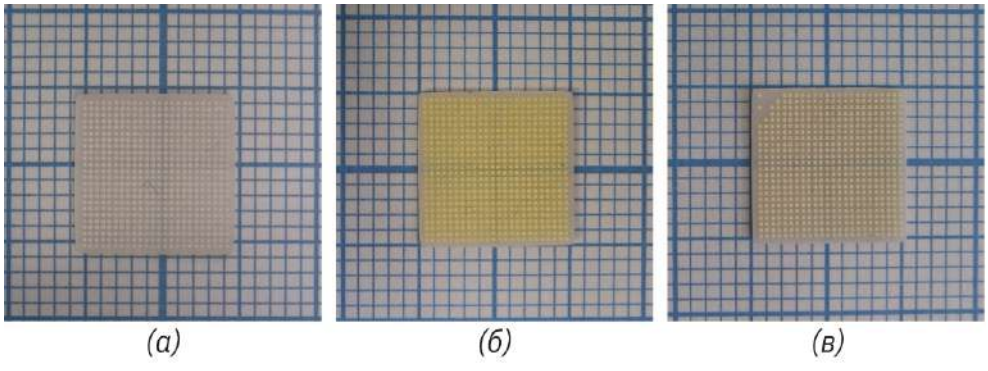

Рис. 1. Композиты на основе акрилатной фото смолы в виде пластины MgO (подложка) с нанесенными на неё пикселями различного состава: GYAGG:Tb (*а*), GYAGG:Ce (*б*) и GYAGG:Ce, Tb (*в*), полученные 3D печатью (без отжига).

Кроме того, будут представлены наши первые результаты по использованию иных перспективных материалов, например ZnS/LiF, литий кальциевого силиката и прочих структур различной геометрии. Также ведется работа по уменьшению типичного размера структурных элементов (по повышению разрешения печати до 100–150 мкм).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00172-П, https://rscf.ru/project/22-13-00172/. Аналитические исследования проведены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ Курчатовский институт».

ШИРОКОАПЕРТУРНЫЙ ДЕТЕКТОР ДЛЯ ФУРЬЕ ДИФРАКТОМЕТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ: ВВОД В СТРОЙ И ПЕРВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

А. М. Балагуров, А. А. Богдзель, К. В. Булатов, В. А. Дроздов, Б. Ержанов, В. В. Журавлев, В. Х. Као, Е. И. Литвиненко, В. М. Милков, С. М. Мурашкевич, М. М. Подлесный, С. В. Сумников, В. В. Швецов*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: sumnikov@nf.jinr.ru

В 2024 году была проведена модернизация детекторной системы Фурье дифрактометра высокого разрешения (ФДВР) действующего на импульсном реакторе ИБР-2. ФДВР – уникальный спектрометр по времени пролета, на котором реализован корреляционный метод набора данных с использованием быстрого Фурье-прерывателя. Такой подход позволил на сравнительно небольшой пролетной базе, 20 метров между прерывателем и образцом, достигнуть разрешения по межплоскостному расстоянию, d_{hkl}, на уровне 1.5×10^{-3}. В исходной версии ФДВР регистрация рассеянных на образце нейтронов осуществлялась сцинтилляционным детектором на ^{6}Li-стеклах с полным телесным углом 0.16 ср. Важной особенностью ФДВР является возможность переключения между модами высокого разрешения и высокой светосилы (без использования фурье-прерывателя) с разрешением $\Delta d/d \approx 0.015$. Нейтронограммы, измеренные с высоким разрешением, для этого, как правило, требуется (1 – 3) часа времени, используются для прецизионного уточнения структуры и для анализа профилей дифракционных пиков. Во второй моде полный дифракционный спектр может быть измерен с необходимой статистикой за время (1 – 5) минут, и она применяется для анализа фазовых трансформаций в материале в реальном времени.

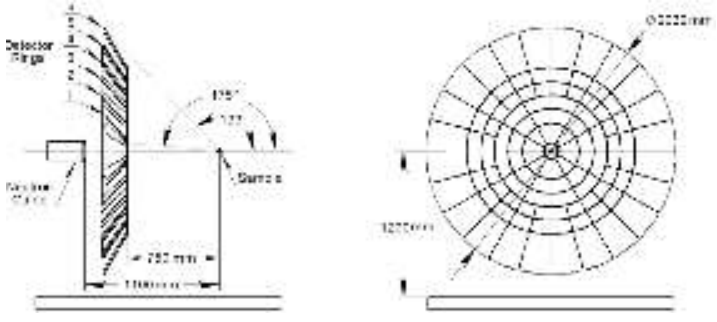

Рис. 1. Схема многокольцевого, многоэлементного сцинтилляционного детектора ДОР-А, вид сбоку и вид спереди.

Новый детектор (ДОР-А, рис. 1), разработанный в ЛНФ имени И. М. Франка, имеет полный телесный угол $\Omega_D \approx 2$ ср и перекрывает область углов рассеяния 2θ = (133-175)°. Детектор имеет многоэлементную структуру и содержит 6 кольцевых сборок (колец) из сцинтилляционных экранов, выполненных из тонкого (0.42 мм) ZnS(Ag)/^{6}LiF пластика. Всего детектор состоит из 108 независимых элементов, повторяющих форму поверхности геометрической фокусировки [1]. Сбор и проводка света от сцинтилляционных экранов на фотоумножители осуществляется оптическими спектросмещающими волокнами. Детальное описание особенностей применения ZnS(Ag)/^{6}LiF сцинтилляторов приведено в работе [2]. Дифракционные эксперименты, выполненные после монтажа и настройки детектора, показали хорошее соответствие с ожидаемыми

характеристиками, что обусловлено высоким качеством его изготовления. Пример измеренного спектра приведен на рис. 2.

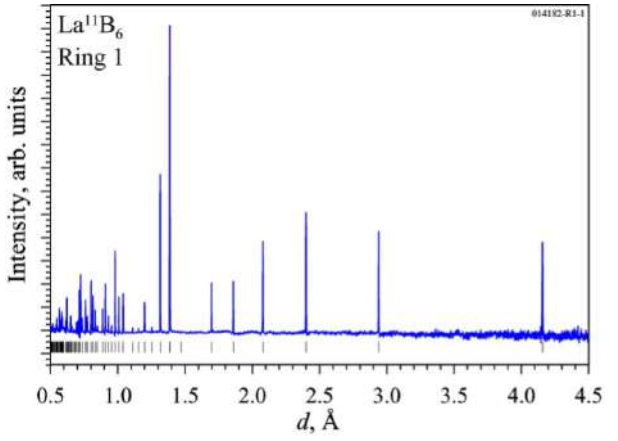

Рис. 2. Дифракционный спектр стандартного поликристалла $La^{11}B_6$. Показаны данные от кольца 1, нормированные на эффективный спектр.

Точная подгонка модулей и соблюдение пространственно-временной фокусировки позволяют суммировать спектры от элементов внутри одного кольца без введения дополнительных поправок. При максимальной частоте вращения Фурье-прерывателя 6000 об/мин $\Delta d/d \approx 0.001$ в широком диапазоне d_{hkl} (рис. 3). В настоящее время ведутся работы по настройке электроники детектора и сооружении дополнительной фоновой защиты. Проведенная модернизация детекторной системы заметно улучшила параметры ФДВР по разрешающей способности и светосиле и обусловила появление новых возможностей в проведении дифракционных экспериментов.

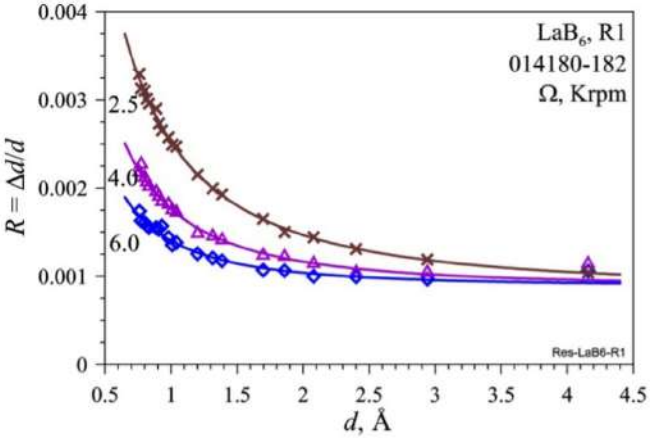

Рис. 3. Функции разрешения ДОР-А для первого кольца при скоростях вращения Фурье-прерывателя 2500, 4000 и 6000 об/мин.

1. V. V. Kruglov, A. M. Balagurov, M. O. Belova et al., J. Neutron Research **23**, 243–250 (2021).
2. E. S. Kuzmin, A. M. Balagurov, G. D. Bokuchava et al., J. Neutron Research, 31–41 (2002).

Устный доклад

ПЕРВЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ НА НЕЙТРОННОМ РЕФЛЕКТОМЕТРЕ ТНР, УСТАНОВЛЕННОМ НА РЕАКТОРЕ ИРТ–Т (ТПУ)

В. Г. Сыромятников[1,2]*, *В. А. Ульянов*[1], *М. В. Дьячков*[1], *М. Р. Колхидашвили*[1], *А. В. Пирожков*[3]

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт» — Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[3]Томский политехнический университет, Томск, Россия
*E-mail: syromyatnikov_vg@pnpi.nrcki.ru

Нейтронная рефлектометрия широко используется в современных исследовательских ядерных реакторах для изучения структурных характеристик и магнитных свойств многослойных тонкопленочных наносистем [1,2].

Нейтронный рефлектометр ТНР [3,4] предназначен для проведения исследований магнитных и немагнитных многослойных наносистем, включая аттестацию нейтронно-оптических элементов для нейтронных станций приборной базы реактора ПИК. Рефлектометр ТНР был установлен на 7-м горизонтальном канале реактора ИРТ-Т (Томский политехнический университет). На рефлектометре ТНР с помощью формирователя пучка будет реализована возможность работы с тепловыми нейтронами в режимах измерений с “белыми” неполяризованным/поляризованным пучками и с монохроматическими неполяризованным/поляризованным пучками нейтронов. Переход из одного режима работы в другой осуществляется быстро и не требует перестройки установки. Выбор режима формирователя пучка определяется решаемой физической задачей.

Результаты первых измерений, представленные в данном докладе, демонстрируют широкие экспериментальные возможности нейтронного рефлектометра ТНР.

1. Ю. В. Никитенко, В. Г. Сыромятников, Рефлектометрия поляризованных нейтронов, М.: Физматлит, (2013).
2. В. И. Боднарчук, А. П. Булкин, Е. А. Кравцов, Н. К. Плешанов, В. Г. Сыромятников, В. А. Ульянов, Кристаллография **67**, 1, 57 (2022).
3. V. G. Syromyatnikov, N. K. Pleshanov, V. M. Pusenkov, A. F. Schebetov, V. A. Ul’yanov, Ya. A. Kasman, S. I. Khakhalin, M. R. Kolkhidashvilli, V. N. Slyusar, A. A. Sumbatyan, Preprint Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina, 2619, 47 (2005).
4. М. В. Дьячков, В. А. Матвеев, В. Г. Сыромятников, В. В. Тарнавич, В. А. Ульянов, Поверхность **8**, 11, (2024).

Устный доклад

ГЕЛИЕВАЯ ЛАБОРАТОРИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРИОКУЛЕРОВ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА

А. Н. Черников[1]*, *В. Д Жакетов* [1,2]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия
*E-mail: chern@nf.jinr.ru

Общей задачей исследований при низких температурах является отказ от использования привозных жидких криоагентов, гелия и азота. Задача решается с использованием криокулеров замкнутого цикла. В настоящее время компании производят криокулеры, которые обладают холодопроизводительностью, сопоставимой с характеристиками гелиевых криостатов, использующих процесс испарения жидкого гелия.

В гелиевых криостатах тепловой поток в 1 Ватт к жидкому гелию компенсируется за счет испарения гелия со скоростью 1.2 литра жидкого 4He в час при температуре 4.2 К. Современные криокулеры достигают холодопроизводительности до 2.5 Вт при температуре 4.2 К и минимальной температуры до 2.2 К при нулевой производительности.

Криокулеры замкнутого цикла имеют две ступени, обеспечивающие температурные уровни 50 К и 2.2 К. Охлаждение объектов до 2.2 К может проводиться посредством твердотельного теплового моста со второй ступенью криокулера. Однако температуры 1.5 К и ниже требуют использования жидкого ^{4}He.

Логично жидкий ^{4}He нарабатывать при помощи ожижителя, собранного на базе криокулера, расположенном в самом криостате, исключая транспортировку жидкого гелия.

Логично использовать конструкции получения низких и сверхнизких температур, технологически отработанных в гелиевых жидкостных криостатах.

В ЛНФ ведется проект разработки векторного магнита [1] на основе ВТСП двух направлений магнитного поля, вертикального и горизонтального, с несимметричными катушками, внутри которого располагается камера образца с температурами до 0.1 К. Основу проекта составляет разработанный ранее прототип рефрижератора растворения ^{3}He в ^{4}He [2], предназначенный для работы в вертикальном гелиевом криостате, заполняемым привозным жидким гелием. Жидкий ^{4}He в криостате проекта нарабатывается в системе теплообменников [3], расположенных на регенераторе и второй ступени холодной головки криокулера на основе пульсационной трубы. Проект ориентирован на работу с поляризованными нейтронами на рефлектометре РЕМУР [4].

Также готовится проект горизонтального криостата на температуры до 1.5 К, которые достигаются путем вакуумной откачки паров жидкого ^{4}He, нарабатываемого в системе теплообменников, расположенных на регенераторе и второй ступени холодной головки криокулера на основе пульсационной трубы, расположенном вертикально. Цель разработки расположение образца внутри высокооднородного магнитного поля вертикального направления, создаваемого между стальными полюсами теплого магнита. Криостат планируется использовать в рефлектометрии нейтронов.

Использование криокулеров на пульсационной трубе обусловлено требованием минимизации вибраций, которое накладывает рефлектометрия нейтронов. Это требование удовлетворяется типом криокулера, в которых роторный вентиль и расширительные бачки вынесены за пределы холодной головки криокулера.

В связи с этими положениями была создана гелиевая лаборатория, которая включает в себя мягкую емкость хранения газообразного гелия. Так емкость имеет объем 12 м.куб. Газообразный гелий поставляется в баллонах емкостью 40 л под давлением 150 бар, или 6 м. куб. нормального гелия. Количества газообразного гелия 6 м. куб. достаточно для получения 7 л жидкого гелия.

1. V. Altynov et.al. Journal of Surface Investigation: X-ray, synchrotron and neutron techniques, **18**, 900 (2024).
2. A. N. Chernikov and Yu. F. Kiselev. Cryogenics **30**, 52 (1990).
3. A. N. Chernikov. Journal of Surface Investigation: X-ray, synchrotron and neutron techniques **17**, 473 (2023).
4. В. Л. Аксенов и др. Сообщения ОИЯИ, Дубна, Д13-2004-47 (2004).

Секция 3.
Нейтронные исследования объектов культурного наследия

Приглашенный доклад

ИССЛЕДОВАНИЯ ОБЪЕКТОВ КУЛЬТУРНОГО НАСЛЕДИЯ МЕТОДАМИ НЕЙТРОННОЙ СТРУКТУРНОЙ ДИАГНОСТИКИ НА ИМПУЛЬСНОМ ВЫСОКОПОТОЧНОМ РЕАКТОРЕ ИБР-2 И ДРУГИХ ИСТОЧНИКАХ НЕЙТРОНОВ СТРАН-УЧАСТНИЦ ОИЯИ

С. Е. Кичанов[1]*, *И. А. Сапрыкина*[1,2], *Б. А. Бакиров*[1], *В. С. Смирнова*[1], *Д. П. Козленко*[1], *И. Ю. Зель*[1]

[1]Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Институт археологии РАН, Москва, Россия
*E-mail: ekich@nf.jinr.ru

Общемировым трендом последних лет является широкое применение естественно-научных методов, включая ядерно-физические, к анализу внутреннего строения археологических объектов. Это позволяет получить максимально полную информацию о химическом составе и структурных особенностях, наличии внутренних дефектов и скрытых конструкций или внутреннем декоре древних изделий, фазового состава и пространственного распределения компонентов уникальных объектов культурного наследия, имеющих высокую научную и историческую ценность, неразрушающими методами исследований.

В Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка Объединенного института ядерных исследований реализован комплексный подход для неразрушающего структурного анализа объектов культурного наследия, который включает в себя применение методов нейтронной радиографии и томографии, нейтронной и рентгеновской дифракции, а также рамановской спектроскопии. В представленном докладе продемонстрированы возможности методов нейтронной радиографии и томографии, и их роль в идентификации древних технологических приемов изготовления объектов культурного наследия определенных исторических и культурных периодов. Приводятся примеры исследований фрагментов изделий древних мастерских: фрагменты керамики из византийской крепости в районе Добруджа (Румыния), древних поселений южного Казахстана, артефактов из археологических раскопок Российской Федерации, средневековых керамических изделий современной Сербии.

Применение нейтронного структурного анализа объектов культурного наследия, оказались широко востребованны археологическими сообществами ряда стран-участниц ОИЯИ. Так, в Республике Казахстан успешно функционирует установка для исследований с помощью метода нейтронной радиографии и томографии на базе реактора ВВР-К. В настоящее время на созданной установке проводятся совместные исследования по анализу внутреннего строения археологических материалов. В 2020 году на исследовательском реакторе ВВР-СМ Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан был создан новый объект научной инфраструктуры для реализации научных исследований методами нейтронной радиографии и томографии, которая в настоящее время является уникальной установкой такого рода в Республике Узбекистан. Уже получены первые результаты по неразрушающему структурному исследованию различных объектов из археологических раскопок крепости Узундара древнего Греко-Бактрийского царства.

Нейтронные и рентгеновские исследования археологических материалов из археологического комплекса Волна-1 проводились в рамках гранта РНФ № 23-18-00196 «Комплексные исследования нового городского некрополя архаического и классического времени Волна 1 на территории Азиатского Боспора».

НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТОМОГРАФИИ

Б. А. Бакиров

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*E-mail: bulatbakirov@jinr.ru

Методы рентгеновской, синхротронной и нейтронной томографии играют важную роль в исследованиях объектов культурного наследия, обеспечивая возможность неразрушающего анализа внутренней структуры артефактов. Рентгеновская томография широко применяется благодаря своей доступности и высокому пространственному разрешению. Синхротронная томография, использующая источники с высокой яркостью, обеспечивает изображение с повышенной контрастностью и минимальными артефактами при анализе сложных многокомпонентных материалов. Нейтронная томография, в отличие от рентгеновской, обладает высокой чувствительностью к легким элементам (таким как водород), и позволяет выявлять скрытые дефекты, невидимые для других методов. Несмотря на широкие возможности, указанные методы сталкиваются с рядом ограничений — в том числе длительностью эксперимента, ограниченным числом проекций, шумами и артефактами реконструкции.

Современные алгоритмы компьютерного зрения, особенно основанные на сверточных нейронных сетях (СНС), открывают новые пути к решению этих проблем. СНС способны автоматически извлекать значимые пространственные признаки срезов томографических данных и эффективно адаптироваться к специфике каждого вида томографии. Архитектуры U-Net и U-Net3+ получили широкое распространение в задачах визуализации благодаря наличию энкодер-декодерной структуры и наличию соединений, обеспечивающих передачу пространственной информации между уровнями. U-Net3+ расширяет оригинальную архитектуру за счёт более плотных многоуровневых соединений, что позволяет достигать более высокой точности на сложных гетерогенных данных.

В данной работе продемонстрировано применение СНС для трёх ключевых задач, возникающих при анализе объектов культурного наследия. Первая задача — автоматическая сегментация пор и трещин на срезах 3D-моделей, полученных с помощью нейтронной, синхротронной и рентгеновской томографии, что важно для оценки степени сохранности артефактов [1]. Вторая задача — реконструкция трёхмерной структуры объекта из ограниченного числа радиографических проекций нейтронной томографии с целью сокращения времени эксперимента и снижения дозовой нагрузки [2]. Третья задача — повышение качества реконструкции по сравнению с классическими методами FBP и SIRT путём обучения моделей на основе дифференцируемого прямого преобразования Радона. Полученные результаты демонстрируют потенциал глубокого обучения как вспомогательного инструмента в области томографии объектов культурного наследия.

1. I. Zel, M. Kenessarin, S. Kichanov, K. Nazarov, D. Kozlenko, Journal of Imaging, **8**(9), 242 (2022). https://www.mdpi.com/2313-433X/8/9/242.
2. T. Minniti, D. Micieli, Scientific Reports, **9**, 1-9 (2019). https://www.nature.com/articles/s41598-019-38903-1.

Устный доклад

ЮВЕЛИРНЫЕ ИЗДЕЛИЯ ДРЕВНЕЙ РУСИ: ЧТО ГОВОРИТ ТОМОГРАФИЯ

К. М. Подурец, Е. С. Коваленко, М. М. Мурашев, П. В. Гурьева, Е. Ю. Терещенко, Е. Б. Яцишина*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: podurets_km@nrcki.ru

Ювелирные изделия нередко находят в археологических раскопках, как единичные экземпляры, так и в составе кладов. Эти украшения, являющиеся выражением высокой моды домонгольской Руси, были доступны лишь верхушке общества и служили демонстрацией статуса их владельцев. Изучение подобных предметов естественнонаучными методами является важным, потому что их изготовление является проявлением «высоких технологий» своего времени. В частности, синхротронная, нейтронная и рентгеновская томография позволяет выявить детали конструкции предметов и соответственно, выявить технологические приемы, использованные при их изготовлении.

Были исследованы образцы нескольких типов: изделия с перегородчатой эмалью, плетеные браслеты и бусы с декорацией в технике зерни. Для эмалевых предметов обнаружена специфика в расположении перегородок на эмалевом декоре и соответственно, выявлена последовательность технологических операций. Для браслетов определены способы соединения деталей в изделии. Для зерненых бусин установлен способ крепления зерен, последовательность операций при сборке изделий, тип серебряной проволоки, использованной для создания узора. Все указанные особенности являются важными «диагностическими» признаками, по которым археологи могут соотнести исследуемые изделия с той или иной ремесленной традицией. Одной из находок, сделанной при томографическом исследовании, является обнаружение многослойности серебряной фольги, использованной для создания тулова бусин.

Работа выполнена с использованием оборудования уникальных научных установок «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» и «Курчатовский специализированный источник синхротронного излучения («КИСИ-Курчатов»)». Рентгеновская и нейтронная томография металлических бус из Воздвиженского клада выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 25-18-00708.

НЕЙТРОННЫЕ ТОМОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДРЕВНЕЙ КЕРАМИЧЕСКОЙ УТВАРИ ИЗ МОГИЛЬНИКА АКТЕРЕК, РЕСПУБЛИКА КАЗАХСТАН

М. Кенесарин, К. Назаров, В. С. Смирнова, С. Е. Кичанов, Б. Мухаметулы*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: veronicasm@jinr.ru

С помощью нейтронной томографии изучены пространственное расположение, распределение размеров и форма внутренних пор в нескольких археологических керамических сосудах из могильника Актерек в Жамбылском районе Алматинской области Республики Казахстан. Эксперимент по нейтронной томографии был проведен на установке ТИТАН исследовательского реактора ВВР-К [1]. На основе полученных нейтронных данных проведена сегментация внутренних пор и рассчитано значение пористости для древних керамических образцов. Средний объем пор и пористость образцов варьируются от минимального значения 0,08% до максимального 0,39%. Кроме того, некоторые содержат дополнительные включения, характеризующиеся высоким коэффициентом затухания нейтронов, с объемами 0,36% и 0,14% соответственно. На основании предыдущих исследований, предполагается, что это кальцитные фазы.

Для оценки размеров пор использовался параметр эквивалентного диаметра [2]. Эквивалентный диаметр соответствует диаметру сферы с таким же объемом, как у поры неправильной формы. Средний и медианный размер пор во всех образцах составляет от 0,5 до 2,5 мм. Однако статистические распределения по размерам пор достаточно сложны. Для более детального анализа распределений размеров пор мы использовали аппроксимацию экспериментальных данных с помощью функции плотности вероятности с непараметрическим методом оценки плотности ядра с полосой пропускания Сильвермана. В рамках этого подхода мы можем сравнивать рассчитанные распределения от образца к образцу (рис.1*а*). Для большинства образцов наблюдается асимметричное распределение с выраженным максимумом. Однако для других образцов на кривой распределения также наблюдается отчетливое плечо с вторичным пиком, что свидетельствует о формировании двух различных распределений размеров пор — мелких пор со средним размером до 1,5 мм и более крупных с размерами более 2,2 мм. Предполагается, что наличие более крупных пор может указывать на более длительный процесс обжига при более высоких температурах.

Изменение температуры отжига или продолжительности обжига может привести к увеличению размера пор, а также к изменению их морфологии в сторону более неупорядоченных, несферических вытянутых форм. Вытянутость пор можно оценить с помощью параметра удлинения [3]. В этом случае объем пор аппроксимируется эллипсоидом, а удлинение трехмерного объекта оценивается по соотношению осей. Полученные вероятностные распределения параметров удлинения пор представлены на рис. 1*б*. Видно, что распределения являются бимодальными, с двумя широкими максимумами. Первый максимум соответствует значению сферичности ∼0,2, что указывает на уплощенные, сильно вытянутые частицы с соотношением осей примерно 1:5. На основании расчетных данных можно предположить, что большинство пор имеют вытянутую форму, сильно сплющенную вдоль одной из осей эллипсоида. Второй максимум ∼0,6 соответствует более идеальным симметричным частицам с разницей радиусов не более чем в 1,5 раза.

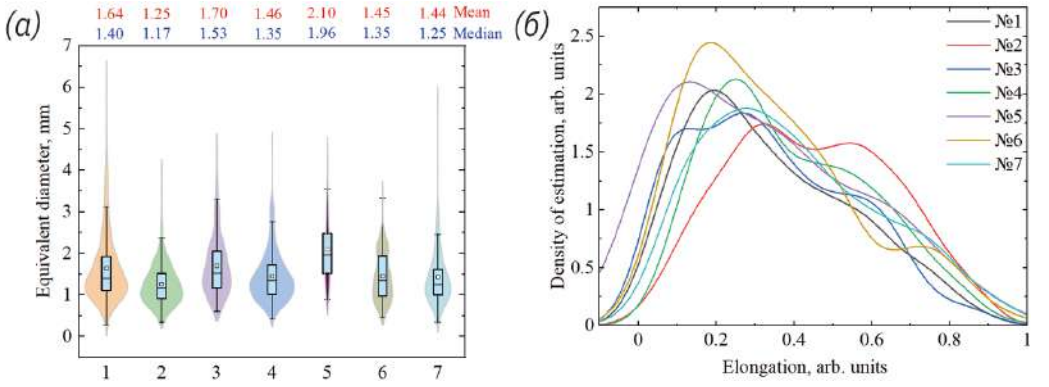

Рис. 1. Плотность вероятности распределения: *а* – для параметра эквивалентного диаметра; *б* – для параметра удлинения.

Для фазового анализа керамического материала использовали рамановскую спектроскопию. Спектры при комнатной температуре получали с помощью спектрометра Solver Spectrum (NT-MDT, Зеленоград, Россия) с длиной волны 473 нм. Доминирующей фазой является кварц, также обнаружены фазы гематита, ортоклаза и титана. Фаза аморфного углерода была обнаружена внутри объема почти всех исследованных керамических сосудов. Это позволяет оценить температуру обжига керамических изделий на основе относительной высоты дублета комбинационного рассеяния HD/HG [4]. Получили, что одна половина керамических изделий имеет температуру обжига около 720 °C, тогда как температура обжига для остальных сосудов несколько ниже: ~680 °C.

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан в рамках гранта № AP23490652.

1. K. Nazarov et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. **982**, 164572 (2020).
2. I. Yu. Zel et al., Cem. Concr. Compos. **119**, 103993 (2021).
3. V. Angelidakis et. al., Powder Technol. **396**, 689–695 (2022).
4. A. Coccato, J. Raman Spectrosc. **46**, 1003–1015 (2015).

Секция 4.

Поверхности, тонкие пленки и многослойные структуры

Приглашенный доклад

INVESTIGATION OF CRYSTAL STRUCTURE OF Tb THIN FILM WITH HELIMAGNETIC ORDERING

D. I. Devyaterikov[1], *Yu. A. Salamatov*[1], *E. A. Kravtsov*[1], *He Bai*[2], *Tao Zhu*[2]

[1]IMP UB RAS, Ekaterinburg, Russia
[2]CSNS, Dongguan, China
*E-mail: devidor@yandex.ru

Thin films with 4f rare-earth (RE) elements Dy, Ho and Tb are popular objects of research due to their unique magnetic properties compared to bulk samples. Namely, the influence of epitaxial strain and dimensional effects on helimagnetic ordering is studied in these structures extensively [1]. Elastic neutron scattering represents one of the best methods to obtain information about both long-range magnetic ordering, like helimagnetic ordering, and crystal structure, and thus was used extensively to probe both single crystal RE bulk samples and various types of RE planar nanostructures [2,3]. However, given the axis of magnetic helices in RE is oriented strictly along c axis of their HCP lattice, this c axis has to be along the sample normal in order to detect helimagnetic ordering via elastic neutron scattering in $\theta - \theta$ geometry. A specific procedure was developed to obtain the appropriately textured samples of thin RE films, which involves epitaxial growth of Nb atop of single-crystal Al_2O_3 substrates, and then epitaxial growth of RE layer or multiple layers. Abundance of available methods of synthesis and individual features of equipment used for growth of the sample highlight the need of examining the crystal structure of RE earth films. This report is dedicated to examining the crystal structure of Tb thin film, grown via high-vacuum magnetron sputtering, and comparing it with previously studied samples of RE films. The results of neutron reflectometry measurements performed on the sample are briefly discussed.

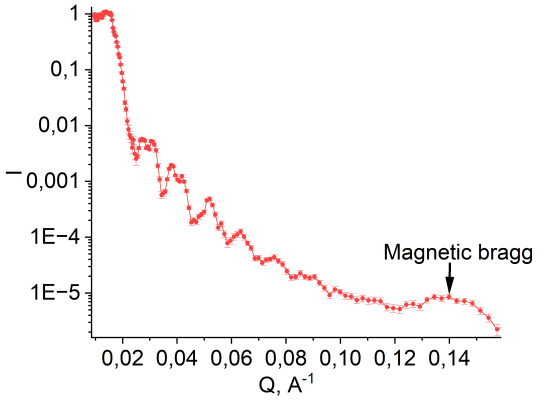

Рис. 1. Specular XRD scan.

Sample was synthesized using the following procedure: the seed layer of Nb (50 nm) was sputtered on a single crystal Al_2O_3 substrate with (11–20) texture along surface normal at 600 K. Then Tb layer (approximately 35 nm) was deposited at 200 K, which was capped with Nb layer (25 nm) at 100 K. The crystal structure of the sample was studied with XRD. The measurements performed with $\theta - \theta$ geometry(Fig. 1) revealed, that Tb has predominant texture (0001) along surface normal of the sample, with two other peaks, associated with Tb layer, being Tb (10–10) and, probably, TbO (111).

No peaks were observed for Nb layers, other than Nb (110), so orientational relation along surface normal is Al_2O_3(11-20)||Nb(110)||Tb(0001). 6 reflections identified as Tb (11–24) were observed on off-specular XRD scans with angles between reflections being 60 degrees. The orientation of scattering vector *Q* of these reflections suggests they belong to the Tb with (0001) texture along surface normal. The lattice parameters for predominant texture of Tb were estimated using both specular and non-specular reflections, giving a = 3.612, c = 5.688. Comparison with bulk values a = 3.601, c =5.694 reveals Tb lattice is slightly compressed along c axis. These results suggest, that in-plane lattice directions in Tb are ultimately determined by lattice directions in single crystal Al_2O_3 substrate, and to prove it a series of Nb (121) peaks was recorded on off-specular XRD scans. These scans revealed complex crystal structure of Nb layer with majority of it being ordered so that orientational relations in-plane of the sample are Al_2O_3(1–10–2)||Nb(001)||Tb(–2110) with Nb(110) texture along surface normal. However, additional Nb (121) peaks due to crystal twinning were observed. The lattice parameters were similar both for predominant Nb texture and the twin, with the twinning lattice slightly distorted.

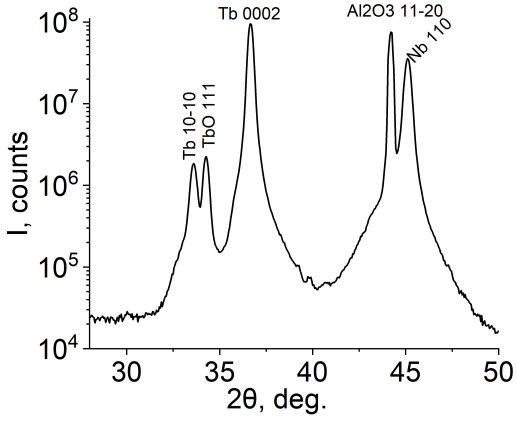

Рис. 2. PNR curve at 225 K (ZFC), H=100 Gs.

The results of investigation of crystal structure of thin Tb film revealed that predominantly epitaxial growth was achieved with orientational relations determined both along the surface normal and in-plane of sample. This represent stark difference with earlier studied thin Dy [4] and Ho [5] films, where polycrystalline structure was observed in-plane of the sample. Orientational relations along surface normal made the sample suitable for investigating helimagnetic ordering with polarized neutron reflectivity measurements. Such measurements were conducted at CSNS, Guandong, China on multipurpose reflectometer, the presence of magnetic bragg associated with emergence of helimagnetic ordering in Tb layer was confirmed (Fig. 2).

1. A. Vl. Andrianov, D. I. Kosarev, A. I. Beskrovnyi Phys. Rev. B **62**, 13844 (2000).
2. C. C. Tang, W. G. Stirling, D. L. Jones, C. C. Wilson, P. W. Haycock, A. J. Rollason, A. H. Thomas, D. Fort, JMMM **103** (1992).
3. C. Dufour, K. Dumesnil, A. Mougin, Ph. Mangin, G. Marchal and M. Hennion J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997).
4. V. D. Mello, A. A. Gurgel, F. G. Queiroz, E. S. N. Silva, D. H. A. L. Anselmo, E. A. Kravtsov, D. I. Devyaterikov, V. D. Zhaketov, E. A. Stepanova, E. M. Smelova, K. M. Tsysar, R. R. Gimaev, V. I. Zverev JMMM **600** (2024).
5. A. A. Gurgel, F. G. Queiroz, E. S. N. Silva, D. H. A. L. Anselmo, V. D. Mello, V. V. Proglyado, M. A. Milyaev, E. A. Kravtsov, D. I. Devyaterikov, E. A. Stepanova, V. D. Zhaketov, F. A. Shelkovyi, E. M. Smelova, K. M. Tsysar, R. R. Gimaev, V. I. Zverev JMMM **610** (2024).

Устный доклад

ИНТЕНСИВНОСТЬ МИКРОПУЧКА НЕЙТРОНОВ ИЗ ПЛОСКОГО ВОЛНОВОДА

С. В. Кожевников, А. В. Петренко*

ЛНФ им. И. М. Франка, ОИЯИ, Дубна, Россия
*E-mail: kozhevn@nf.jinr.ru

Ширина нейтронного пучка в обычном эксперименте составляет от 0.1 до 10 мм. Для исследования локально-неоднородных микроструктур необходимо иметь очень узкие пучки нейтронов шириной менее 100 мкм. С этой целью разрабатываются различные фокусирующие устройства (капиллярные линзы, преломляющие линзы, изогнутые кристаллы-монохроматоры и др.) [1]. Но все они имеют ограничения, которые связаны с физическими свойствами используемых материалов или технологией их обработки. С помощью таких фокусирующих устройств трудно выделить «чистый» микропучок и получить микропучок шириной менее 30 мкм.

Эти ограничения можно обойти с помощью слоистых волноводов [2]. На рис. 1*а* показан принцип действия нейтронного волновода, а на рис. 1*б* представлена плотность длины рассеяния (ПДР) нейтронов данной структуры. Коллимированный пучок нейтронов с угловой расходимостью $\delta\alpha_i \sim 0.01^\circ$ падает на поверхность волновода под малым углом скольжения около $\alpha_i \sim 0.4^\circ$. Затем нейтроны туннельным образом проходят через тонкий слой 1 и почти полностью отражаются от толстого слоя 3. В результате многократного отражения нейтронной волны внутри среднего слоя 2 происходит резонансное усиление нейтронной плотности. Нейтроны распространяются в среднем волноводном слое как в канале и выходят из торца волновода в виде узкого микропучка с расходимостью около $\delta\alpha_f \sim 0.1^\circ$. На расстоянии 1 мм от выхода волновода ширина микропучка составляет порядка 1 мкм. В [3,4] поляризованный микропучок нейтронов из плоского волновода интенсивностью около 1 н/с был использован для пространственного сканирования магнитной проволочки диаметром 190 мкм. В [5–7] было экспериментально показано, что при высокой коллимации падающего пучка основной вклад в угловую расходимость микропучка даёт дифракция Фраунгофера $\delta\alpha_F \propto \lambda/d$, где λ – длина волны нейтронов и d – ширина волноводного канала.

Ранее было экспериментально получено [8], что с ростом угловой расходимости падающего пучка $\delta\alpha_i$ линейно растёт спектральная ширина резонанса порядка $n = 0$. Недавно нами было показано [9], что для резонанса $n = 0$ с ростом угловой расходимости падающего пучка $\delta\alpha_i$ линейно растёт расходимость микропучка $\delta\alpha_f$. Полученные экспериментальные результаты качественно подтверждают предварительные расчёты в диссертации [10].

В настоящей работе мы исследовали зависимость интенсивности микропучка нейтронов от угловой расходимости $\delta\alpha_i$ падающего пучка. Размеры подложки волновода $Ni_{67}Cu_{33}$(20 нм)/Cu(150)/$Ni_{67}Cu_{33}$(50)//Si(подложка) были равны $1 \times 1 \times 25$ мм^3. Сплав Ni(67 ат. %)Cu(33 ат. %) является немагнитным при комнатной температуре и обладает высоким значением ПДР. Измерения проведены на времяпролётном нейтронном рефлектометре РЕМУР на импульсном реакторе ИБР-2 в Дубне. Угол скольжения падающего пучка $\alpha_i = 0.211^\circ$ был фиксирован. Угловая расходимость падающего пучка регулировалась с помощью диафрагмы перед образцом на расстоянии 3236 мм. На рис. 2*а* представлена спектральная интенсивность микропучка нейтронов резонансов порядков n = 0, 1, 2 при различной угловой расходимости (FWHM) падающего пучка нейтронов. Интенсивность микропучка просуммирована по широкому интервалу конечных углов рассеяния $\Delta\alpha_f$=0.224°. Пунктирной линий показан уровень фона. Видно, что для малой угловой расходимости падающего пучка интенсивность микропучка мала, и резонансы порядков n = 0, 1, 2 чётко видны. С ростом угловой расходимости падающего пучка интенсивность микропучка увеличивается, а пучки резонансов n = 0, 1, 2 перекрываются. На рис. 2*б* приведена интегральная по длине волны нейтронов интенсивность микропучка резонансов n = 0, 1, 2 в зависимости от угловой расходимости падающего пучка. Можно видеть, что интенсивность микропучка увеличивается линейно

с ростом угловой расходимости падающего пучка. Это объясняется ростом спектральной ширины нейтронных резонансов внутри волновода.

Мы полагаем, что полученные результаты будут полезными как для более полного понимания нейтронооптических явлений в резонансных слоистых наноструктурах, так и для оптимизации работы плоских нейтронных волноводов.

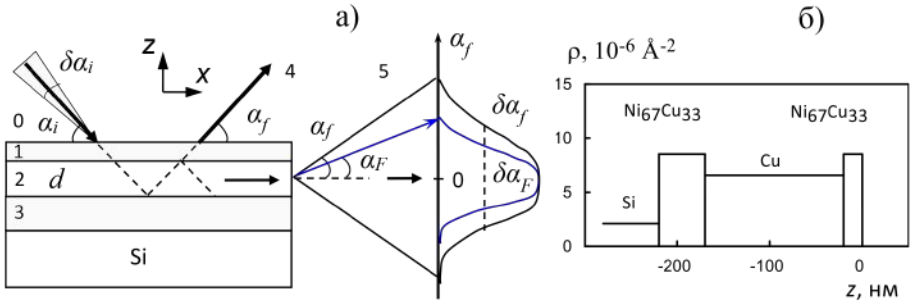

Рис. 1. (*а*) – Геометрия эксперимента: 0 – вакуум, 1 – верхний тонкий слой, 2 – волноводный слой; 3 – нижний толстый слой, 4 – зеркально отражённый пучок и 5 – микропучок. (*б*)ПДР волноводной структуры.

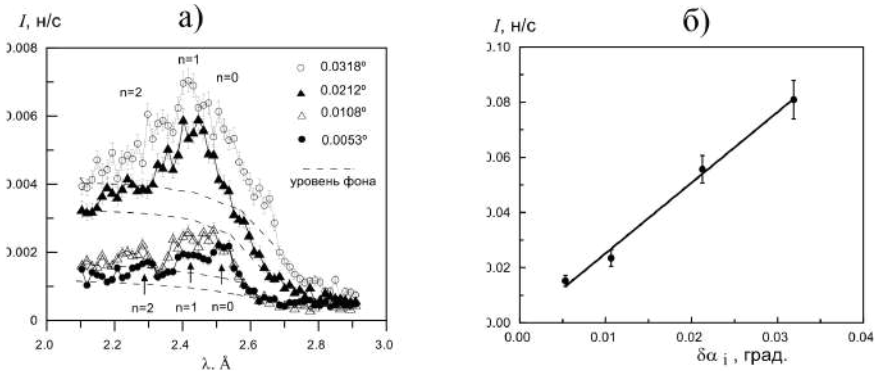

Рис. 2. (*а*) Спектр микропучка при различной угловой расходимости падающего пучка. (*б*) – Интегральная по длине волны нейтронов интенсивность микропучка в зависимости от угловой расходимости падающего пучка.

1. F. Ott, Focusing Optics for Neutrons. In: Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics. Springer Series in Optical Sciences, **137**, 113–134 (2008).
2. F. Pfeiffer, V. Leiner, P. Høghøj, I. Anderson, Phys. Rev. Lett. **88**, 055507 (2002).
3. F. Ott, S. Kozhevnikov, A. Thiaville et al., NIM A **788**, 29 (2015).
4. С. В. Кожевников, F. Ott, J. Torrejón и др., Физика твёрдого тела **56**, 63(2014).
5. S. V. Kozhevnikov, V. K. Ignatovich, Yu. V. Nikitenko et al., Pis'ma ZhETF **102**, 3 (2015).
6. С. В. Кожевников, В. Д. Жакетов, Ф. Раду, ЖЭТФ **154**, 698 (2018).
7. S. V. Kozhevnikov, V. D. Zhaketov, T. Keller et al., NIM A **915**, 54 (2019).
8. С. В. Кожевников, В. К. Игнатович, А. В. Петренко, Ф. Раду, ЖЭТФ **150**, 1094 (2016).
9. С. В. Кожевников, А. В. Петренко, ЖЭТФ **167**, 491 (2025).
10. F. Pfeiffer, X-ray and neutron waveguides, PhD thesis, Universität des Saarlandes, Saarbrüken, 2002.

Устный доклад

ИЗМЕНЕНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛЕНОК Gd И СВЕРХРЕШЕТОК Fe/Gd В РЕЗУЛЬТАТЕ ГИДРИРОВАНИЯ

М. В. Макарова[1,2]*, *Д. И. Девятериков*[1], *В. Матюхов*[1], *В. Проглядо*[1], *Е. А. Кравцов*[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*E-mail: makarova@imp.uran.ru

В сверхрешётках, состоящих из чередующихся слоёв переходных (Fe, Ni, Co) и тяжёлых редкоземельных (РЗ) (от Gd до Tm) металлов, могут быть реализованы сложные типы внутрислойного и межслойного магнитного порядка. Такие наноструктуры представляют большой интерес как с фундаментальной точки зрения, так и с точки зрения возможного применения в материалах следующего поколения для спинтроники. Магнитная структура таких слоёв определяется конкуренцией различных механизмов, а именно: внутрислойными и межслойными обменными взаимодействиями, эффектами размера и близости, эпитаксиальными напряжениями, структурными особенностями и т. д. Магнитное упорядочение системы определяется сильным антиферромагнитным обменным взаимодействием Gd–Fe, сильным ферромагнитным обменным взаимодействием Fe–Fe и относительно слабым РККИ взаимодействием Gd–Gd, что приводит к существованию сложной диаграммы магнитной фазы, построенной в зависимости от температуры и магнитного поля [1]. Известно, что, в отличие от ферромагнитных 3*d*-металлов (Fe, Ni, Co), редкоземельные металлы легко поглощают водород из окружающей атмосферы даже при низком давлении водорода [2]. Изменяя давление и температуру водорода, можно контролируемо изменять концентрацию водорода в слоях редкоземельных металлов, меняя их структурные, магнитные и электронные свойства. Недавно было показано, что гидрирование может повысить температуру Кюри Gd. Кроме того, процессы поглощения водорода в тонких пленках RE остаются малоизученными. Научная новизна исследования заключается в изучении влияния гидрирования на магнитные свойства пленок Gd и сверхрешёток Fe/Gd, а также в исследовании возможностей контролируемой модификации их атомной и магнитной структур. Для исследования магнитной структуры мы использовали поляризационную нейтронную рефлектометрию (РПН). РПН — это мощный метод, который позволяет оценить концентрацию водорода в слоях Gd и Nb, а также определить химический и магнитный профили по глубине и их изменение в зависимости от температуры.

Серия пленок Nb/Gd(X)/Nb и сверхрешеток: Nb/[Gd(X)/Fe(3.5 нм)]20, где X= 10 – 40 нм изготовлена методом высоковакуумного магнетронного распыления на монокристаллических подложках Al_2O_3 или Si. Для эффективного гидрирования структура была закрыта каталитическим слоем платины или никелем. Гидрирование образцов проходило на установке CVD при давлении водорода 730 Торр. При поглощении водорода Gd образуются кристаллические фазы GdH_2 и GdH_3 [3], особенности магнитной структуры которых исследованы методом рефлектометрией поляризованных нейтронов (РПН).

Установлено, что пленка Gd толщиной 50 нм при переходе в GdH_2 и GdH_3 фазу при гидрировании остается ферромагнитной с уменьшенной температурой Кюри и намагниченностью насыщения, водород распределен неоднородно по объему слоев Gd.

Исследование выполнено в рамках проекта РНФ 24-12-20024. Эксперименты по рефлектометрии поляризованных нейтронов проведены на рефлектометре MR в CSNC (г. Дунгуань, Китай).

1. A. B. Drovosekov, A. O. Savitsky, D. I. Kholin, et al., JMMM **475** (2019).
2. V. Leiner, M. Ay, H. Zabel, Phys. Rev. B. **70** (2004).
3. I. A. Likhachev, I. A. Subbotin, Yu. M. Chesnokov, et al., Physics of Metals and Metallography **124** 12, (2023).

Устный доклад

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ АПРОБАЦИЯ МЕТОДА ОПОРНОГО СЛОЯ ГАДОЛИНИЯ НА ШИРОКОМ Q-ДИАПАЗОНЕ

Е. С. Никова[1]*, *Ю. А. Саламатов*[1], *Е. А. Кравцов*[1,2], *М. В. Макарова*[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*E-mail: e.nikova@mail.ru

Рефлектометрия поляризованных нейтронов – это эффективный и чувствительный метод исследования химического и магнитного строения слоистых наноструктур. Актуальной проблемой данного метода является поиск возможности экспериментального определения амплитуды отражения нейтронов и дальнейшего модельно-независимого анализа потенциала взаимодействия. Перспективным современным подходом является использование опорного слоя с известными характеристиками, нанесенного на неизвестную структуру [1, 2].

Для исследования магнитных слоистых систем в качестве опорного слоя был применен гадолиний. Ядра двух его изотопов (^{155}Gd и ^{157}Gd) взаимодействуют с тепловыми нейтронами резонансным образом, поэтому его длина рассеяния зависит от длины волны нейтронов [3]. Измеряя интенсивность отражения от такой комбинированной структуры при трех различных углах падения (для времяпролетных рефлектометров), можно однозначно определить амплитуду отражения для исследуемой части образца.

Ранее мы провели успешные численные расчеты и эксперименты для простых систем в q–диапазоне от 0 до 0,05 Å^{-1} [4–5]. С использованием алгоритма Левенберга-Марквардта, по рассчитанной амплитуде отражения были уточнены характеристики исследуемых структур (толщины слоев, длины рассеяния, величины межслойных шероховатостей) и построены соответствующие потенциалы взаимодействия. Потенциал взаимодействия можно рассчитать и модельно-независимым методом, используя уравнение Гельфанда–Левитана–Марченко [6–8]. В этом случае амплитуда отражения, теоретически, должна быть известна в диапазоне по $q \in (0; +\infty)$ Å^{-1}. Чем меньше реально достижимый диапазон для конкретного инструмента – тем меньше точность получаемого решения. Но уже при q>0.1 Å^{-1} такое решение может быть использовано в качестве более объективного начального приближения для алгоритма Левенберга-Марквардта, чем модель, построенная по номинальным параметрам. Поэтому необходимо адаптировать метод с опорным слоем гадолиния для работы на широких диапазонах нормальной компоненты q изменения волнового вектора при отражении. Для этого были проведены предварительные модельные расчеты для систем:
Al_2O_3//Ti(160Å)/Gd(25Å)/V(20Å)/Gd(25Å)/V(100Å)
и Al_2O_3//Cr(110Å)/Fe(90Å)/Cr(9Å)/Fe(70Å)/Cr(50Å)/Gd(25Å)/V(20Å)/Gd(25Å)/V(100Å).

Элемент структуры Gd(25Å)/V(20Å)/Gd(25Å)/V(100Å) выступал в качестве опорного слоя. Небольшой слой ванадия между слоями гадолиния позволил несколько усилить эффект от резонансных свойств гадолиния и тем самым увеличилось различие между рефлектометрическими кривыми, полученными на разных углах. Верхний слой ванадия необходим для защиты образца от окисления.

Основная сложность заключена в том, что никаким подбором углов падения невозможно получить три хорошо перекрывающиеся рефлектометрические кривые на широком диапазоне по q. Поэтому большой диапазон (примерно до 0.2 Å^{-1}) был разбит на несколько малых так, чтобы в каждом можно было получить три перекрывающихся

кривых от различных углов. Затем на каждом малом диапазоне определяются модуль и фаза, полученные результаты сшиваются между собой. На рисунке 1 приведены результаты такого моделирования амплитуды отражения для системы Al_2O_3//Cr(110Å)/Fe(90Å)/Cr(9Å)/Fe(70Å)/Cr(50Å) для канала рассеяния «++».

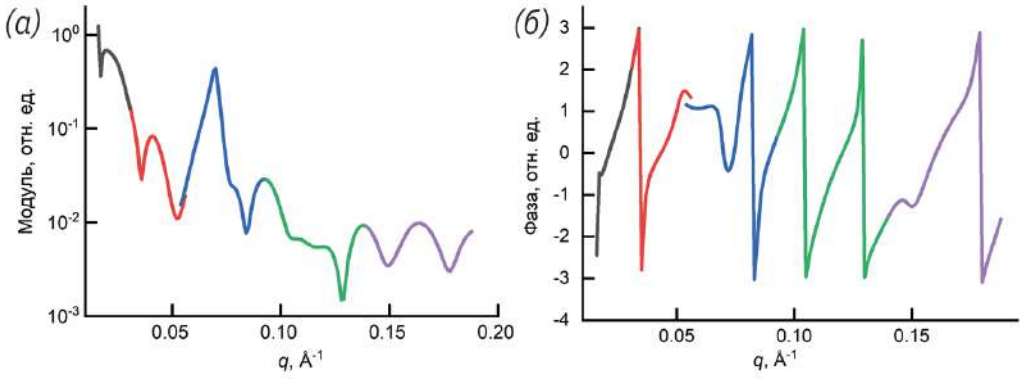

Рис. 1. Результаты моделирования амплитуды отражения системы Al_2O_3//Cr(110Å)/Fe(90Å)/Cr(9Å)/Fe(70Å)/Cr(50Å) для канала рассеяния «++» (*а* – модуль, *б* – фаза).

Смоделированные системы были синтезированы комбинированным методом импульсного лазерного осаждения и магнетронного распыления в Институте физики металлов УрО РАН (Екатеринбург). Толщины слоев в исследуемых системах были определены методом рентгеновской рефлектометрии на дифрактометре PANalytical Empyrean Series 2 в CoKα излучении с длиной волны 1.79 Å в геометрии параллельного пучка. Обработку рефлектограмм проводили с использованием коммерчески доступной программы PANalytical X'Pert Reflectivity. Спектры отражения нейтронов были измерены на многоцелевом рефлектометре (MR) нейтронного источника CSNS (China Spallation Neutron Source).

Результаты модельных расчетов показали, что предлагаемый метод определения амплитуды отражения на коротких *q*-диапазонах и последующего их сшивания позволяет эффективно применять метод опорного слоя гадолиния на широком диапазоне. Также они будут применены при анализе экспериментальных данных, полученных в CSNS в рамках практической апробации данного подхода.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 5 июня 2025 г.

1. C. F. Majkrzak and N. F. Berk, Phys. Rev. B **52**, 10827 (1995).
2. V. O. de Haan et al., Physica B **221**, 524 (1996).
3. J. E. Lynn, P. A. Seeger, Atomic Data and Nuclear Data Tables **44**, 2, 191 (1990).
4. E. S. Nikova, Y. A. Salamatov, E. A. Kravtsov, J. Surface Investigation **17**, 826 (2023).
5. E. S. Nikova, Yu. A. Salamatov, E. A. Kravtsov, et al., J. Surface Investigation **16**, 939 (2022).
6. Z. S. Agranovich and V. A. Marchenkow, The inverse Problem of Scattering Theory. Gordon and Breach, New York (1963).
7. K. Chadan and P. C. Sabatier, Inverse Problems in Quantum Scattering Theory. Text and Monographs in Physics, Springer, Berlin, 2nd ed. (1989).
8. I. Kay, Comm. Pure and Applied Math. **13**, 371 (1960).

Устный доклад

РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ С РАСШИРЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ (РПН+)

Н. К. Плешанов

Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
*E-mail: nk@pnpi.nrcki.ru

Поляризованные нейтроны, рассеянные материалом на поверхности образца, несут богатую и уникальную информацию о его структуре и магнетизме. Структурные и магнитные параметры слоистых систем задают матрицу отражения 2x2, которая описывает зеркальное отражение поляризованных нейтронов без переворота (NSF) и с переворотом (SF) спина. В настоящее время рефлектометрия поляризованных нейтронов (РПН) [1] используется для измерения коэффициентов отражения NSF и SF, т.е. квадратов модулей четырех элементов матрицы отражения.

В представляемой работе рассматриваются методы извлечения разностей фаз элементов матрицы отражения, экспериментальные схемы разностной фазометрии; РПН с расширенными возможностями обозначена как РПН+. Одним из методов РПН+ является 3D-поляриметрия, при которой падающие нейтроны поляризуются в любом заданном направлении, а отраженные анализируются не только в том же, но и в любом другом направлении. 3D-поляриметрия (сферическая нейтронная поляриметрия) реализуется с нулевым полем на образце при использовании комбинации прецессионных катушек [2], в последнее время – с криогенным поляризационным анализатором (CRYOPAD) [3]. В качестве альтернативы обсуждается использование нейтронной спин-манипуляционной оптики [4] с опцией работы при ненулевом поле на образце.

Расчеты коэффициентов отражения нейтронов NSF и SF, проведенные с применением точного численного метода, показывают, что уравнения Малеева-Блюме [5,6], полученные в кинематическом приближении, не применимы при малых переданных импульсах q. Тем не менее, определенные закономерности в зависимостях кинематических дифференциальных сечений рассеяния от ядерных и магнитных параметров структуры, от ориентации спина падающих и отраженных нейтронов воспроизводятся и в коэффициентах отражения при достаточно малых q. Как и в случае дифракционных методов с диагональным поляризационным анализом и сферической нейтронной поляриметрией, дополнительные опции измерений с поляризованными нейтронами могут существенно увеличить потенциал РПН для решения проблем магнетизма слоистых систем. Кроме того, разностная фазометрия является важным шагом на пути к извлечению абсолютных фаз элементов матрицы отражения для прямой, безмодельной реконструкции глубинных профилей ядерного потенциала и компонент намагниченности.

Работа выполнена с поддержкой гранта Российского научного фонда № 23-22-00279.

1. G. P. Felcher, R. O. Hilleke, R. K. Crawford, et al., Rev. Sci. Instrum. **58**, 609 (1987).
2. А. И. Окороков, В. В. Рунов, В. И. Волков, А. Г. Гукасов, ЖЭТФ **69**, 590 (1975).
3. F. Tasset, P. J. Brown and J. B. Forsyth, J. Appl. Phys. **63**, 3606 (1988).
4. N. K. Pleshanov, Nucl. Instrum. Methods A **853**, 61 (2017).
5. С. В. Малеев, В. Г. Барьяхтар, Р. А. Сурис, ФТТ **4**, 3461 (1962).
6. M. Blume, Phys. Rev. **130**, 1670 (1963).

Устный доклад

СТРУКТУРНЫЕ, МАГНИТНЫЕ И МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ГЕМАТИТА НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ c-Al_2O_3

И. А. Субботин[1]*, *А. О. Беляева*[1], *О. А. Кондратьев*[1], *С. С. Дубинин*[2], *А. О. Шориков*[2], *В. В. Изюров*[2], *К. А. Меренцова*[2], *М. С. Артемьев*[2], *И. М. Припеченков*[3], *Е. А. Ганьшина*[3], *А. П. Носов*[2], *Э. М. Пашаев*[1]

[1]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
*E-mail: i.a.subbotin@gmail.com

Возможности антиферромагнитной спинтроники привлекают внимание исследователей и инженеров, открывая новые перспективы для развития современных технологий.

Использование антиферромагнитных материалов позволяет разрабатывать устройства с высокой скоростью работы и низким энергопотреблением, что находит применение в области квантовой электроники, а также при создании сенсоров и актуаторов с высокой точностью и быстрой реакцией, что полезно в различных технических областях.

Особый интерес представляет разработка генераторов и приемников электромагнитного излучения терагерцевого диапазона, которые могут быть интегрированы в современные тонкопленочные технологии. Терагерцевая спинтроника имеет широкую востребованность в системах связи, используется в качестве инструмента диагностики и терапии, а также перспективна в области нейроморфных систем, поскольку нейроны головного мозга работают как раз на терагерцевых частотах. Генераторы электромагнитного излучения на базе ферромагнитных материалов (именуемые также как спин-торковые наноосцилляторы или СТНО) не обеспечивают работу на терагерцевых частотах. Актуальная задача повышения рабочей частоты СТНО до терагерцового диапазона, как это было теоретически предсказано в [1–3], может быть решена путем введения слоев антиферромагнитных материалов. Теоретические оценки, согласно [4,5] показывают, что на базе тонких пленок гематита возможно создание СТНО для работы в терагерцевом диапазоне, но для такой оценки использовались структурные и магнитные характеристики объемного материала гематита. Формирование тонких пленок зачастую происходит на гетерогенных подложках. Специфика такого формирования наноразмерных пленок ввиду особенностей физических процессов, наблюдаемых при росте пленок, оказывает сильное влияние на структурное состояние слоев и интерфейсов и их функциональные свойства.

Целью данной работы являлось установление структурных особенностей тонких пленок гематита различной толщины, сформированных на подложках сапфира, и оценка влияния реальных структурных параметров на их магнитные и магнитооптические свойства.

Ввиду большого несоответствия параметров кристаллических решеток сапфира и гематита, структурное состояние пленок оказывает существенное влияние на их магнитные свойства. В работе методами рентгеновской дифракции, включая картирование узлов обратного пространства, и атомно-силовой микроскопии проанализированы закономерности изменений структурных параметров.

Установлено, что при увеличении толщины пленки происходит смена механизма роста с островкового на послойный. Дальнейшее увеличение толщины пленки сопровождается частичной релаксацией напряжений кристаллической решетки с образованием дефектных и напряженных областей. Последующее заращивание дефектных участков приводит к существенным напряжениям, которые полностью релаксируют за счет кластеризации пленки.

На основе разработанной структурной модели проанализированы полевые и температурные зависимости намагниченности пленок гематита.

Показано, что полевые зависимости намагниченности релаксированных дефектных пленок имеют большую коэрцитивную силу. Наличие внутренних механических напряжений существенно влияет на форму петель гистерезиса пленок.

Установлено, что в напряженных пленках с параметрами решетки, отличными от параметров решетки объемного материала на температурных зависимостях намагниченности не наблюдается переход Морина, а в дефектной пленке, параметры решетки которой близки к объемным значениям, переход Морина наблюдается в более низких температурах.

Также показано, что напряженное состояние пленок гематита значительно ухудшает его магнитооптические характеристики.

Таким образом, в работе прослежена эволюция структурных, магнитных и магнитооптических свойств тонких пленок гематита и показана их полная корреляция. Релаксированная, но дефектная структура пленок действительно улучшает магнитооптические свойства, и с одной стороны, такие пленки можно применять в системах магнитофотоники. Однако при этом дефекты существенно увеличивают коэрцитивную силу, что приводит к невозможности использования таких пленок для создания спинторковых наноосцилляторов терагерцевого диапазона.

Полученные результаты позволят оптимизировать рост наноразмерных пленок гематита, пригодных для создания СТНО терагерцевого диапазона.

1. H. V. Gomonay and V. M. Loktev, Phys. Rev. B **81**, 144427 (2010).
2. E. V. Gomonay and V. M. Loktev, Low Temp. Phys. **40**, 17–35 (2014).
3. R. Cheng, D. Xiao and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **116**, 207603 (2016).
4. O. R. Sulymenko, O. V. Prokopenko, V. S. Tiberkevich, A. N. Slavin, B. A. Ivanov and R. S. Khymyn, Phys. Rev. Appl. **8**, 064007 (2017).
5. A. R. Safin and S. A. Nikitov, Radiophys. Quantum Electron. **61**, 834–840 (2019).

Секция 5.

Специальная секция: «Синхротронное излучение и лазеры на свободных электронах»

ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР АДСОРБИРОВАННЫХ БЕЛКОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Ю. В. Ларичев[1,2,3]

[1]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия
[3]ЦКП «СКИФ» Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия
*E-mail: ylarichev@gmail.com

В настоящее время метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) активно используется для анализа структуры белков в растворах [1]. Тем не менее, при использовании синхротронного излучения (СИ) возникают радиационные повреждения белковых структур, что порой является существенным ограничивающим фактором возможностей метода. Поскольку основная причина радиационных повреждений связана с радиолизом воды и дальнейшим разрушением структуры белка при контакте с образующимися радикалами, то традиционно с ними пытаются бороться частичной заменой водной среды на глицерин или другие стабилизаторы [2]. Такой прием с одной стороны повышает радиационную стабильность системы, но с другой ухудшает чувствительность МУРР за счет большего контраста водно-глицериновых смесей по сравнению с чистой водой. Поэтому полное отсутствие водной среды при анализе белков методом МУРР теоретически способно повысить как их стабильность к радиационным повреждениям, так и чувствительность за счет отсутствия эффекта контрастирования. Основная задача в таком случае - как получить неагрегированные молекулы белка без использования растворителя. В работе обсуждается подход, основанный на использовании адсорбции белков на пористых носителях различной природы. При адсорбции белков на пористых материалах, пористая структура материала остается без изменений, что позволяет применить стандартное вычитание кривой малоуглового рассеяния от исходной матрицы из кривой малоуглового рассеяния от системы ”адсорбированный белок - пористая матрица”для получения структурной информации об адсорбированном белке. На примере альбумина было показано, что в ряде случаев возможно получение неагрегированных молекул белка на пористой подложке. Из полученных данных была восстановлена структура альбумина низкого разрешения в адсорбированном виде и проведено ее сравнение с аналогичными данными как для водного раствора, так и с литературными данными РСА полученными от закристаллизованного белка. Показано, что в пределах разрешения метода МУРР данные хорошо согласуются друг с другом. При этом использование такого подхода дает существенный выигрыш в чувствительности (до двух порядков) за счет отсутствия эффекта контрастирования растворителем и большей концентрации белка. В большинстве остальных случаев наблюдалась агрегация альбумина на пористых носителях. В полученных полидисперсных системах была определена доля неагрегированных молекул белка, доля октамеров-додекамеров, также доля более крупных агрегатов. Эти данные в свою очередь могут быть полезны при оптимизации процессов кристаллизации белков при тестировании различных осадителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН, проект FWUR-2024-0032. Также автор выражает благодарность ЦКП «ВТАН» НГУ за предоставление измерительного оборудования.

1. S. Da Vela and D. I. Svergun, Current Research in Structural Biology **2**, 164–170 (2020).
2. C. M. Jeffries et al., J. Synchrotron Rad. **22**, 273–279 (2015).

Приглашенный доклад

ДЕТЕКТОРЫ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ПУЧКАХ СИ

Л. И. Шехтман

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
*E-mail: L.I.Shekhtman@inp.nsk.su

В докладе будут рассмотрены основные типы детекторов, которые применяются для экспериментов на пучках синхротронного излучения, в том числе пластины на основе люминофоров и памятью, детекторы на основе ПЗС- и КМОП-матриц, активные панели на основе аморфного кремния, гибридные пиксельные детекторы. Отдельно будут описаны детекторы для экспериментов по изучению быстропротекающих процессов, разрабатываемые для специализированной станции ЦКП СКИФ «Быстропротекающие процессы».

Устный доклад

СТРУКТУРНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ФРАНЦИСИТА $Cu_3Bi(SeO_3)_2O_2Cl$ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Б. А. Абдурахимов[1]*, *А. В. Руткаускас*[1], *Г. С. Римский*[2], *С. Е. Кичанов*[1], *Е. В. Лукин*[1], *Д. П. Козленко*[1], *Б. Н. Савенко*[1]

[1]Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]ГО «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь

*E-mail: bekhzod@jinr.ru

В последние несколько десятилетий низкоразмерные магнитные материалы привлекают значительное внимание в экспериментальных и теоретических исследованиях. Было обнаружено, что они проявляют такие физические явления, как сегнетоэлектричество, спиновая жидкость, а также свойства, присущие мультиферроикам. Это делает их перспективными для практического применения в спинтронике и квантовых вычислениях. К таким соединениям относятся материалы на основе $Cu_3R(SeO_3)_2O_2X$ (R – редкоземельный элемент, X – Cl, Br), которые называются франциситами. Они представляют собой геометрически фрустрированные спиновые системы со слоистыми магнитными конфигурациями. При температурах ниже $T_N \sim 26$ K возникает антиферромагнитное состояние, в котором ориентация спинов Cu^{2+} ферромагнитно расположена вдоль слоев кагоме, которые упорядочены антиферромагнитно друг с другом. Предполагается, что магнитные свойства франциситов можно объяснить наличием двух различных неэквивалентных ионов Cu^{2+} в кристаллической структуре, что вызывает фрустрацию, вызванную конкуренцией ферромагнитных Cu–O–Cu ближайших соседей и антиферромагнитных Cu–O–O–Cu следующих ближайших соседей обменных взаимодействий в слоях кагоме. В результате франциситы является хорошим модельным соединением, где сильные корреляции между кристаллической структурой и физическими свойствами могут быть ключевым фактором в понимании сложных квантовых явлений в низкоразмерных магнитных материалах.

Следует отметить, что применение высокого давления может вызвать значительные изменения в кристаллической структуре материалов. Недавно измерения намагниченности при низких давлениях до 1,3 ГПа показали увеличение температуры Нееля в $Cu_3R(SeO_3)_2O_2Cl$. Однако исследования кристаллической структуры франциситов при высоких давлениях еще не проводились.

В нашей работе представлены результаты исследования соединения $Cu_3Bi(SeO_3)_2O_2Cl$ методами рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии в широком диапазоне давлений до ~18 ГПа при комнатной температуре. С помощью рентгеновской дифракции при высоком давлении был обнаружен кристаллический структурный переход от исходной орторомбической кристаллической структуры с пространственной группой *Pmmn* к пространственной группе *Pcmn* при давлении 5.5 ГПа. Для этой фазы кристаллической структуры были определены параметры решетки, длины связей и объемный модуль упругости. Результаты рамановской спектроскопии указывают на тот же кристаллический структурный переход под высоким давлением. Кроме того, спектры рамановских колебательных мод показывают значительные аномалии около 5 и 10 ГПа. Эти эффекты, вызванные давлением, также могут привести к изменениям магнитных свойств этого геометрически фрустрированного магнитного материала.

Устный доклад

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА РОСТА ПЛЕНОК НИТРИДОВ СПЛАВА TiNbZrTaHfCu

Ю. Ф. Иванов[1]*, *Н. А. Прокопенко*[1], *Е. А. Петрикова*[1], *Ю. Х. Ахмадеев*[1], *О. В. Крысина*[1], *Н. Н. Коваль*[1], *А. Н. Шмаков*[2]

[1]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
*E-mail: yufi55@mail.ru

Известно, что покрытия и пленки, в том числе и керамические, сегодня являются одной из наиболее востребованных форм промышленного и медицинского применения различных материалов. Вместе с тем получению керамических (нитридных, оксидных, боридных, карбидных и т.д.) пленок ВЭС и исследованию их структуры и свойств посвящено относительно немного работ по сравнению с объемными сплавами [1]. Наиболее часто структуру пленок ВЭС изучают высокоразрешающими методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии [1,2]. Однако данный метод исследования и многие ему подобные позволяет проводить изучение структуры уже сформировавшейся пленки. Работы, выполненные с использованием синхротронного излучения, дают возможность провести исследование структуры материала, применяя методы рентгеноструктурного анализа с высоким инструментальным разрешением [3,4], а также рассмотреть эволюцию структуры и фазового состава материала пленки в процессе ее формирования. Так в работах [5,6] с помощью катодно-дуговой испарительной камеры оригинального изготовления, приспособленной для исследований с использованием синхротронного излучения, были выполнены *in situ* исследования эволюции напряжения/деформации и микроструктуры поликристаллических тонких пленок нитрида $Al_xTi_{1-x}N$ (x = 0, 0,25, 0,5 и 0,67) при различном напряжении смещения подложки.

Целью настоящей работы является исследование процесса формирования нитридного покрытия на основе высокоэнтропийного сплава (ВЭС) состава TiNbZrTaHfCu, выполненное in situ методом рентгенофазового анализа с высоким инструментальным разрешением с использованием синхротронного излучения.

Материалом исследования являлся высокоэнтропийный сплав TiNbZrTaHf состава, близкого к эквиатомному, легированный атомами меди и синтезированный в виде тонких (до 2,5 мкм) пленок. Подложкой являлись образцы твердого сплава ВК8 и ВТ1-0 размерами 10×10×5 мм. Формирование пленки осуществляли осаждением из многоэлементной газо-металлической плазмы, созданной при одновременном вакуумно-дуговом испарении катодов состава TiNbZrTaHf и Cu в режиме с плазменным ассистированием (Ar+N). Эксперименты по нанесению многоэлементных нитридных пленок проводили на установке ВЭИПС-1 [7]. Процесс формирования структуры тонких пленок *in situ* с высоким временным разрешением изучали, используя источник синхротронного излучения – накопитель электронов ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН. Съемка и запись рентгенограмм осуществлялись в непрерывном режиме каждую минуту в течение 120 мин.

Методами микрорентгеноспектрального анализа установлено, что сформированная нитридная пленка имеет следующий химических состав (ат. %): 9,6Zr; 10,6Nb; 24,2Ti; 15,8Hf; 11,3Cu; 17,2Ta; 11,3N. Процесс формирования пленки в режиме реального времени изучали методами рентгенофазового анализа, используя источник синхротронного излучения. На рис. 1(слева) приведены фрагменты рентгенограмм, полученных

на стадии очистки подложки (14 мин.); на различных стадиях формирования системы «пленка/подложка» в вакууме (14–74 мин.) и после охлаждения (119 мин.). Форма дифракционных линий дает основание сказать, что пленка является рентгеноаморфным (аморфно-кристаллическим) материалом, основными фазами которого являются (TiNbZrTaHfCu)N и Cu. Методами дифракционной электронной микроскопии установлено, что пленка является нанокристаллическим материалом с размером кристаллитов (2–5) нм (рис. 1, справа). Применение *in situ* исследований методами рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения позволило выявить временные интервалы формирования и перестройки обнаруженных фаз.

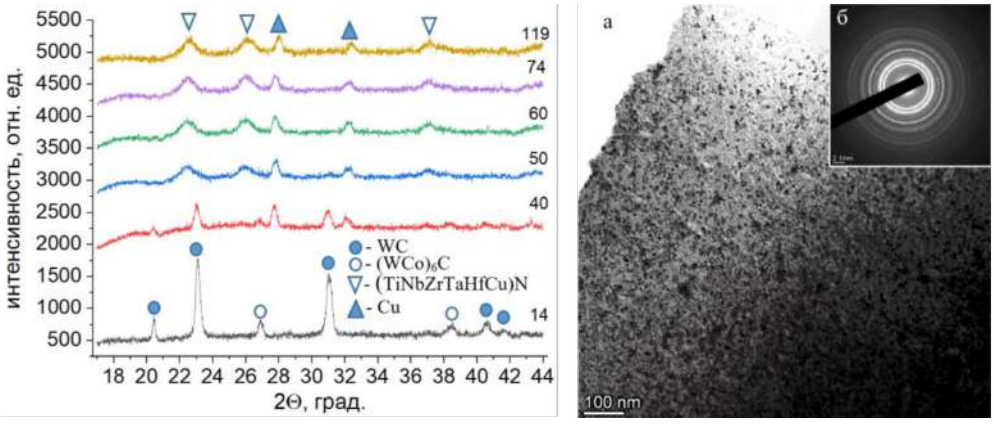

Рис. 1. Слева – фрагменты рентгенограмм системы «пленка/подложка», полученные на различных стадиях напыления нитридного слоя. Длительность процесса указана числами (мин.). Справа – структура пленки (*а*) и ее микроэлектронограмма (*б*). Просвечивающая электронная микроскопия.

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания ИСЭ СО РАН (тема № FWRM-2021-0006).

1. В. Ф. Горбань, А. А. Андреев, Л. Р. Шагинян, и др., Сверхтвердые материалы **2**, 19 (2018).
2. Н. А. Азаренков, О. В. Соболь, В. М. Береснев, и др., Metallofiz. Noveishie Tekhnol. **35**, 1061 (2013).
3. Yu.F. Ivanov, N. A. Prokopenko, V. V. Shugurov, et al., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **17**, 1452 (2023).
4. Yu. F. Ivanov, Y. Kh. Akhmadeev, N. A. Prokopenko, et al., Coatings **13**, 1191 (2023).
5. J. L. Schroeder, W. Thomson, B. Howard, et al., Rev. Sci. Instrum. **86**, 95113 (2015).
6. S. Nayak, T. W. Hsu, R. Boyd, et al., Acta Materialia **272**, 119899 (2024).
7. Yu. F. Ivanov, Yu. H. Akhmadeev, N. A. Prokopenko, et al., Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. **87**, 250 (2023).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ IN SITU С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ПОКРЫТИЯ ИЗ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА TiNbZrTaHf ЛЕГИРОВАННОГО МЕДЬЮ

Н. А. Прокопенко[1]*, *Е. А. Петрикова*[1], *Ю. Ф. Иванов*[1], *Н. Н. Коваль*[1], *А. Н. Шмаков*[2], *О. С. Толкачёв*[1]

[1]Institute of High Current Electronics SB RAS, Russia, Tomsk
[2]Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Russia, Novosibirsk
*E-mail: nick08_phantom@mail.ru

В 2010 году был разработан высокоэнтропийный сплав (ВЭС) состава TiNbZrTaHf, который до сих пор считается одним из наиболее удачных RHEAs [1].

ВЭС состава TiNbZrTaHf обладает необычным набором свойств. В [2] показано, что сплав TiNbZrTaHf сочетает высокие значения прочности и пластичности при комнатной температуре, демонстрируя предел текучести (800–1000) МПа и деформацию сжатия, превышающую 50 %. В [3] показано, что ВЭС TiNbZrTaHf обладает высокой коррозионной стойкостью. Сплав TiNbZrTaHf содержит только биосовместимые элементы, следовательно, он может быть использован в биомедицинских целях [4]. В [5] показано, что ионы меди могут подавлять жизнедеятельность бактерий и патогенных микроорганизмов, устойчивых к различным видам антибиотиков. По сравнению с наночастицами металлосодержащие тонкие плёнки обладают относительно низкой токсичностью, сохраняя при этом высокие показатели антибактериальной активности [6]. Медь при этом обладает наименьшей цитотоксичностью.

Целью работы является исследование процесса формирования пленок системы Ti-Nb-Zr-Ta-Hf-Cu с различным содержанием меди в режиме реального времени методом рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения. Эксперименты по нанесению многоэлементных пленок металлов проводили на установке ВЭИПС-1, разработанной в ИСЭ СО РАН для исследования процессов формирования пленок и покрытий на источнике синхротронного излучения. Процесс формирования структуры тонких пленок in situ с высоким временным разрешением изучали, используя источник синхротронного излучения – накопитель электронов ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН.

Формирование пленки осуществляли осаждением из многоэлементной газо-металлической плазмы, созданной при одновременном вакуумно-дуговом испарении катодов состава TiNbZrTaHf и Cu в режиме с плазменным ассистированием в атмосфере аргона. Исследование структуры пленок осуществляли методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии. При нанесении плёнок изменялся ток разряда дугового испарителя с медным катодом (I_{Cu}=0 А, I_{Cu}=55 А и I_{Cu}=80 А), а, следовательно, и содержание меди в покрытии.

На рис. 1 приведен набор рентгенограмм, полученных *in situ* во время нанесения покрытия TiNbZrTaHfCu при токе разряда дугового испарителя с медным катодом I_{Cu}=80 А. Выявлено формирование аморфно-кристаллического состояния, основной фазой которого является высокоэнтропийный сплав состава TiNbZrTaHfCu.

Методами просвечивающей электронной микроскопии установлено, что пленка сплава TiNbZrTaHf без атомов меди (I_{Cu}=0 А), имеет столбчатую структуру (рис. 2, *а*). Столбики сформированы кристаллитами размерами (2–5) нм. При I_{Cu}=55 А относительное содержание атомов меди в пленке составило 9–10 ат.%, пленка имеет аморфно-кристаллическую структур, в которой столбики кристаллической фазы расположены в аморфной структуре (рис. 2, *б*). При $I_{C}u$=80 А относительное содержание атомов меди в пленке составляет более 25 ат.%, пленка имеет аморфную структуру (рис. 2, *с*).

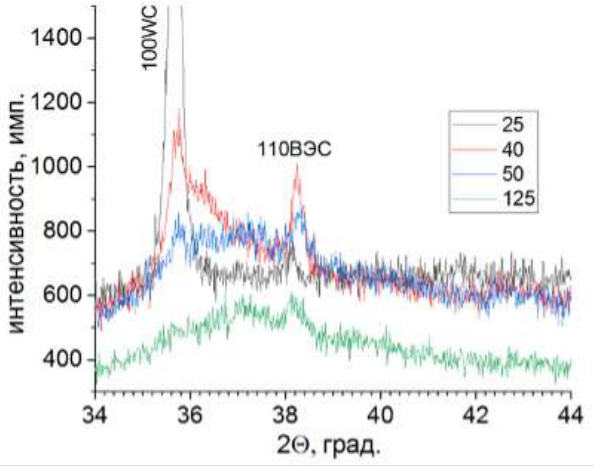

Рис. 1. Фрагменты рентгенограмм, полученных на различных стадиях напыления пленки; числами указана длительность процесса формирования пленки в минутах.

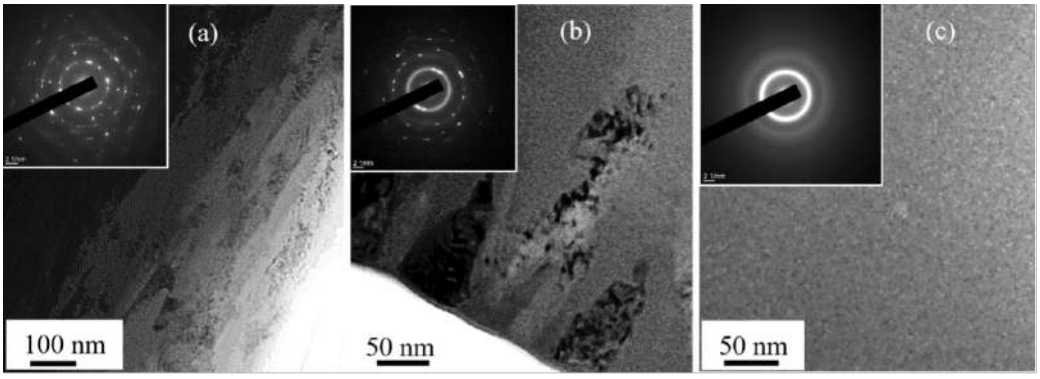

Рис. 2. Электронно-микроскопическое изображение структуры пленок сплава TiNbZrTaHf при относительном содержании атомов меди 0.0 ат. % (*a*); 9.6 ат. % (*b*); 41.9 ат. % (*c*).

Таким образом, показано, что изменяя ток разряда дугового испарителя с медным катодом можно варьировать концентрацию атомов меди в пленке сплава TiNbZrTaHf-Cu и, следовательно, управлять структурой и свойствами синтезируемого материала.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (Грант № 24-69-00074).

1. O. N. Senkov, G. B. Wilks, D. B. Miracle, C. P. Chuang, P. K. Liaw, Intermetallics **18**, 1758 (2010).
2. F. G. Coury, M. Kaufman, A. J. Clarke, Acta Mater. **175**, 66 (2019).
3. J. Jayaraj, C. Thinaharan, S. Ningshen, C. Mallika, U. K. Mudali, Intermetallics **89**, 123 (2017).
4. M. Slobodyan., E. Pesterev., A. Markov, Materials Today Communications **36**, 106422 (2023).
5. S. I. Al-Saeedi, N. S. Al-Kadhi, G. M. Al-Senani, O. A. Almaghrabi, A. Nafady, International Journal of Biological Macromolecules **182**, 464 (2021).
6. X. He, G. Zhang, X. Wang, et al., Ceramics International **43**, 16185 (2017).

Устный доклад

ПРИМЕНЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ ДЛЯ ХИМИЧЕСКИ- И ЗАРЯДОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО АНАЛИЗА

Т. В. Кузнецова[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*E-mail: kuznetsova@imp.uran.ru

Обсуждается новый метод характеристики фотоэлектрических и фотопроводящих эффектов на поверхности по изменению рентгеновских фотоэлектронных спектров (РФЭС), индуцированному лазерным излучением. Применимость метода продемонстрирована на большом количестве объектов и систем, включая гомо- и гетеропереходные материалы для солнечных элементов, металлические и полупроводниковые подложки и пленки [1-5]. Регистрируя сдвиги энергии связи рентгеновских фотоэлектронных спектров, подвергая образцы различным оптическим и электрическим воздействиям (постоянный ток, электрические и оптические импульсы в широком диапазоне частот и длин волн), можно получить информацию о накоплении заряда на поверхности исследуемых материалов и структурах. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия является мощным спектроскопическим методом для характеристики электронной структуры поверхности с элементно-селективной чувствительностью. Фотоэлектронные спектры несут информацию об электронных состояниях различных атомов в пределах десятков нанометров под поверхностью, а также информацию о локальных изменениях потенциала. Если заряд испускаемых электронов не компенсируется внешним потоком от источника электронов или непосредственно от подложки, локальные потенциалы могут изменяться из-за изменений локальной проводимости, что приводит к различным количествам сохраненного заряда. Ранее Коэн [6] и др. показали, что сдвиги поверхностного потенциала под воздействием света наблюдались в спектрах РФЭС композитных полупроводниковых поверхностей. Было показано, что статические или квазистатические сдвиги фотоэмиссионных пиков могут быть связаны с фотовольтаическими и фотопроводящими свойствами. Лазер создает носители, которые экранируют положительный заряд дырки. Энергия остатка уменьшается, кинетическая энергия и, следовательно, энергия связи уменьшается, внутренние уровни сдвигаются в одну сторону, одни больше, другие меньше. Металлический слой в слоистой гетероструктуре обеспечивает замыкание токовой цепи вместе с потоком электронов, создаваемых электронной пушкой. В пленках на стеклянных подложках происходит компенсация заряда фотоэлектронов при обдуве электронным пучком, но нет быстрой сверхатомной релаксации за время выхода фотоэлектрона (или она существенно меньше). Более полное экранирование заряда дырки на внутреннем уровне (металла), неполное (стекло) при включенном лазере. Металлические слои обеспечивает быстрый перенос заряда на возбужденный атом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-72-00067).

1. O. Ekiz et.al., ACS Nano **4**, 4, 1851–1860 (2010).
2. N. Johnson et.al., J. Vac. Sci. Technol. A **34**, 031201 (2016).
3. D. N. Krishna et. al., Applied Surface Science Advances **12** 100332 (2022).
4. F. Joucken et.al., Nano Lett. **19**, 2682 (2019).
5. K. Wood, Nature Communications **9**, 2490 (2018).
6. H. Cohen et. al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **176**, 24–34 (2010).

Устный доклад

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $Zr_xTi_{1-x}S_2$

А. И. Меренцов[1]*1*, А. Ю. Кузнецова*[1], А. С. Шкварин*[1], А. Королёва*[2], Е. Жижин*[2], *Р. Г. Чумаков*[3], А. Н. Титов*[1]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Научно-исследовательский парк, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: Alexander.Merentsov@urfu.ru

Дисульфиды титана и циркония являются изоструктурными представителями семейства дихалькогенидов переходных металлов [1]. TiS_2 является полуметаллом с перекрытием порядка 0.2 эВ и характерной квадратичной температурной зависимостью электросопротивления [2], в то время как ZrS_2 – полупроводник с непрямой щелью порядка 1 эВ [3]. При последовательном замещение по подрешётке переходного металла можно ожидать изменения ширины фундаментальной щели без изменения концентрации свободных носителей заряда. При этом, как показано ранее, возможен перенос заряда с одного металла на другой [4]. Такой перенос заряда делает в замещённых кристаллах устойчивой гетерогенную морфологию типа структурных фрагментов в пределах одного монокристалла. В настоящей работе исследуется электронная структура замещённых соединений $Zr_xTi_{1-x}S_2$ в связи с обнаруженной методом атомно-силовой микроскопии гетерогенной морфологией монокристаллов.

Монокристаллы системы $Zr_xTi_{1-x}S_2$ выращены методом газотранспортных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах по методике, аналогичной той, что использовалась ранее для выращивания кристаллов системы $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ [4]. Рентгеновские фотоэлектронные спектры XPS были получены на фотоэлектронном спектрометре Escalab 250Xi (Thermo Fisher Scientific), оснащенном источником монохроматического излучения AlKα (энергия фотонов 1486,6 эВ) в Ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Санкт-Петербургского университета. Рентгеновские фотоэлектронные спектры (XPS), рентгеновские спектры поглощения (XAS) и спектры валентных полос в режиме резонансного возбуждения (ResPES) получены на экспериментальной станции НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва) [5]. Все измерения проводились при комнатной температуре в сверхвысоком вакууме порядка 1×10^{-9} мбар на монокристаллах. Чистая поверхность получена путём скола кристалла в рабочей камере спектрометра.

Увеличение концентрации циркония приводит к последовательному сдвигу энергии связи внутренних уровней S 2*p*, Ti 2*p*, Zr 3*d*. Аналогичный сдвиг был обнаружен ранее для кристаллов системы $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ [4]. На спектрах рентгеновского поглощения Ti L_3 хорошо видно изменение относительной интенсивности высоко- и низкоэнергетичного пиков. Вместе с этим наблюдается выраженный резонанс вблизи уровня Ферми на спектрах валентной полосы, полученной в режиме возбуждения, соответствующего Ti $2p - 3d$ переходу. Комплекс наблюдаемых явлений объясняется переносом заряда с ZrS_2 на TiS_2. Наибольший интерес представляют кристаллы состава $Zr_{0.5}Ti_{0.5}S_2$, в которых наблюдается два состояния серы, в отличие от остальных кристаллов системы $Zr_xTi_{1-x}S_2$. Аналогичная картина наблюдалась ранее в кристаллах системы $Cr_xTi_{1-x}Se_2$ [6] и объяснялась формированием структурных фрагментов на основе $TiSe_2$ и $CrSe_2$.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект РНФ № 24-23-20136, соглашение 9-25-МГ).

1. J. A. Wilson, A. D. Yoffe, Adv. Phys. **18**, 193 (1969).
2. P. C. Klipstein et al., J. Phys. C: Solid State Phys. **14**, 40674081 (1981).
3. Qianqian Xin et al., Physica E **93**, 87 (2017).
4. A. I. Merentsov et al., J. Chem. Phys. **162**, 044704 (2025).
5. A. M. Lebedev et al., J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **15**, 1039 (2021).
6. A. I. Merentsov et. al., J. Phys. Chem. Solids **160**, 110309 (2022).

Устный доклад

ОТ СИНХРОТРОНА К РЕАКТОРУ: ТРАНСФЕР И ИМПЛЕМЕНТАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

А. В. Рогачев[1]*, *Е. О. Серов*[1], *П. С. Савченков*[1,2], *А. С. Комлев*[1], *А. Д. Печников*[1], *Г. В. Пруцков*[1], *В. И. Боднарчук*[1,3,4], *А. В. Белушкин*[1,3,4], *С. Н. Якунин*[1]

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[4]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
*E-mail: A.V.Rogachev@ya.ru

Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований включает в себя источник синхротронного излучения «Курчатов» (КИСИ) и исследовательский реактор мощностью 8 МВт (ИР – 8). Оба объекта класса «мега-сайенс» существуют в тесной технологической и методической взаимосвязи, ярким примером которой является реализация метода нейтронной рефлектометрии на стенде «НЕПТУН».

Основываясь на опыте работ в международных центрах синхротронных исследований и многолетней эксплуатации Курчатовского синхротрона, внутри КИСИ была разработана концепция аппаратной и программной базы системы автоматизации управления (САУ) экспериментом. Система уже успешно развернута на 3 синхротронных установках, протестирована и оптимизирована под задачи комплекса.

Данная концепция, также взята за основу в проектах по созданию новых и модернизации старых источников синхротронного излучения в России – «СИЛА», «РИФ», ТНК Зеленоград, КИСИ – 2.

Стенд рефлектометрии поляризованных нейтронов «НЕПТУН» на ИР-8 создавался на базе разработанной для синхротронных станций САУ. Формат и структура хранения экспериментальных данных, алгоритмы управления движением и настройки эксперимента, архитектура системы и аппаратные компоненты полностью унифицированы с синхротронными. Выбранный подход обеспечил единообразие рабочих процессов, удобство совместной обработки синхротронных и нейтронных экспериментальных данных, а также упростил подготовку персонала.

Конструкция стенда рефлектометрии поляризованных нейтронов на ИР-8 заимствует часть решений используемых на экспериментальных станциях синхротрон. От синхротрона был унаследован как общий подход к созданию коллимационных элементов, так и непосредственно, модифицированные для отсечения нейтронных потоков рентгеновские электромеханические створки.

Продуктивным оказалось и взаимодействие с ондуляторной синхротронной группой. В целях упрощения требований к системам позиционирования была разработана, изготовлена и протестирована компактная сборка на основе неодимовых магнитов для создания однородного магнитного поля вокруг поляризующих суперзеркал.

Естественно, взаимодействие между нейтронным сообществом и рентгеновским проходило и на самом очевидном уровне – комплементарной диагностике систем. Тестовые образцы (созданные также внутри КИСИ) и использовавшиеся для определения параметров стенда проходили проверку на рентгеновских установках.

Таким образом, разработка стенда «НЕПТУН» стала примером эффективной трансляции и имплементации технологических и инженерных решений из синхротронной в нейтронную область диагностики материалов. Коллектив разработчиков рассчитывает в дальнейшем увеличивать число подобных примеров эффективного взаимодействия.

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГАЛОГЕНИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ РЕНИЯ РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

А. Д. Федоренко[1]*, *И. П. Асанов*[1], *С. Н. Бердюгин*[1], *А. Д. Николенко*[2,3]

[1]ИНХ СО РАН, Новосибирск, Россия
[2]ЦКП «СКИФ», Кольцово, Россия
[3]ИЯФ СО РАН, Новосибирск, Россия
*E-mail: fedorenko@niic.nsc.ru

В настоящее время особенный интерес вызывают исследования в области молекулярного магнетизма в связи с появлением мономолекулярных магнетиков и одноядерных мономолекулярных магнетиков, что находит применение в устройствах накопления информации с высокой плотностью, квантовых вычислениях, устройств спинтроники, разработке мультифункциональных магнитных материалов. Электронная структура и уникальные магнитные свойства таких материалов связаны со структурой ближайшего окружения парамагнитного металлоцентра и дальним магнитным порядков в соединениях. Использование 5*d*-переходных металлов позволяет получить комплексы с значительной одноионной магнитной анизотропией из-за релятивистских эффектов и сильного спин-орбитального взаимодействия. Следует отметить, что одними из перспективных соединений являются галогенидные октаэдрические комплексы Re(IV), обладающие большим значением спина S=3/2 и высоким значением параметра магнитной анизотропии, связанной со спин-орбитальным взаимодействием. Исследование механизмов, управляющих свойствами таких материалов являются актуальной научной задачей.

Важными методами для изучения электронной структуры материалов являются рентгеновские спектроскопические методы – рентгеновская спектроскопия поглощения, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Такая совокупность рентгеноспектральных методов дает возможность полностью охарактеризовать зарядовые, спиновые, орбитальные состояния атомов в системе. Рентгеновская спектроскопия поглощения широко используется для изучения электронной структуры материалов. Определение зарядового состояния атомов осуществляется по сдвигу линии краев поглощения. Спектры поглощения краев Re $L_{2,3}$, так называемая «белая линия», сканируют локализованные 5*d* состояния, что дает возможность изучать заселенность 5*d* состояний и оценивать степени окисления атомов Re. Моделирование спектров поглощения краев Re $L_{2,3}$ показывает чувствительность формы линии к параметрам ближайшего окружения. Измерение отношения интенсивностей белой линии L_3/L_2 краев рентгеновского поглощения дает возможность определить значение величины параметра спинорбитального взаимодействия LS и число электронных дырок в системе [1]. Новые возможности открывает измерения Re L_1 края поглощения [2]. L_1 край поглощения более чувствителен к геометрической структуре и магнитному упорядочению, поскольку зондирует делокализованные Re 6*p* состояния и, таким образом, можно исследовать 3 и более координационных сфер атомов Re. XANES спектры Cl K края чувствительны к перераспределению электронной плотности и искажению структуры ближайшего окружения центрального атома Re.

В данной работе были исследованы магнитные свойства и получены рентгеновские Re $L_{1,2,3}$ и Cl K спектры поглощения октаэдрических галогенидных комплексов Re(IV)

$[NH_4]_2[ReCl_6]$, в которых происходит замещение аммоний-катиона на катион $[M(NH_3)_4]^{2+}$, M = Pd, Pt. Для интерпретации полученных результатов были проведены расчеты для молекулярных структур и модельных кластеров $[ReX_6]^{2-}$ с использованием многоконфигурационного метода SA-CASSCF/NEVPT2 с учетом спин-орбитального взаимодействия. Совместное использование экспериментальных рентгеновских методов и теоретических расчетов позволило исследовать корреляции магнитные свойств – намагниченности, параметра магнитной анизотропии, с зарядовым, спиновым, орбитальным взаимодействиями.

Проведенные исследования показывают, что в октаэдрических комплексах $[ReX_6]^{2-}$ наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к значительным искажениям Яна-Теллера. Кроме этого, нами было показано, что замещение катионов в ряду $(NH_4)_2$ – $Pd(NH_3)_4$ – $Pt(NH_3)_4$ также значительно влияет на магнитные свойства в октаэдрических комплексах галогенидов 5*d* металлов, что может быть связано с влиянием катионного эффекта на электронную структуру и магнитные свойства вследствие перераспределения электронной плотности. Магнитное упорядочивание в октаэдрических комплексах Re(IV) осуществляется посредством суперобменного взаимодействия Re–X...X–Re, где X – атомы лиганда, при чем обменные взаимодействия в разных направлениях имеют разный знак.

В работе использовалось оборудование ЦКП «СЦСТИ» на базе УНУ «Комплекс ВЭПП-4– ВЭПП-2000» в ИЯФ СО РАН. Квантовохимические расчеты были выполнены с использованием ресурсов ЦКП «Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН».

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 25-22-00228).

1. T. I. Asanova, I. P. Asanov, K. V. Yusenko, et al., Mat. Res. Bull. **144**, 111511 (2021).
2. A. Tougerti, S. Cristol, E. Berrier, et al., Phys. Rev. B **85**, 125136 (2012).

Устный доклад

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ БИ-ИНТЕРКАЛИРОВАННОГО $Fe_xNi_yTiSe_2$

А. С. Шкварин[1]*, *Е. Г. Дьячков*[1], *А. И. Меренцов*[1], *А. Королёва*[2], *Е. Жижин*[2], *Р. Г. Чумаков*[3], *А. Н. Титов*[1]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Научно-исследовательский парк, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[3]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: shkvarin@imp.uran.ru

Композитные материалы на основе слоистых дихалькогенидов титана привлекают внимание с точки зрения возможности внедрения различных атомов или молекул в межслоевое пространство и модификации их свойств таким путем [1]. Ранее было изучено влияние внедрения железа и никеля по-отдельности на кристаллическую структуру и свойства. В этих системах было обнаружено явление ретроградной растворимости, когда при нагреве Fe_xTiSe_2 и Ni_xTiSe_2 (x = 0–0.5) фиксируется выделение железа и никеля, которые реагируют с халькогеном, формируя селениды [2,3]. Температуры выделения железа и никеля различны, что может быть использовано для направленного синтеза композита с требуемыми включениями. Изучение электронной структуры однородного би-интеркалатного соединения позволит понять, как происходит взаимодействие интеркалированных атомов друг с другом и с решеткой матрицей.

Экспериментальное исследование системы $Fe_xNi_yTiSe_2$ проводилось на монокристаллических образцах, выращенных из предварительного приготовленных поликристаллических фаз. Монокристаллы $Fe_xNi_yTiSe_2$ были выращены в кварцевых ампулах методом газотранспортной реакции с использованием I_2 в качестве газа-носителя [4]. Химический состав выращенных монокристаллов оценивали методом EDX с использованием сканирующей электронной микроскопии.

Спектры фотоэлектронной спектроскопии XPS были получены на фотоэлектронном спектрометре Escalab 250Xi (Thermo Fisher Scientific), оснащенном источником монохроматического излучения Al$K\alpha$ (энергия фотонов 1486,6 эВ) в Ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Санкт-Петербургского университета. Рентгеновские спектры поглощения (XAS) и спектры валентных полос в режиме резонансного возбуждения (ResPES) измерялись на экспериментальной станции NanoPES на Курчатовском источнике синхротронного излучения (Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва) [5]. Все измерения проводились при комнатной температуре в сверхвысоком вакууме порядка 1×10^{-9} мбар на сколотых в вакууме образцах.

Концентрационных зависимостей в спектрах железа и никеля практически не наблюдается (вне зависимости от того, какой интеркалант меняет концентрацию). При это наблюдается изменение спектров титана и селена. Спектры поглощения также демонстрируют схожее поведение. В спектрах валентной полосы в резонансном Ti $2p - 3d$ режиме возбуждения наблюдается две резонансных полосы вблизи уровня Ферми. Это соответствует резонансу отдельно от подсистем Fe_xTiSe_2 и Ni_xTiSe_2. Общий анализ спектров показывает, что атомы железа и никеля слабо взаимодействуют друг с другом, при этом наблюдается сильное взаимодействие с решеткой матрицей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области (проект № 24-23-20029, соглашение 5-24-МГ).

1. A. N. Titov et al., J. Phys. Chem. Lett. **9**, 5183 (2018).
2. E. G. Shkvarina et al., J. Struct. Chem. **57**, 710–716 (2016).
3. E. G. Shkvarina et al. Phys. Chem. Chem. Phys. **26**, 15999–16007 (2024).
4. H. P. B. Rimmington et al., J. Cryst. Growth. **15**, 51–56 (1972).
5. A. M. Lebedev, et al., J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **15**, 1039–1044 (2021).

Секция 6.

Центры пучковых исследований: текущий статус и перспективы

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКОГО СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ: НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ С ЦКП «СКИФ»

Я. В. Зубавичус, А. В. Бухтияров

ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Кольцово, Россия

В докладе представлен обзор методов исследования, реализуемых на источниках синхротронного излучения. Особое внимание уделено сопоставлению особенностей применения и решаемых задач для методов, основанных на использовании синхротронного излучения и нейтронов.

Также в докладе представлен статус реализации проекта создания источника синхротронного излучения ЦКП «СКИФ» в наукограде Кольцово Новосибирской области. Начало работы ЦКП «СКИФ» запланировано на 2026 год. Подробно описаны исследовательские возможности экспериментальных станций первой очереди. Изложены принципы пользовательской политики. Представлены планы инфраструктурного развития, связанные с созданием станций второй очереди.

Приглашенный доклад

RESEARCH AND INFRASTRUCTURE AT THE FRANK LABORATORY OF NEUTRON PHYSICS

N. Kučerka

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, Russia
*E-mail: kucerka@nf.jinr.ru

The Frank Laboratory of Neutron Physics (FLNP) of the Joint Institute for Nuclear Research (JINR) is one of the leading centers for neutron physics in the member states of JINR. Its legacy lays for more than half a century in applying the results of nuclear physics using the pulsed reactors in particular, for materials and life science research. The basic facility of the laboratory is the unique periodic pulsed reactor IBR-2. Most modern research methods using neutron scattering are realized at neutron beams of the reactor, as well as neutron activation analysis and studies of the radiation effects from neutrons and gamma rays. FLNP has accumulated a significant amount of state-of-the-art beam-lines and end-stations, as well as many complementary laboratory instruments. This enables obtaining comprehensive information about the objects under study. The User Program implemented at the laboratory provides a unique opportunity for scientists from around the world to get access to the research infrastructure of the IBR-2 reactor. The advances achieved over past decades developed to an extent that our scientists employ diffraction approaches to successfully characterize the physical properties of a wide range of materials that assemble a base for further advancements. Owing to progress in research approaches, there is now a better understanding in aiding a design of new materials, or in relevant mechanisms for health protection and even its recovery. Establishing the regular monitoring of environmental pollution helps to alleviate its negative impact on people and the planet.

УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ РЕАКТОРА ИР-8 ДЛЯ ПРОРЫВНЫХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В РАЗНЫХ НАУЧНЫХ ОБЛАСТЯХ

Чубова Н. М.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: Chubova_NM@nrcki.ru

Нейтронные методы, как инструмент исследования веществ и законов природы, имеют ряд неоспоримых преимуществ перед другими методами, а именно: широкий диапазон измеряемых расстояний и времён, высокая селективность к химическим элементам и изотопам, глубокое проникновение в исследуемый материал, высокая чувствительность к проявлениям магнитных свойств. Исследовательский ядерный реактор бассейнового типа ИР-8 действующий источник нейтронов на территории России, и представляет собой современный исследовательский комплекс с обширной научной программой.

Представлен обзор текущего состояния фундаментальных и прикладных исследований в различных областях науки и техники: в области ядерной физики, физики твёрдого тела и сверхпроводимости, нанотехнологий и наноматериалов, радиационного материаловедения, нейтронно-активационного анализа элементного состава вещества, испытаний образцов новых топливных композиций для перспективных энергетических реакторных установок, наработки изотопов медицинского назначения. А также планы дальнейшей модернизации установок для получения прорывных научных исследований.

Устный доклад

КОМПАКТНЫЙ ИСТОЧНИК НЕЙТРОНОВ DARIA В РОССИЙСКОЙ СТРАТЕГИИ РАЗВИТИЯ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

С. В. Григорьев[1]*, *Т. В. Кулевой* [2]

[1]Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru

К настоящему времени разработаны научные и технологические основы российского компактного источника нейтронов DARIA (Dedicated for Academic Research and Industrial Applications) на основе линейного протонного ускорителя [1,2].

Источник DARIA предназначен для создания пучков тепловых и холодных нейтронов, обеспечивающих максимально возможные потоки нейтронов для порошкового дифрактометра, рефлектометра поляризованных нейтронов и установки малоуглового рассеяния нейтронов. Параметры всего комплекса – ионного источника, ускорителя протонов, мишенной сборки и экспериментальных нейтронных установок – оптимизированы по частоте повторения и длительности нейтронных импульсов, по диапазону переданных импульсов, инструментальному разрешению и геометрическим размерам.

Выделяют три естественных направления в развитии источников нейтронов на базе проекта DARIA. Одно – мультиплицирование источника DARIA в части углубленной специализации нейтронных установок при соответствующей реконструкции мишенной сборки, но сохранении параметров протонного ускорителя с энергией 13 МэВ. Другое – увеличение мощности источника DARIA за счет увеличения энергии протонов до 70 МэВ, при смене материала мишени на тантал и расширения числа и специфики нейтронных установок. Третье – разработка высокопоточного импульсного источника нейтронов на базе высокоточного, высокоэнергетичного (до 1 ГэВ) ускорителя протонов. Третье направление требует глобального пересмотра технологических решений, в высокоэнергетичной части протонного ускорителя и мишенной сборки, при сохранении общей идеологии в проектировании, строительстве и эксплуатации нейтронных станций. В работе обсуждаются варианты разработки новых импульсных нейтронных источников.

1. T. V. Kulevoy, G. N. Kropachev, A. L. Sitnikov, et al., Instrum. Exp. Tech. **67** (Suppl 1), S16–S26 (2024).
2. С. В. Григорьев, Н. А. Коваленко, К. А. Павлов, и др., Известия Российской академии наук. Серия физическая, **11**, 87, (2023).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЯ В НЕЙТРОННОМ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКОМ КОМПЛЕКСЕ ИФМ УрО РАН

А. Ф. Губкин[1,2,3]*, *В. И. Максимов*[1], *М. А. Сёмкин*[1,2], *В. И. Бобровский*[1]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
[3]ЗАО «Институт реакторных материалов» ГК Росатом, Заречный, Россия
*E-mail: agubkin@imp.uran.ru

Нейтронный материаловедческий комплекс (НМК) Института физики металлов (ИФМ) УрО РАН функционирует на правах арендатора на исследовательском реакторе ИВВ-2М, принадлежащем АО «Институт реакторных материалов» ГК Росатом. В настоящий момент НМК ИФМ УрО РАН располагает тремя нейтронными дифрактометрами на двух горизонтальных экспериментальных каналах. Имеется также возможность проводить облучение образцов потоками быстрых нейтронов в вертикальном мокром канале реактора. Кроме того, в НМК имеются экспериментальные стенды для изучения магнитных свойств облученных образцов и исследований методом мессбауэровской спектроскопии. НМК является единственным центром в России, где проводятся нейтронографические исследования высокорадиоактивных материалов, в том числе, и после реальной эксплуатации в реакторах Белоярской АЭС.

Основными направлениями исследований НМК являются:

• Радиационная физика (изучение явлений, вызванных облучением материалов быстрыми нейтронами). В последние годы в НМК ИФМ УрО РАН ведутся работы по изучению радиационно-стимулированных эффектов и механизмов их возникновения в реакторных конструкционных сталях, в сплавах с памятью формы, в некоторых модельных материалах [1]. Также НМК ИФМ УрО РАН проводит на возмездной основе нейтронографические исследования топливных материалов в рамках сотрудничества с АО «ИРМ», ИВТЭ УрО РАН и АО «Прорыв».

• Структурная и магнитная нейтронография перспективных функциональных материалов (изучаются их кристаллические и магнитные структуры, фазовые переходы, диаграммы состояния, фазовый состав образцов, микроструктура, развиваются методы анализа данных нейтронных экспериментов), см. рис. 1 [2-6].

В качестве ключевых результатов работы в 2023–2025 годах можно выделить следующее:

• В рамках сотрудничества с ГК Росатом сотрудниками НМК ИФМ УрО РАН были сформулированы и переданы заказчику предложения в научную программу новой реакторной установки для АО «ИРМ». Данные предложения включают в себя создание отраслевого нейтронографического центра ГК Росатом на базе новой ИЯУ «УРАЛ».

• В рамках сотрудничества с ГК Росатом в 2024 году сотрудниками НМК ИФМ УрО РАН подготовлен отчет о научной программе и перспективном облике лабораторий нейтронного рассеяния и нейтронной радиографии ЦЯНТ-Вьетнам по заказу АО «НИКИЭТ» ГК Росатом.

• В рамках сотрудничества с ГК Росатом оказывались консультационные услуги в части создания лабораторий нейтронного рассеяния и нейтронной радиографии при реализации проектов ЦЯНТ за рубежом.

• В 2025 году НМК ИФМ УрО РАН получил лицензию, разрешающую проведение работ на нейтронных пучках до 2035 года. Таким образом, после годового простоя из-за отсутствия лицензии возобновляются экспериментальные работы на нейтронных пучках.

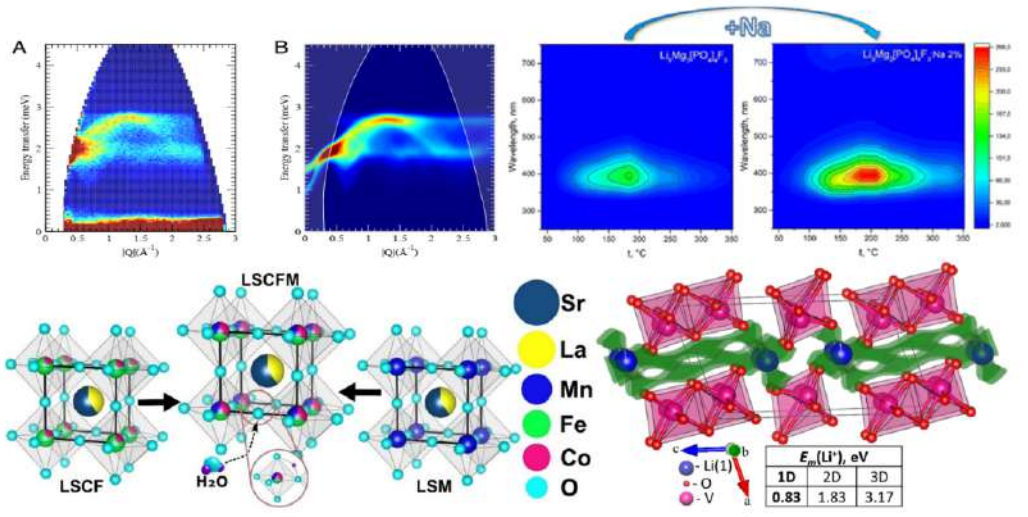

Рис. 1. Сравнение экспериментальных и расчетных спектров рассеяния нейтронов для $SrCoGe_2O_6$ (эксперимент выполнен в ORNL, USA) [3], контурные графики термолюминесценции материалов $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$ и $Li_9Mg_3[PO_4]_4F_3$:Na 2% [4], кристаллическая структура соединения $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_xFe_{1-x-y}Mn_yO_{3-\delta}$ по данным нейтронной дифракции [5], карты проводимости Li^+ в структуре $Li_{1+x}V_3O_8$, рассчитанные из данных нейтронной дифракции) [6]. Нейтронографические эксперименты в работах [1,2,4-6] выполнены в НМК ИФМ УрО РАН.

Основным источником финансирования НМК является государственное задание МИНОБРНАУКИ России для ИФМ УрО РАН..

1. V. I. Bobrovskii, S. V. Afanasyev et al., Phys. Met. Metallogr. **125**(2), 211 (2024).
2. V. I. Maksimov, T. P. Surkova et al., Lett. Mater. **13**(4), 377 (2023).
3. P. A. Maksimov, A. V. Ushakov et al., Proc. Natl. Acad. Sci. **121**(43), e2409154121 (2024).
4. D. A. Akulov, M. O. Kalinkin et al., Cryst. Eng. Comm. **26**, 5632 (2024).
5. E. Filonova, A. Suntsov et al., Ceramics Inter. **50**(20), Part C, 40363 (2024).
6. E. A. Sherstobitova, Ye. A. Morkhova et al., Solid State Ionics **427**, 116904 (2025).

НАУЧНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ В ОБЛАСТИ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ НА РЕАКТОРЕ ПИК

И. А. Зобкало

НИЦ КИ – ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: zobkalo_ia@pnpi.nrcki.ru

Создающийся в настоящее время комплекс нейтронных экспериментальных установок на РК ПИК (НИЦ КИ – ПИЯФ, Гатчина) позволит в ближайшее время проводить исследования в широком диапазоне задач физики конденсированного состояния. В докладе рассматриваются перспективы научных исследований в следующих направлениях:

• Квантовые технологии. Нейтронные методы обладают уникальной способностью исследовать квантовую запутанность; нейтронным исследованиям принадлежит ведущая роль в открытии экзотических фаз материи, таких как спиновые жидкости и магнитные монополи в твердых телах. Использование нейтронных методов в этом направлении связаны также с поиском новых квантовых материалов.

• Электроника и информационные технологии. Будущее информационных технологий является квантовым. Нейтроны станут ключом к открытию новых материалов и пониманию их поведения, а также дальнейшего развития, разработки ИТ-решений следующего поколения.

• Энергоэффективность, энергосбережение. Нейтроны вносят значительный вклад в развитие устойчивой экономии энергии за счет изучения новых материалов и технологии. Примеры включают в себя безопасные системы хранения водорода следующего поколения, батареи и улучшенные материалы для атомной, солнечной и ветряной энергетики.

• Медицина и здравоохранение, науки о жизни. Чувствительность нейтронов к биологически важным атомам водорода, вместе с мощным селективным методом дейтериевого контраста, позволяет осуществлять значительные продвижения в широком диапазоне, связанном с здравоохранением, включая рак и нейродегенеративные заболевания.

• Прикладное материаловедение, объекты исторического культурного наследия. Исследования с использованием нейтронного излучения в этих направлениях являются во многих случаях уникальным и единственно возможным методом благодаря высокой проникающей способности и возможности одновременной идентификации легких и тяжелых ядер в материалах.

Устный доклад

ДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ИМПУЛЬСНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ ИН-06 ИЯИ РАН

Д. Н. Трунов, Р. А. Садыков, В. С. Литвин, С. Н. Аксенов, В. Н. Марин, Д. А. Бучный, Э. А. Коптелов*

Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк, Россия
*E-mail: dtrunov@inr.ru

В Институте ядерных исследований РАН на основе сильноточного линейного ускорителя протонов сооружен комплекс экспериментальных установок для нейтронных исследований, включающий импульсный источник нейтронов ИН-06, установку для радиационного материаловедения РАДЭКС.

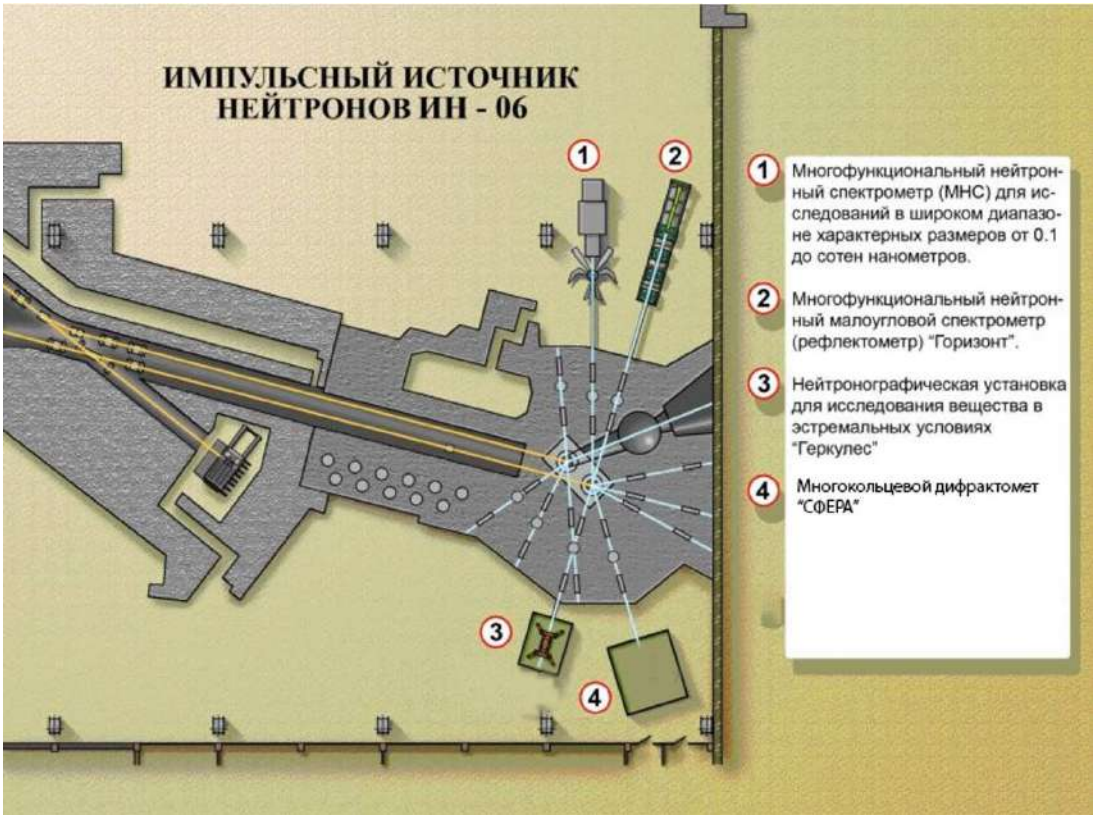

Рис. 1. Схема расположения установок.

Работу нейтронного комплекса ИЯИ РАН обеспечивают сильноточный линейный ускоритель и технологические системы экспериментального комплекса [1,2].

В настоящее время ускоритель реально обеспечивает следующие параметры ускоренного пучка: энергию – до 307 МэВ; импульсный ток – до 16 мА; частоту повторения

импульсов – до 50 Гц; длительность импульса – до 200 мкс; среднюю интенсивность ускоренного пучка – до 150 мкА при энергии 160 МэВ и до 50 мкА при энергии 257 МэВ. Относительно средней интенсивности следует отметить, что все импульсные системы ускорителя, включая инжектор и систему ВЧ-питания, работают в настоящее время с частотой повторения 50 Гц.

В настоящий момент на источнике расположены следующие установки:

- Рефлектометр–малоугловой дифрактометр «Горизонт»;
- Многофункциональный нейтронный спектрометр «МНС»;
- Дифрактометр для исследования вещества в экстремальных условиях«Геркулес»;
- Дифрактометр «СФЕРА» [3]

В работе показано текущее состояние дифракционных установок и ряд проводимых исследований.

1. А. А. Алексеев, Р. А. Садыков, В. С. Литвин и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **3**, 5 (2015).
2. С. Ф. Сидоркин, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **6**, 97 (2013).
3. Трунов Д. Н. Многофункциональный дифрактометр СФЕРА / Д. Н. Трунов, В. Н. Марин, С. Н. Аксенов [и др.] // Международный научно-исследовательский журнал. — 2024. — №1 (139). — URL: https://research-journal.org/archive/1-139-2024-january/10.23670/IRJ.2024.139.29 (дата обращения: 02.02.2024). — DOI: 10.23670/IRJ.2024.139.29

Секция 7.

Материаловедение и химия твердого тела

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В FeGa СПЛАВАХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКЕ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

М. В. Авдеев

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
[3]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[4]Испарительный источников нейтронов, Дунгуань, Китай
[5]Институт физики высоких энергий Китайской Академии наук, Пекин, Китай
*E-mail: avd@nf.jinr.ru

Эффект резкого увеличения константы магнитострикции сплавов Fe–Ga при добавлении 19 или 27 ат. % галлия к железу, обнаруженный в начале 2000-х годов, является предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Для его описания было предложено несколько физических моделей, основанных на предположении, что кристаллическая матрица сплавов Fe–Ga содержит неоднородности (преципитаты), в том числе с анизотропной структурой. Такого рода неоднородности являются традиционным объектом исследования методом малоуглового рассеяния, охватывающим диапазон размеров от ∼10 до ∼100 Å. Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) чувствительно к магнитным неоднородностям и указывает на то, что увеличение константы магнитострикции может быть связано с наличием, прежде всего, магнитных нанонеоднородностей. Для данных сплавов показано преобладание магнитного рассеяния, которое подавляется во внешнем магнитном поле насыщения.

В настоящей работе МУРН применен для FeGa сплавов в классическом виде для ненамагниченных образцов в отсутствие внешнего магнитного поля, что позволяет четко разделить изотропное магнитное рассеяние неоднородностями от рассеяния матрицей. Данный подход был использован для анализа процессов формирования преципитатов в сплавах, легированных Tb, что усиливает магнитострикционные свойства.

Для сплава $Fe_{81}Ga_{19}Tb_{0.1}$, предварительно состаренном при различных температурах, кривые МУРН показывают четкую картину формирования нанопреципитатов с характерным размером, растущим при увеличении температуры отжига. Эксперименты *insitu* показали, что формирование неоднородностей происходит сравнительно быстро в основном в первые минуты отжига (∼10 мин для температуры 300 °C). Анализ МУРН в сочетании с данными нейтронной дифракции позволил связать наблюдаемые неоднородности с кластерами фазы D03, диспергированными в матрице A2.

Для сплава $Fe_{73}Ga_{27}Tb_{0.1}$ на кривых МУРН, полученных при комнатной температуре для образцов, состаренных при T = 400, 450 и 530 °C, помимо основных асимптотик наблюдаются неоднородности с характерными размерами нанонеоднородностей ∼80 и ∼800 Å. Измерения *insitu* для образцов в процессе длительного изотермического старения при 400, 470 и 550 °C показали, что оба типа неоднородностей возникают и развиваются достаточно быстро (менее чем за 10 мин). Их последующая более медленная эволюция хорошо согласуется с полученными ранее результатами нейтронной дифракции относительно кластеров структурно и магнитоупорядоченной ОЦК-фазы D03, диспергированной в матрице B2, которые в процессе старения трансформируются в ГЦК-фазу (A1/L12). Наблюдаемые эффекты в МУРН связали с переходом при нагреве ОЦК-фазы в парамагнитное состояние (T_C ∼ 450 °C) которое контрастирует в МУРН с ферромагнитным состоянием ГЦК-фазы (температура парамагнитного перехода T_C ∼ 650 °C). Таким образом, с помощью МУРН отслежена временная зависимость относительной доли ОЦК-фазы в сплаве при отжиге.

Различия в особенностях эволюции МУРН для двух составов свидетельствует о том, что механизмы, ответственные за пиковые значения константы магнитострикции при содержании Ga 19 и 27 ат.%, не связаны напрямую с образованием наблюдаемых нанопреципитатов.

Приглашенный доклад

IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ФАЗОВОГО СОСТАВА МЕТАСТАБИЛЬНОГО СПЛАВА $Fe_{66}Ga_{34}$ В ХОДЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ВЫДЕРЖЕК

Т. Н. Вершинина[1,2], *Б. Ержанов*[1], *Дж. Хао*[3], *Х. Лю*[3], *Л. Хе*[3], *И. С. Головин*[2], *А. М. Балагуров*[1,2]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Университет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия
[3]China Spallation Neutron Source, Дунгуань, Китай
*E-mail: vershinina@nf.jinr.ru

Методом дифракции нейтронов проведена серия *insitu* измерений со сплавом $Fe_{66}Ga_{34}$, полученного кристаллизацией из расплава. Изучались закономерности поведения выделявшегося в сплаве интерметаллида $Fe_{13}Ga_9$ в процессе изотермических выдержек сплава. Особенностью сплава являлось присутствие в его исходном состоянии метастабильных фаз D03 и $Fe_{13}Ga_9$ и равновесной фазы α-Fe_6Ga_5.

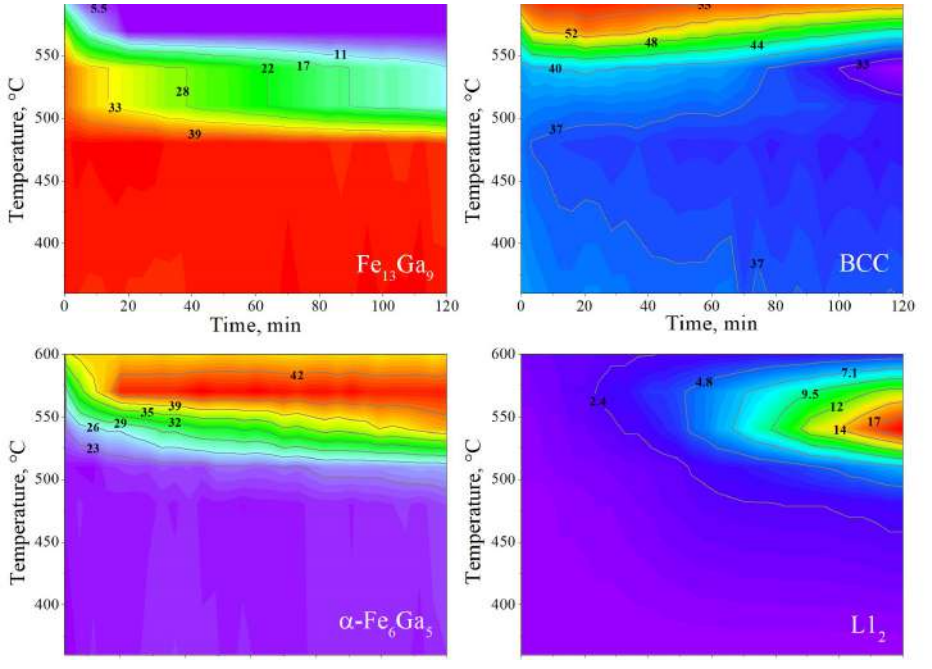

Рис. 1. Зависимость объемной доли присутствующих в сплаве $Fe_{66}Ga_{34}$ структурных фаз от температуры и времени отжига. Переход от красного цвета к фиолетовому соответствует уменьшению объемной доли фазы (показаны изолинии).

Измерения проведены на порошковом дифрактометре общего назначения GPPD, действующем на импульсном источнике нейтронов CSNS (Китай) [1]. Регистрация дифракционных спектров проводилась с использованием метода времени пролета тремя блоками детекторов, установленных при средних углах рассеяния 30°, 90° и 150°. Измерения проводились в условиях изотермических выдержек сплава при 360, 480, 510, 540, 570 и 600 °C в течение 120 минут каждая. Нагрев до заданной температуры осуществлялся со скоростью 10 °C/min. Дифрактограммы обрабатывались по методу Ритвельда с использованием программы MAUD.

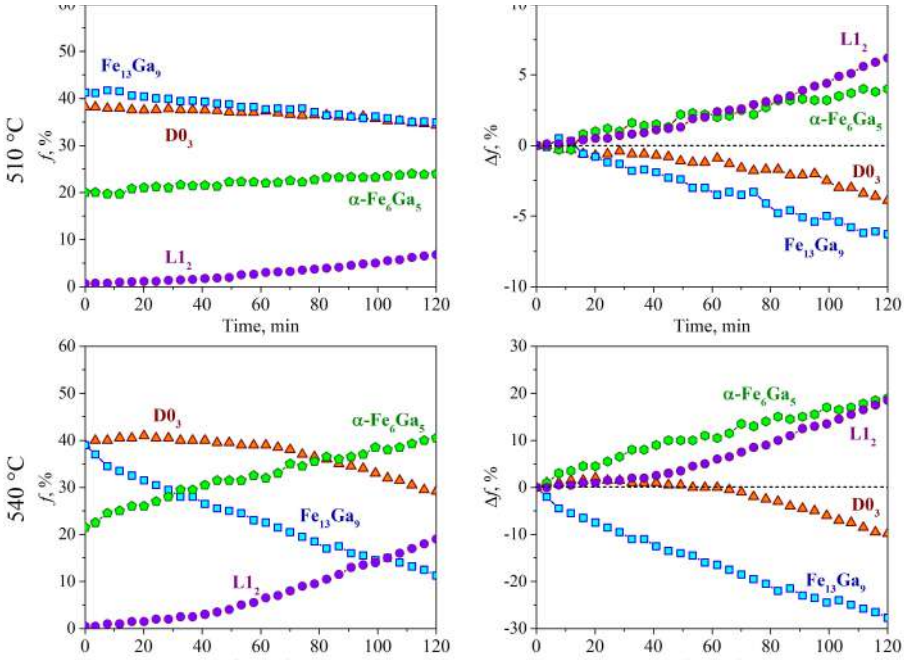

Рис. 2. Зависимости объемной доли (*f*) и ее прироста/убыли (Δ*f*) отдельных фаз от времени изотермической выдержки.

В исходном состоянии объемные доли фаз составляют: Fe_3Ga ($D0_3$) – 40%, $Fe_{13}Ga_9$ – 40%, and α-Fe_6Ga_5 20%. Вплоть до 480 °C фазовый состав сплава не менялся. Первые изменения при 480 °C зафиксированы на десятой минуте отжига – произошло выделение $L1_2$. Увеличение температуры изотермической выдержки привело к тому, что уже в процессе нагрева до заданной температуры начали происходить фазовые превращения, а именно, выделение $L1_2$, рост доли равновесной α-Fe_6Ga_5, уменьшение долей $Fe_{13}Ga_9$ и фазы на основе ОЦК решетки, которая при температуре ниже 570 °C представлена $D0_3$, а выше 570 °C – B2. В ходе последующих изотермических выдержек эти процессы продолжались.

На основе количественных оценок фазового состава были построены зависимости объемной доли всех присутствующих в сплаве фаз от температуры и времени (рис. 1). Приведенные на рис. 1 данные наглядно демонстрируют взаимосвязь $D0_3$/B2 и A1/$L1_2$, а также $Fe_{13}Ga_9$ и α-Fe_6Ga_5. Так минимум содержания $D0_3$/B2 совпадает с максимумом объемной доли A1/$L1_2$, а температура, при которой начинает исчезать $Fe_{13}Ga_9$, совпадает с началом роста объемной доли α-Fe_6Ga_5. Детальное изучение зависимостей величины прироста/убыли отдельных фаз Δ*f* (рис. 2) показывает, что увеличение объемной доли $L1_2$ не может происходить исключительно за счет убыли $D0_3$/B2, а уменьшение $Fe_{13}Ga_9$ не может осуществляться исключительно за счет роста доли α-Fe_6Ga_5. Можно предположить, что происходит распад $Fe_{13}Ga_9$ на $L1_2$ и α-Fe_6Ga_5.

Полученные в ходе настоящего исследования результаты, подтверждают ранее высказанное предположение [2] о необходимости предварительного выделения $L1_2$ для реализации фазового превращения $Fe_{13}Ga_9 \rightarrow$ α-Fe_6Ga_5.

1. L. He, S. Deng, F. Shen et. al., Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A **1054**, 168414 (2023).
2. T. N. Vershinina, N. Yu. Samoylova, S. V. Sumnikov et. al., J. Alloys Compd. **934**, 167967 (2023).

Приглашенный доклад

ИССЛЕДОВАНИЯ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА PRUSSIAN WHITE ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА

Н. Ю. Самойлова, Р. Н. Васин, С. В. Сумников, М. Е. Донец

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: rny03@jinr.ru

Развитие литий-ионных технологий и активное использование литий-ионных аккумуляторов в различных устройствах приводят к резкому увеличению потребления лития, природные запасы которого ограничены. В качестве альтернативных источников тока рассматриваются химические источники тока на основе ионов натрия. Изучение соединений, перспективных для использования в качестве катодных материалов для натрий-ионных аккумуляторов, сегодня весьма актуально.

Одним из таких материалов является гексацианоферрат натрия Prussian White (PW) с общей формулой $Na_{2-x}Fe[Fe(CN)_6]_{1-y}\cdot\square \cdot y \cdot mH_2O$ ($\square$ – вакансии $Fe(CN)_6$, y – их количество). Открытая рамочная структура PW позволяет легко размещать ионы натрия и обеспечивать их быструю транспортировку, благодаря чему материал имеет высокие значения емкости и скорости заряда/разряда. Однако стандартные экологические методы синтеза приводят к появлению вакансий Fe(CN)6, связанной и абсорбированной воды в исходной структуре соединения, что, как полагают, влияет на стабильность кристаллической решетки при электрохимическом циклировании и приводит к потере емкости после длительной работы, что препятствует широкому использованию PW в коммерческих батареях. В настоящее время многочисленные исследования направлены на разработку условий синтеза маловакансионных соединений и последующую обработку материала перед изготовлением электродов с целью удаления воды из структуры гексацианоферрата и нанесения защитного покрытия.

В докладе представлены результаты *insitu/operando* дифракционных исследований влияния предварительного отжига электродов, механического помола порошка PW и покрытия PW полианилином на структурные фазовые переходы и электрохимические свойства материала [1–3]. Обсуждается возможность синтеза порошка PW в тяжелой воде с целью получения материала для нейтронных дифракционных исследований процессов интеркаляции/деинтеркаляции натрия в ходе электрохимического циклирования в специальной модельной ячейке [4].

1. N. Yu. Samoylova, R. N. Vasin, S. V. Sumnikov, et al., J. Phys. Chem. Solids **204** 112762 (2025).
2. N. Yu. Samoylova, M. E. Donets, R. N. Vasin, et al., Nano Research **18**, 94907280 (2025).
3. N. Yu. Samoylova, I. A. Bobrikov, I. Razanau, et al., J. Alloys Compd. **983** 173849 (2024).
4. I. A. Bobrikov, N. Yu. Samoylova, O. Yu. Ivanshina, et al., Electroch. Acta **265**, 726 (2018).

ИЗМЕРЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ТЕКСТУР МАТЕРИАЛОВ НА ДИФРАКТОМЕТРЕ ФДВР: ПЕРВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Р. Н. Васин, Б. Ержанов, С. В. Сумников, А. М. Балагуров*

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: vasin@nf.jinr.ru

Основными задачами, решаемыми на нейтронном фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР) [1] в ЛНФ ОИЯИ, являются прецизионные измерения кристаллической и магнитной структуры и микроструктуры кристаллических материалов, а также их изменений в ходе *insitu* или *operando* экспериментов. На ФДВР возможны два режимами работы: высокого разрешения (фурье-прерыватель в пучке, $\Delta d/d \approx 0.001$) и высокой светосилы со средним разрешением (фурье-прерыватель убран из пучка, $\Delta d/d \approx 0.015$). В режиме высокого разрешения структурные измерения, как правило, проводятся в течение 1–3 часов, но в режиме высокой светосилы это время может быть сокращено до $\sim$1 минуты. Введение в 2025 г. в эксплуатацию нового широкоапертурного детектора обратного рассеяния (ДОР) на основе ZnS(Ag)/^{6}LiF сцинтилляторов [2], перекрывающего телесный угол около 2 ср, существенно улучшило светосилу ФДВР, позволив уменьшить время измерения нейтронограмм. Дополнительно ДОР открывает возможности для быстрых измерений кристаллографической текстуры поликристаллических материалов, поскольку состоит из 108 независимых регистрирующих модулей. Главной задачей количественного текстурного анализа является определение функций распределения по ориентациям (ФРО) для кристаллитов всех структурных фаз в материале. Для восстановления ФРО с хорошим угловым разрешением в дифракционном эксперименте необходимо измерить интегральные интенсивности достаточного количества дифракционных пиков от кристаллографических плоскостей с различными индексами Миллера при различных направлениях вектора рассеяния относительно образца. Для этого зачастую необходимо измерить дифрактограммы от образца при нескольких десятках или даже сотнях его различных ориентаций относительно детекторной системы дифрактометра. Так, на текстурном дифрактометре СКАТ [3] в ЛНФ ОИЯИ установлены 19 детекторных модулей с общим телесным углом около 0.013 ср, поэтому для восстановления ФРО измерения нейтронограмм обычно проводятся при 36 или 72 позициях образца и занимают около 1–2 суток [4]. Поскольку ДОР обеспечивает одновременное измерение нейтронограмм в широком диапазоне межплоскостных расстояний при 108 направлениях векторов рассеяния, для восстановления ФРО достаточно провести измерения всего при нескольких (≤ 5) ориентациях образца, сократив эффективное время текстурного эксперимента до < 2 часов в режиме работы ФДВР с высокой светосилой для хорошо рассеивающих образцов. В режиме высокого разрешения появляются возможности для уточнения структуры низкосимметричных материалов в экспериментах на текстурированных поликристаллах (с одновременным определением их ФРО). В работе обсуждаются результаты первого эксперимента по измерению кристаллографической текстуры на ФДВР, оптимизация текстурного эксперимента и возможности для измерений эволюции кристаллографических текстур материалов in situ, например, при структурных фазовых превращениях.

1. A. Balagurov et al. Nucl. Instrum. Meth. B **436**, 263–271 (2018).
2. V. V. Kruglov et al. J. Neutron Res. **23**, 243–250 (2021).
3. R. Keppler et al. J. Appl. Crystallogr. **47**, 1520–1534 (2014).
4. Р.Н. Васин. Кристаллография, **67**(1), 72–89 (2022).

Устный доклад

НЕЙТРОННЫЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СПЛАВОВ Fe-Ga-RE

Б. Ержанов[1,2,3]*, *А. М. Балагуров*[1], *С. В. Сумников*[1], *Б. Мухаметулы*[1,2], *В. В. Палачева*[4], *И. С. Головин*[4]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алматы, Республика Казахстан
[3]Казанский федеральный университет, Казань, Россия
[4]Университет науки и технологий МИСиС, Москва, Россия
*E-mail: bekarys@jinr.ru

Сплавы на основе железа обладают многочисленными полезными функциональными свойствами, которые давно и широко используются в различных технологиях. Одним из них является «гигантская» магнитострикция, открытая в начале 2000-х годов в сплавах Fe–Ga с двумя максимумами магнитострикции в зависимости от содержания в них Ga, активно изучаемая в течение последних двух десятилетий [1]. Интересной структурной темой является изучение влияния легирования сплавов Fe–Ga редкоземельными элементами. Легирование сплавов Fe–Ga микроколичествами редкоземельных элементов (RE) приводит к улучшению магнитострикционных свойств этих функциональных сплавов. Физические и технические свойства таких функциональных сплавов во многом зависят от их специфической атомной структуры, объемного содержания различных структурных фаз и их микроструктурного состояния. Несмотря на многочисленные исследования, механизм формирования повышенной магнитострикции в сплавах Fe–Ga и его связь с атомным упорядочением до сих пор остается предметом дискуссий.

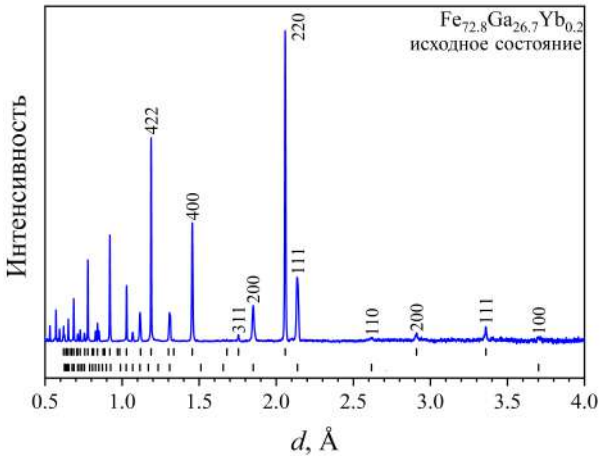

Рис. 1. Спектр $Fe_{73}Ga_{27}Yb_{0.2}$ сплава до его нагрева, на котором обнаружены фазы $D0_3$ (~83%) и $L1_2$ (~17%).

В широком температурном интервале проведены исследования эволюции фазового состава и микроструктуры литых магнитострикционных сплавов $Fe_{100-(x+y)}Ga_xRE_y$ ($x \approx$ 19 ат% и 27 ат.%), легированных микродобавками ($y \approx 0.1 - 0.5$ ат.%) редкоземельных элементов (Dy, Er, Pr, Sm, Tb, Yb), всего 14 составов. Результаты получены в экспериментах с использованием дифракции нейтронов, проведенных на установке ФДВР

(ОИЯИ, ИБР-2, Дубна) в двух режимах: с высоким разрешением по межплоскостному расстоянию и с высокой интенсивностью при непрерывном сканировании по температуре при нагреве до ∼900 °C и последующем охлаждении со скоростью ±2 °C/мин [2]. Информация о микроструктурном состоянии сплавов получена с использованием методов Вильямсона-Холла и Пелашека, которые позволяют оценивать характерные размеры и распределение по размерам областей когерентного рассеяния путем анализа профилей дифракционных пиков.

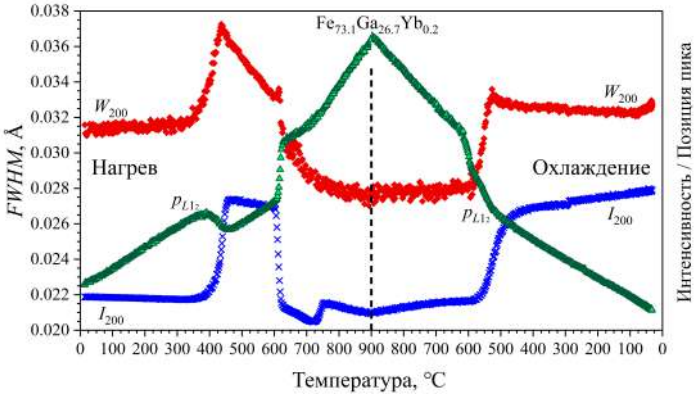

Рис. 2. Корреляция между резким увеличением интенсивности основного пика фазы $L1_2$ (I200), изменением его положения (p_{L1_2}), резким увеличением его ширины (W_{200}) при нагреве и охлаждении сплава $Fe_{73}Ga_{27}Yb_{0.2}$.

Нагрев и последующее охлаждение сплавов $Fe_{81}Ga_{19}RE$ приводит к формированию кластеров фазы $D0_3$ с размерами в диапазоне (200 – 300) Å в матрице неупорядоченной фазы 2. Структурные перестройки в этих сплавах протекают в целом одинаковым образом, как в исходном сплаве $Fe_{81}Ga_{19}$. В сплавах $Fe_{73}Ga_{27}RE$ с содержанием RE от 0.1 до 0.5 ат.%, как последовательность образующихся и исчезающих структурных фаз при нагреве и охлаждении сплава, так и финальное состояние сплава зависят от типа и количества редкоземельного элемента. В этих сплавах обнаружен эффект подавления формирования фаз со структурами на основе ГЦК- ($L1_2/A1$) и ГПУ-ячеек ($D0_{19}/A3$) и стабилизации фаз со структурами на основе ОЦК-ячейки ($D0_3/A2$) при легировании сплавов RE элементами. По-другому ведет себя сплав $Fe_{73}Ga_{27}Yb_{0.2}$, в котором в исходном состоянии обнаружено заметное присутствие фазы $L1_2$ в количестве (17%) (рис. 1). При его нагреве фазы со структурами на основе ГЦК-ячейки ($A1/L1_2$) существуют вплоть до 900 °C, чего не наблюдается ни в одном другом составе. При охлаждении сплава с Yb равновесная фаза $L1_2$ с параметром ячейки $a \approx 3.687$ Å также как в других составах становится основной при < 500 °C (рис. 2), но дополнительно к ней формируется фаза (ее доля ∼20%) с такой же, как у $L1_2$ системой пиков, но с увеличенным до $a \approx 3.708$ Å параметром ячейки.

Поиск структурного упорядочения в объеме сплава, соответствующего тетрагональной фазе $L6_0$, обнаруженной в ряде электронно-дифракционных исследований в Fe–Ga сплавах, не привел к положительному результату.

Работа выполнена в рамках проекта № 19-72-20080 РНФ.

1. E. M. Summers, T. A. Lograsso, M. Wun-Fogle, J. Materials Science **42**, 9582–9594 (2007).
2. A. M. Balagurov and et al, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B **436**, 263–271 (2018).

Устный доклад

КОРРЕЛЯЦИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ТЕКСТУР КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ГОРНЫХ ПОРОД С АНИЗОТРОПИЕЙ УПРУГИХ И ФИЛЬТРАЦИОННЫХ СВОЙСТВ

Т. И. Иванкина

Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*E-mail: iti@nf.jinr.ru

Работа отражает новые экспериментальные данные, полученные методами нейтронного рассеяния в комплексе с другими комплементарными физическими методами, необходимые для решения задач геоэкологии, в частности, для изучения потенциальных мест захоронения радиоактивных отходов. Все эксперименты были проведены на образце биотитового гнейса, представляющего метаморфическую горную породу, отобранную из геопространства Кольской сверхглубокой скважины (СГ-3).

Текстурные измерения образца биотитового гнейса PL367 были выполнены методом времяпролетной нейтронной дифракции с помощью установки СКАТ импульсного реактора ИБР-2 (Дубна,Россия)[1]. Обработка дифракционных спектров проводилась с использованием программы MAUD. Метод Ритвельда позволил уточнить основной минеральный состав образца PL367 (30.6% кварц, 28.8% плагиоклаз (An 28), 20.9% биотит, 16.3% мусковит) [2]. Для всех минеральных фаз из нейтронно-дифракционных спектров были восстановлены текстурные функции (ФРО). На основе ФРО были рассчитаны полюсные фигуры, соответствующие базовым кристаллографическим направлениям. Наиболее текстурированной минеральной компонентой в образце биотитового гнейса PL67 является биотит, о чем свидетельствует максимальная величина полюсной плотности 11.16 m.r.d.на полюсной фигуре (001) (Рис.1) .

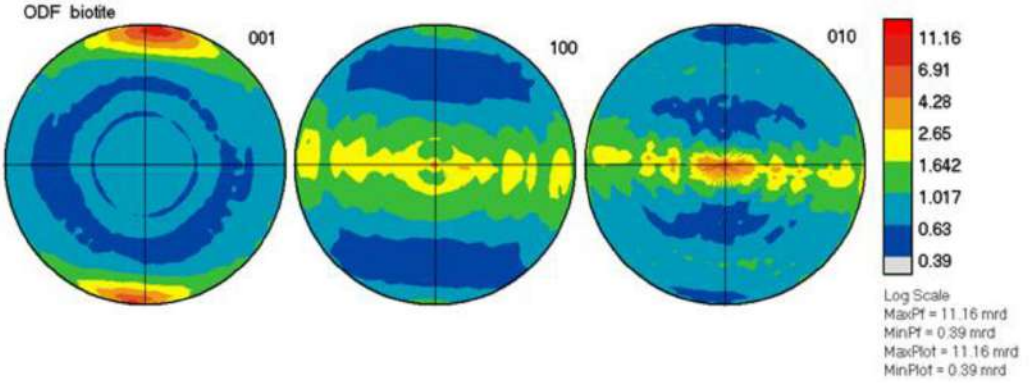

Рис. 1. Полюсные фигуры биотита образца Pl367, рассчитанные с помощью ФРО, восстановленной из нейтронно-дифракционных измерений.

Измерения скоростей продольных ультразвуковых волн проведены в Геологическом институте Чешской АН, г. Прага в камере всестороннего сжатия [3]. На рисунке 2 представлены карты изолиний скоростей Р-волн, построенные по экспериментальным данным, полученным при давлениях 60 и 80 МПа. Эти карты отражают характер изменения

упругой анизотропии горной породы с ростом давления. Из сопоставления карт видно, что конфигурация изолиний скоростей продольных упругих волн с ростом давления меняется незначительно, при этом величина коэффициента анизотропии уменьшается с 93% при атмосферном давлении до 19% при давлении 80 МПа. Это означает, что при атмосферном давлении упругие свойства биотитового гнейса контролируются в основном преимущественной ориентировкой пластинок биотита, а также согласованной с ними ориентировкой микротрещин и пор вдоль границ зерен. При возрастании давления происходит закрытие пор и микротрещин, а остаточная анизотропия упругих свойств определяется кристаллическим скелетом породы, т.е. кристаллографической текстурой.

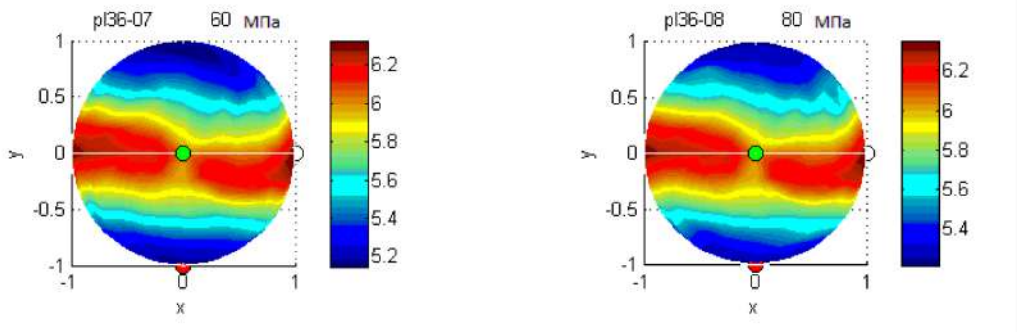

Рис. 2. Карты изолиний скоростей продольных упругих волн для образца Pl367, экспериментально измеренные при разных гидростатических давлениях.

Наблюдаемая при атмосферном давлении в образце PL367 анизотропия проницаемости является результатом взаимодействия флюидопроводящих каналов, обусловленных взаимной ориентировкой кристаллических решеток соседних зерен в объеме поликристаллических тел (в основном кристаллографической текстурой биотита), с мезо- и макроскопическими каналами (системами микротрещин вдоль пластинок биотита, межзеренным поровым пространством в плоскости сланцеватости).

Можно предположить, что при повышении всестороннего давления в связи с закрытием пор и трещин анизотропия проницаемости будет уменьшаться. При высоком всестороннем давлении кристаллографическая текстура и ориентированные межзерновые границы будут задавать основное направление флюидопереноса.

1. T. I. Ivankina and S. Matthies, Physics of Particles and Nuclei **46**(3), 366–423 (2015).
2. H.-R. Wenk, L. Lutterotti, S. C. Vogel, Powder Diffr. **25**, 283–296 (2010).
3. T. Lokajicek and T. Svitek, Ultrasonics **56**, 294–302 (2015).

Устный доклад

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ КВАЗИДВУМЕРНЫХ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

О. Н. Лис, Д. П. Козленко, С. Е. Кичанов, Е. В. Лукин, И. Ю. Зель*

Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: olis@jinr.ru

Ван-дер-ваальсовые соединения, сохраняющие дальний магнитный порядок в двумерных формах, в настоящее время привлекают значительное внимание в физике конденсированного состояния. Эти материалы характеризуются слоистой структурой с решёткой типа «пчелиные соты», где отдельные атомные слои связаны слабыми межслоевыми взаимодействиями. Такая структура обусловливает высокую чувствительность их физических свойств к внешним воздействиям, что приводит к проявлению разнообразных эффектов, включая зарядовое, орбитальное и спиновое упорядочение, сверхпроводимость, аномальный эффект Холла, скирмионные состояния, различные фазовые переходы и другие явления, важные также для разработки современных спинтронных устройств.

К ярким представителям этого класса относятся хлорид и бромид хрома ($CrCl_3$ и $CrBr_3$), демонстрирующие ряд необычных магнитных и структурных свойств, представляющих как фундаментальный интерес, так и потенциал для практического применения. Среди различных методов исследования, воздействие высокого давления представляет собой эффективный и прямой способ управляемого изменения магнитных взаимодействий за счёт вариации межатомных расстояний и углов. Такие эксперименты позволяют установить связь между изменениями кристаллической структуры и эволюцией магнитного порядка, что критически важно для понимания природы наблюдаемых эффектов. Нейтронная дифракция в свою очередь предоставляет уникальную возможность исследовать одновременно кристаллическую и магнитную структуры.

Настоящая работа посвящена исследованию кристаллической, магнитной структуры и колебательных спектров $CrBr_3$ и $CrCl_3$ в широких диапазонах температур и давлений. Детальные исследования кристаллической и магнитной структуры соединений проводились с помощью нейтронной дифракции на дифрактометре ДН-6 реактора ИБР-2 (ЛНФ, ОИЯИ, Дубна, Россия).

Исследования с помощью нейтронной дифракции $CrBr_3$ позволили обнаружить в области ниже T_C = 37 К отрицательное тепловое объемное расширение [1], а также аномальное поведение межатомных расстояний, углов и частот колебательных мод, что указывает на проявляющуюся сильную спин-решеточную связь. Воздействие высокого давления приводит к подавлению магнитного упорядочения, а полное подавление ФМ-состояния и магнитный переход либо в АФМ-состояние, либо в магнитно-неупорядоченное состояние ожидается при P ~8.4 ГПа [2]. Наши результаты также выявили значительные аномалии в поведении межатомных расстояний и углов с увеличением давления, что связано с переходом от исходной квазидвумерной структуры в трехмерную.

$CrCl_3$ демонстрирует постепенный структурный фазовый переход в ромбоэдрическую фазу при низких температурах, и АФМ-упорядочение также наблюдается при температуре ниже T_N = 17 К. С увеличением давления происходит структурный переход из исходной моноклинной в ромбоэдрическую структуру. Также высокое давление приводит к значительному подавлению АФМ-упорядочения и возможному переходу к ФМ-упорядочению.

Работа поддержана грантом Объединения молодых ученых и специалистов (ОМУС) ОИЯИ, Дубна, Россия (грант №24-401-05).

1. D. P. Kozlenko, O. N. Lis, et al., npj Quantum Mater. **6**, 19 (2021).
2. O. Lis, D. Kozlenko, et al., Materials. **16**, 454 (2023).

НАНОЧАСТИЦЫ МАГНЕТИТА, ЛЕГИРОВАННЫЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ИОНАМИ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

А. В. Руткаускас[1]*, *О. Н. Лис*[1], *С. Е. Кичанов*[1], *Б. А. Абдурахимов*[1], *Е. В. Лукин*[1], *Д. П. Козленко*[1], *Г. С. Римский*[2], *А. Л. Желудкевич*[2]

[1]Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Государственное научно-производственное объединение «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь
*E-mail: ranton@nf.jinr.ru

Объемные и наноструктурированные ферриты с кристаллической структурой типа шпинели (AFe_2O_4) активно изучаются на протяжении многих десятилетий ввиду их привлекательности как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Такие соединения обладают широким спектром физических явлений: высокое удельное электрическое сопротивление, низкие электрические потери, высокая химическая стабильность, магнитные фазовые переходы различного типа, эффекты геометрической фрустрации и многое другое. Это делает возможным широкого технологического применения ферритов в качестве материалов для трансформаторов, солнечных элементов, биомедицине, магнитных сенсорах, катализаторах, системах доставки лекарств, электронных и магнитных компонентах.

В зависимости от химического состава и размеров наночастиц ферриты со структурой шпинели обладают разным распределением катионов в тетраэдрической (A) и октаэдрической (B) координации кислорода. В частности, может быть реализован случай, когда ионы Fe^{3+} находятся в позициях A, а также имеется смесь ионов Fe^{3+} и Fe^{2+}, расположенных в позициях B. При легировании переходными металлами или щелочными элементами в позициях A или B или создании вакансий в структуре кубической шпинели, магнитные взаимодействия между ионами железа изменяются. Это приводит к существенным изменениям физических свойств этих ферритов. Следует отметить, что изменения физических свойств материала можно добиться применением высокого давления. Давление вызывает контролируемую настройку межатомных расстояний и валентных углов, что приводит к изменениям физических свойств оксидов феррита.

В нашей работе были изучены наноструктурированные образцы магнетита с 2,5% легированием редкоземельными ионами Sm, Dy, La и Lu методами рентгеновской и нейтронной дифракции, малоуглового рентгеновского рассеяния и магнитных измерений. Все легированные наноструктурированные образцы магнетита имеют кубическую фазу со структурой шпинели $Fd\bar{3}m$, размер наночастиц составляет от 20 до 32 нм. Легирующие редкоземельные ионы в основном занимают октаэдрические позиции в кислородном узле. Размер наночастиц зависит от типа легированной редкоземельной ионы из-за разницы в ионном радиусе. Данные нейтронной дифракции показали, что магнитная структура легированных наночастиц магнетита является ферримагнитной. Магнитные измерения показали наличие суперпарамагнитного состояния во всех легированных наночастицах магнетита. Магнитные измерения показали наличие суперпарамагнитного состояния во всех легированных наночастицах магнетита. Предполагается, что заметные изменения структурных и магнитных свойств наночастиц магнетита по сравнению с объемным веществом связаны в первую очередь с дефектной структурой на поверхности этих наночастиц и влиянием на нее легирования редкоземельными ионами.

Работа выполнена при поддержке совместных грантов Российского научного фонда (РНФ) № 24-42-10003, https://rscf.ru/project/24-42-10003/ и Белорусского фонда фундаментальных исследований, БФБР Т23РНФМ-023.

Устный доклад

ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСИИ РАЗМЕРОВ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МНОГОКРАТНОМ УЛЬТРАМАЛОУГЛОВОМ РАССЕЯНИИ НЕЙТРОНОВ

Ф. С. Джепаров[1,2], *Д. В. Львов*[1,2], *А. Н. Тюлюсов*[1,2]*, *Й. Шмайснер*[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
*E-mail: tyulyusov@itep.ru

При проведении опытов по малоугловому рассеянию тепловых нейтронов на относительно больших (порядка и более 1 микрона) частицах, находящихся в однородной матрице, существенным является вопрос о возможности достижения высокого углового разрешения. Эта задача не может быть решена традиционными методами путём формирования угловой апертуры с помощью коллиматоров. Уникальную возможность предоставляет дифракция нейтронов на совершенных кристаллах — метод двухкристального спектрометра с параллельной установкой кристаллов, в этом случае принято говорить уже об ультрамалоугловом рассеянии нейтронов (УМУРН) [1].

Наиболее надежные результаты в экспериментах по УМУРН можно получить для монодисперсных систем, но, к сожалению, среди твердотельных образцов таковые встречаются крайне редко. Кроме того, исследования толстых образцов (например, в задачах неразрушающего контроля конструкционных материалов и технологических изделий) приводят к необходимости работать с толстыми образцами, т.е. в условиях многократного рассеяния. А в случае плотноупакованных систем рассеивателей становится необходимым также учет корреляций в их пространственном расположении. Таким образом интерес вызывает изучение зависимости спектров многократного УМУРН от параметров полидисперсности. В данной работе в качестве изменяемой характеристики полидисперсности была выбрана дисперсия размеров рассеивателей при фиксированном виде функции распределения размеров.

Основываясь на теории, построенной в работе [2] ранее была разработана методика численного моделирования линии многократного УМУРН, которая дает хорошее сходство с экспериментальными данными [3].

Численный эксперимент идеологически делится на два этапа — создание реалистической модели образца, используемого в эксперименте. Второй — расчет углового распределения (другими словами, дифференциального сечения) интенсивности МУМУРН на модельном образце.

На первом шаге создания модели образца вводится распределение размеров рассеивающих зерен (в виде сферических частиц) с заданной дисперсией. Далее была построена некоррелированная конфигурация зерен — центры зерен набрасывались равномерно случайным образом. Для расчета реалистической конфигурации системе приписывался формальный потенциал парного взаимодействия, пропорциональный объему пересечения двух зерен. Если же они не пересекаются, то потенциал полагался равным нулю. Физически это означает систему твердых сфер без дальнодействия. На границах образца применялось периодическое продолжение. Далее был использован итерационный метод, в котором каждое зерно последовательно подвергается случайному смещению. После сдвига (старое положение запоминается) проверяется изменение полной энергии за счет сдвига. Если изменение отрицательное, то сдвиг принимается. Если же энергия увеличилась, то сдвиг отклоняется или принимается с некоторой

наперед заданной вероятностью, которая подбиралась исходя из соображений оптимизации по быстродействию. Реалистической считалась конфигурации, полученная в этом процессе, если для нее полная энергия системы обращалась в нуль.

Вычисления углового распределения интенсивности многократного МУРН проводились по теории, развитой в работе [2]. Для выбранного значения модельного нейтронооптического потенциала и получившегося набора радиусов подбиралась кратность рассеяния, близкая к экспериментальной из работы [3]. Поскольку результаты расчетов должны быть сравнимы с экспериментальными результатами, получаемыми на двухкристальном спектрометре, было учтено влияние инструментальной линии спектрометра, имеющий конечную ширину.

Также учитывалось число нерассеянных и рассеянных прямо вперед нейтронов, поскольку существенным отличием кривых УМУРН, полученных с помощью двухкристального нейтронного спектрометра, от более распространенного коллимационного метода с позиционно-чувствительным детектором является неустранимый вклад таких нейтронов.

Результаты работы показывают возможность численного моделирования спектров многократного УМУРН для плотных полидисперсных образцов. Сравнение их со спектрами, полученными в реальных опытах, позволит получать информацию не только о средних размерах рассеивателей, но и о об их дисперсии.

1. Ю. Г. Абов, Н. О. Елютин, Д. В. Львов, А. Н. Тюлюсов, Препринт ИТЭФ № 2-02, Москва (2002).
2. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, Письма в ЖЭТФ **72**, 518 (2000).
3. Ю. Г. Абов, Ф. С. Джепаров, Н. О. Елютин, Д. В. Львов, А. Н. Тюлюсов, ЖЭТФ **143**, 507 (2013).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ОКСИДНЫХ ЧАСТИЦ В ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЁННЫХ ОКСИДАМИ СТАЛЯХ ПОСЛЕ ТЕРМИЧЕСКОГО СТАРЕНИЯ

А. А. Халявина[1,2]*, *С. В. Рогожкин*, *А. В. Клауз*[1]

[1]НИЯУ МИФИ, Москва, Россия
[2]НИТУ МИСИС, Москва, Россия
*E-mail: khalyavina@itep.ru

Дисперсно-упрочнённые оксидами (ДУО) стали с ферритно-мартенситной (ф.-м.) матрицей являются перспективными материалами для использования в активной зоне реакторов деления и синтеза нового поколения. Предполагается, что материалы благодаря наличию в ф.-м. матрице тугоплавких оксидных частиц, которые выступают барьерами для движения дислокаций и стоками точечных дефектов, будут выдерживать эксплуатацию при высоких дозах радиационных повреждений до 200 смещений на атом (сна) в широком диапазоне температур (300–700) °C [1]. Однако, в результате радиационно-термического воздействия изначальная микро- и наноструктура ДУО сталей претерпевает изменения, что может приводить к деградации физических свойств. На данный момент эти механизмы и процессы до конца не изучены. Несомненный интерес представляют эксперименты по термическому старению ДУО сталей в условиях близких к эксплуатационным для выявления наноструктурных изменений и изменений физических свойств материалов.

В данной работе с помощью метода атомно-зондовой томографии (АЗТ) [2] производилось исследование наноструктуры в исходном состоянии и после термического старения при 650°C в течение 500 и 1000 часов трех ДУО сталей с различным химическим составом, представленным в таблице 1.

Таблица 1. Заявленный состав исследуемых ДУО сталей, ат. % (Fe-баланс)

Материал	Mo	Al	Mn	Cr	W	Y	O	Ti	V	C	N
Eurofer ODS	–	–	0,39	9,81	0,34	0,13	0,34	–	0,22	0,40	0,21
10Cr ODS	0,57	–	0,50	10,64	–	0,17	0,17	0,29	0,11	0,60	0,02
KP-3 ODS	–	6,40	–	13,82	0,55	0,16	0,37	0,18	–	0,21	–

Исследования методом АЗТ показали значительные изменения в подсистеме кластеров после термического старения. После старения в течение 500 ч обнаружено:
- Cr–Y–O кластеры со средним размером 4 нм и объёмной плотностью (48×10^{22}) м$^{-3}$ в Eurofer ODS,
- кластеры Cr–Y–O–Ti со средним размером 4 нм и объёмной плотностью (21×10^{22}) м$^{-3}$ в стали 10Cr ODS,
- и кластеры Cr–Y–O–Ti размерами 4 нм и объёмной плотностью (60×10^{22}) м$^{-3}$ в стали KP-3 ODS.

После старения в течение 1000 ч тип кластеров не изменился, а их характеристики составили:

- средний размер 4 нм и объёмная плотность (37×10^{22}) м$^{-3}$ в Eurofer ODS,
- размер 4 нм и объёмная плотность (15×10^{22}) м$^{-3}$ в стали 10Cr ODS,
- и размер 3 нм и объёмная плотность (62×10^{22}) м$^{-3}$ в стали КР-3 ODS.

Анализ полученных данных показывает, что во всех исследуемых материалах наблюдается изменение среднего размера, объемной плотности и химического состава кластеров. Отмечается рост объёмной плотности кластеров (при сохранении или росте среднего размера) при старении в течение 500 ч. После старения в течение 1000 ч обнаружено уменьшение объёмной плотности кластеров. Данные наблюдения хорошо описываются моделью содержащей стадии зарождения, роста и последующей коалесценции.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП КАМИКС (http:/kamiks.itep.ru) НИЦ «Курчатовский институт».

1. S. Xu, Z. Zhou, H. Jia et al., J. Steel research int. **90**, 1800594 (2018). [2] B. Gault et al., Nature Reviews Methods Primers **1**, 1, 51 (2021).

Устный доклад

МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НАНОКОМПОЗИТА ОКСИД ИТТРИЯ / МАГНЕТИТ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

А. Х. А. Эльмекави[1,2,4]*, *А. С. Хамед*[1,2], *Х. Э. Хассан*[1,2], *А. И. Куклин*[3,4], *А. Х. Исламов*[4], *И. А. Али*[1,2], *О. Иванков*[4]

[1]Отдел экспериментальной ядерной физики, Центр ядерных исследований, Египетское управление по атомной энергии (EAEA), Каир, Египет
Управление по атомной энергии Египта (EAEA), Каир, Египет
[2]Циклотронная установка, Центр ядерных исследований, Египетское управление по атомной энергии (EAEA), Каир, Египет
[3]Московский физико-технический институт, Москва, Россия
[4]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: elmekawy@jinr.ru

Нанокомпозит оксид иттрия/магнетит с различной концентрацией магнетита (0, 25, 35 и 100 мас. %) исследован методом малоуглового рассеяния нейтронов наряду с другими методами для морфологического и структурного анализа. Эти нанокомпозиты могут быть использованы в широком спектре приложений, таких как биовизуализация, диагностика и терапия [1–4]. Однако наночастицы с различной морфологией и размером могут вызывать различный клеточный ответ, поэтому очень важно изучить морфологию нашего нанокомпозита.

Здесь мы использовали метод малоуглового рассеяния нейтронов МУРН [5,6] для исследования композита с различными концентрациями наночастиц иттрий-магнетита. Изучение структурного форм-фактора всего композита, а также определение того, как изменяется структура поверхности составляющих частиц при различной концентрации нашего композита путем определения размера первичной составляющей частицы в наномасштабном диапазоне и насколько это согласуется с результатами, полученными с помощью ТЭМ .

1. S. A. Corr, A. O'Byrne, Y. K. Gun'ko, et al., Chem. Commun. 4474–4476 (2006).
2. S. A. Corr, Y. P. Rakovich and Y. K. Gun'ko, Nanoscale Res. Lett. **3**, 87–104 (2008).
3. T. Andelman, S. Gordonov, G. Busto, et al., Nanoscale Res. Lett. **5**(2), 263–273 (2010).
4. A. G. Ali, B. F. Dejene, H. C. Swart, Phys. B Condens. Matter. **439**(15), 181–184 (2014).
5. S. A. Corr, Y. P. Rakovich and Y. K. Gun'ko, Nanoscale Res. Lett. **3**, 87–104 (2008).
6. A. Quarta, R. Di Corato, L. Manna, A. Ragusa and T. Pellegrino, IEEE Trans. anobiosci., **6**, 298– 308 (2007).

Переведено с помощью www.DeepL.com/Translator (бесплатная версия)

Секция 8.

Некристаллические материалы, полимеры, жидкости и биологические системы

Приглашенный доклад

ВЛИЯНИЕ СУЛЬФОРАФАНА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА БИОМИМЕТИЧЕСКИХ МЕМБРАН

М. В. Науменко[1,2], *Э. Б. Душанов*[1,3], *Н. А. Дрожжин*[1,3], *Ю. Е. Горшкова*[1,2]*

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия
[3]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
*E-mail: Yulia.Gorshkova@jinr.ru

Липосомальные системы доставки лекарственных веществ активно исследуются в современной фармацевтике благодаря своей способности обеспечивать контролируемую доставку биологически активных соединений. Одним из перспективных природных соединений, обладающих противоопухолевой и антибактериальной активностью, является сульфорафан (СФН) — изотиоцианат, выделяемый из растений семейства крестоцветных, таких как брокколи, цветная капуста и кольраби. СФН проявляет многофакторное действие: он подавляет активность ферментов, способствующих развитию рака, активирует защитные механизмы клеток и усиливает эффективность других противораковых препаратов.

Однако до сих пор остаются малоизученными механизмы взаимодействия СФН с клеточными мембранами, что имеет ключевое значение для понимания его транспорта, накопления и биологической активности. В данной работе исследовано влияние двух форм сульфорафана — природного (водный экстракт брокколи, СФН1) и синтетического (1-изотиоцианато-4-(метилсульфинил)бутан, СФН2) — на структурные характеристики однослойных фосфолипидных везикул на основе 1,2-димиристоил-sn-глицеро-3-фосфохолина (ДМФХ) как с добавлением холестерина (Хол), так и без него, используемых в качестве модельных систем клеточных мембран.

Структурные изменения однослойных везикул (ОСВ) ДМФХ и ДМФХ/Хол при добавлении природного и синтетического сульфорафана были изучены методами малоуглового нейтронного рассеяния (МУРН) на спектрометре ЮМО и малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) на установке XEUSS 3.0 при температуре 37°C. Определено, что добавление сульфорафана к ОСВ ДМФХ и ДМФХ/Хол (до 19 вес.% холестерина) не влияет на толщину липидного бислоя ($T = 38.6 \pm 2.8$ Å для ДМФХ), однако приводит к увеличению внутреннего диаметра везикул. Так, например, средние радиусы везикул составляют 211.8±1.2, 209.9±1.2, 216.8±0.4, 220.5±1.0 Å для чистого липида, липида с СФН1 и липида с СФН2 (ДМФХ/СФН2 = 50/1 и 10/1), соответственно. Установлено, что увеличение концентрации СФН приводит к слиянию везикул, о чем свидетельствует появление дифракционного пика при $q = 0,12$ нм$^{-1}$, соответствующего среднему расстоянию между соседними бислоями порядка 53.8 Å.

Следует предположить, что малый размер молекулы СФН позволяет ей легко диффундировать через бислой и проникать внутрь липосомы. В пользу этой гипотезы свидетельствуют и данные, полученные методом молекулярной динамики (МД). Расчёт плотности распределения молекул показал, что СФН в системе липид/СФН = 100/1 по массе (392 молекул ДМФХ, 16 молекул СФН и 19600 молекул воды) преимущественно располагается вне липидного бислоя и оказывает минимальное влияние на толщину липидного бислоя, которая составляет 36.9 Å между группами PCN гидрофильной головы липидных молекул, в то время как для ДМФХ эта величина равна 36.6 Å, что хорошо согласуется с данными, полученными методом малоуглового рассеяния.

В то же время, добавление сульфорафана индуцирует конформационные изменения как в гидрофильной, так и в гидрофобной областях липидных молекул, о чем свидетельствуют данные ИК-спектроскопии. Для ДМФХ при добавлении сульфорафана (ДМФХ/СФН = 10/1 и 50/1) наблюдаются изменения в двух основных областях ИК-спектров: в области цепей жирных кислот (2800–3000 $см^{-1}$) и в области фосфатных групп (900–1300 $см^{-1}$). В области фосфатных групп наблюдалось сужение асимметричной полосы PO_2 и расширение симметричной полосы PO_2. В области углеводородных цепей наблюдалось расширение полосы симметричных растягивающихся полос CH_2, симметричных CH_3 и сужение полос асимметричных растягивающихся CH_3. При этом широкоугольная мода рентгеновского рассеяния указывает на незначительное уменьшение расстояния между углеводородными хвостами: 4.42 Å для чистого ДМФХ и 4.21 Å для ДМФХ с добавлением СФН.

Полученные результаты позволяют предположить, что сульфорафан может модулировать физико-химические свойства липидных мембран, что открывает возможности для его применения в составе липосомальных систем доставки лекарств. Эти данные важны для разработки новых комбинированных препаратов, повышающих, на пример, эффективность противоопухолевой терапии за счёт улучшенной адресной доставки и усиления действия химиотерапевтических агентов.

Приглашенный доклад

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ УКЛАДКИ ХРОМАТИНА В ЯДРЕ КЛЕТКИ БЕССМЕРТНОЙ ЛИНИИ HeLa ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

С. В. Григорьев[1,2], *Е. Варфоломеева*[1], *Р. Пантина*[1], *В. Ю. Байрамуков*[1], *Р. А. Ковалев*[1], *Н. Д. Федорова*[1], *Ю. Е. Горшкова*[3], *Е. Г. Яшина*[1,2]

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
[2]Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru

Выполнены уникальные эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) с использованием техники контрастирования D_2O-H_2O на изолированных ядрах клеток бессмертной линии HeLa. Уникальность экспериментов обусловлена широким диапазоном переданных импульсов ($Q \in [0.0015 – 2.0]$ нм$^{-1}$), проводимых на установках KWS-3 и KWS-2 нейтронного исследовательского центра MLZ (Гархинг, Германия). Эти три порядка на шкале размеров лежат в пределах от 6 нм до 6 мкм, т.е. охватывают весь диапазон больших и средних неоднородностей хроматина, составляющего материал ядра биологической клетки и состоящего из макромолекул ДНК и белков. Рекордным является объем образцов концентрированного раствора ядер HeLa, который достигает 1 см^3, а в пересчете на количество ядер равен 10^9 штук в образце. Именно такой колоссальный объем выделенных из клеток ядер и позволяет провести на них эксперименты МУРН в трех различных смесях D_2O-H_2O. 100% раствор D_2O используют для получения максимального контраста между хроматином внутри ядра и средой для получения картины рассеяния от всей совокупности неоднородностей в ядре. 60–40% раствор D_2O-H_2O используют для экранирования в ядре ДНК ($\Delta\rho_{ДНК} = 0$) и визуализации только его белковой составляющей. 40–60% раствор D_2O-H_2O используют для экранирования в ядре белков ($\Delta\rho_{белки} = 0$) и визуализации только ДНК макромолекул.

Обычно исследуемые образцы ядер делящихся клеток представляют собой ансамбль интерфазных ядер, которые распределены по всем фазам клеточного цикла. Так в работах [1–4] исследовали образцы, в которых 70% ядер находятся в фазе G1, 10% — в фазе S и 20% — в фазе G2. Такая смесь ядер клеток, находящихся в разных фазах цикла, усредняет особенности кривых рассеяния, характерные для укладки хроматина в фазах G1, S и G2. Между тем, в делящихся клетках хроматин претерпевает транскрипцию, репарацию, репликацию ДНК – три важных функции, необходимых для цикла деления клетки. Кроме того, клетка образует ядрышки – отдельные тельца внутри ядра, состоящие из РНК и белков.Чтобы исследовать отдельные функции и идентифицировать изменения структуры хроматина необходимо синхронизовать деление ансамбля клеток в пределах их цикла.

Мы использовали чувствительность клеток к ионизирующему излучению для их дифференциации по фазам цикла, поскольку, например, остановка деления в фазе G2 является одним из основных механизмов ответа на повреждение ДНК клеток, вызванное заметной долей излучения. Рост репарационной активности является реакцией клетки на малые дозы излучения. Клетки после облучения снова помещали в условия, способствующие делению, но оказалось, что при облучении в 18 Gy любое деление останавливается, и большинство клеток остаются в фазе G2, а при облучении в 3 Gy усиливается репарационная активность. Именно из таких клеток – необлученных, слабо (3Gy) и сильно (18 Gy) облученных – были извлечены ядра в достаточных количествах для проведения нейтронных экспериментов. Мы использовали гистограммы проточной цитометрии для того, чтобы определить количество ядер с единичным (фаза G1) и двойным (фаза G2) набором хромосом, и, тем самым, установили положение клетки в цикле деления.

Получены зависимости интенсивности МУРН от переданного импульса Q для хроматина, а также парциальные сечения МУРН для ДНК и белков, характерные для: (1) фазы G1 с одинарным набором хромосом и обычной транляционной активностью, (2) фазы G2 с двойным набором хромосом, и (3) фазы G1 с мощной репарационной активностью. Показано, что крупномасштабная структура ядер HeLa для этих трех образцов качественно не отличается. Во всех случаях показано наличие трехуровневой иерархической структуры с характерными размерами для целого ядра $\sim$ 5μm, для крупномасштабного однородного тела внутри ядра $\sim$ 1, 5μm, а так же объемных фрактальных объектов $\sim$150 нм. Трехмерная визуализация ядер, расположенных на подложке, выполненная методом атомно-силовой микроскопии, подтверждает наличие внутри ядра жестких объектов с размерами в 1,5 μm и 150 нм.

Мы заключаем, во-первых, что парциальные сечения рассеяние как на ДНК, так и на белках на крупных масштабах интерпретируется как рассеяние нейтронов на однородных телах с размерами 5 μm и 1,5 μm, то есть оба вклада описываются двумя зависимостями характерым породовским спадом $\sim Q^{-4}$. Хроматин, хотя и является комбинацией ДНК и белков, демонстрирует рассеяние на логарифмической фрактальной структуре на масштабах от 5 μm до 100 нм, с законом рассеяния Q^{-3}. Эта основная тенденция для хроматина сопровождается рассеянием на однородном теле с размером 1,5 μm. Наблюдаемая логарифмическая фрактальная структура хроматина обеспечивает равномерное распределение пустот-каналов на разных масштабах, потенциально необходимых для обеспечения инфраструктуры ядерного транспорта и пространства для биологической активности ДНК. Таким образом показано, что эта структура присутствует в фазах G1 и G2 клеточного цикла. Однородное тело с характерным размером в 1.5 μm может быть ядрышком, состоящим из РНК и белков и непременно появляющемся внутри ядра делящейся клетки.

Во-вторых, и ДНК, и белки, и хроматин имеют схожую объемную фрактальную структуру (ОФС) с фрактальной размерностью $D = 2.5$ на масштабах от десятков до сотен нанометров. Структуры ДНК, белка и хроматина в фазе G1 качественно подобны структурам фазы G2. Однако, если в фазе G2 ОФС белков и ДНК совпадают с хорошей точностью, то в фазе G1 ОФС белков превосходит почти в 1.5–2 раза ОФС ДНК по интенсивности рассеяния. Наличие ОФС в ядре мы связываем с транскрипционной активностью клетки [5]. Особо отметим, что для образца фазы G1, предварительно подвергшегося облучению мощностью 3 Gy, наблюдается колоссальный рост ОФС белков до размеров в 350 нм и на порядок большей интенсивностью по сравнению с ОФС для ДНК, расссеяние на которой осталось на том же уровне, как и в необлученной клетке. Мы связываем этот рост с мощной репарационной активностью клетки. Колоссальный рост рассеяния на ОФС для этого образца так же наблюдается в экспериментах МУРР.

В третьих, отметим корреляцию интенсивностей рассеяния на белках между ОФК и однородным телом с размером в 1.5 μm, предположительно, ядрышком, что, возможно, указывает на принадлежность этих белковых комплексов к внутренней структуре ядрышка, а возможно и к образованию нескольких ядрышек внутри ядра.

В целом работа демонстрирует важность использования МУРН в широком диапазоне переданных импульсов, использования техники контрастирования растворов тяжелой и легкой воды, и техники синхронизации фаз клеточного цикла с помощью облучения, а так же открывает пути исследования структуры хроматина в различных и многочисленных линиях раковых клеток.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-12-00188).

1. E. G. Iashina, et al, Phys. Rev. E **96**, 012411 (2017).
2. E. G. Iashina, et al, J. Appl. Cryst. **52**, 844–853 (2019).
3. D. V. Lebedev, et al, BBRC **520**, 136 (2019).
4. S. V. Grigoriev, et al, Phys. Rev. E **104**, 044404 (2021).
5. Е. Г. Яшина, и др., Письма в ЖЭТФ **118**, 10, 776 – 781 (2023).

Приглашенный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОГО ПОРЯДКА КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ НАНОПЛАСТИН ГЕКСАФЕРРИТА СТРОНЦИЯ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Н. А. Григорьева[1]*, *Артем А. Елисеев*[2], *Андрей А. Елисеев*[2], *А. А. Семина*[2], *T. Zuo*[3], *H. Cheng*[3], *С. В. Григорьев*[4]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Московский государственный университет, Москва, Россия
[3]CSNS,Institute of High Energy Physic CAS, Dongguan, Guangdong, China
[4]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

*E-mail: n.a.grigorieva@yandex.ru

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы коллоидные растворы наночастиц гексаферрита стронция в воде. Эксперименты проводились на установке VSANS Китайского нейтронного центра CSNS (Дунгуань, Китай) с пучком нейтронов в диапазоне длин волн от 0.22 до 0.67 нм [1]. Магнитожёсткие частицы $SrFe_{12}O_{19}$ имеют пластинчатую форму 50×5 нм^2 и обладают коэрцитивной силой порядка 5000 Э, что позволяет за счет межчастичного взаимодействия управлять структурными параметрами коллоидного раствора в магнитном поле и расширить область его применения для электроники субтерагерцового/терагерцового диапазона частот на основе диэлектрических ферримагнетиков, для экранирования электронного оборудования и средств связи, для медицины, в качестве постоянных магнитов и так далее [2–7].

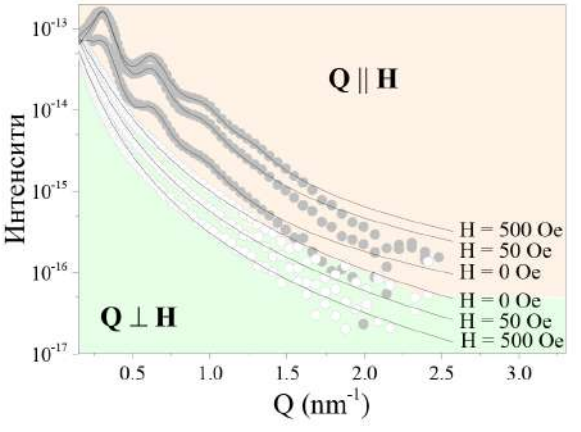

Рис. 1.

Двумерные карты малоуглового рассеяния были получены для концентрированного коллоидного раствора в зависимости от магнитного поля в диапазоне 0.5 ÷ 1000 Oe при = 300 K. Установлено, что при $H \sim 0$ Oe частицы произвольно ориентированы в воде, а с приложением магнитного поля они легко поворачиваются и выстраиваются вдоль поля из-за анизотропных стерических взаимодействий, демонстрируя фазовый переход изотропная жидкость — нематик. На рисунке 1 показаны зависимости интенсивности рассеяния от переданного импульса $I(Q)$, просуммированные в 30-градусных

секторах на двумерных картинах для двух направлений **Q**//**H** (заполненные символы) и **Q**⊥**H** (пустые символы). Из рисунка видно, что кривые описываются суммой диффузного изотропного рассеяния (первый член в ур. (1)) и серией дифракционных отражений (второй член в ур. (1)), появляющихся вдоль **Q**//**H** при Q_B, $2Q_B$, $3Q_B$, где Q_B = 0.3 нм$^{-1}$, что соответствует упорядочению частиц на расстоянии примерно 21 нм.

$$I(Q) = \frac{A_{bs}}{(Q^2 + k^2)^n} + \sum_{i=1}^{N} \frac{A_L \omega^2}{4(Q - Q_B)^2 + \omega^2} \quad (1)$$

Анализ магнитных зависимостей интенсивности рассеяния нейтронов демонстрирует быстрый рост амплитуды брэгговских максимумов в полях 0.5 < < 70 Ое, замедление роста при 70 < < 200 Ое и выход на насыщение при > 200 Ое (Рис.2*c*).

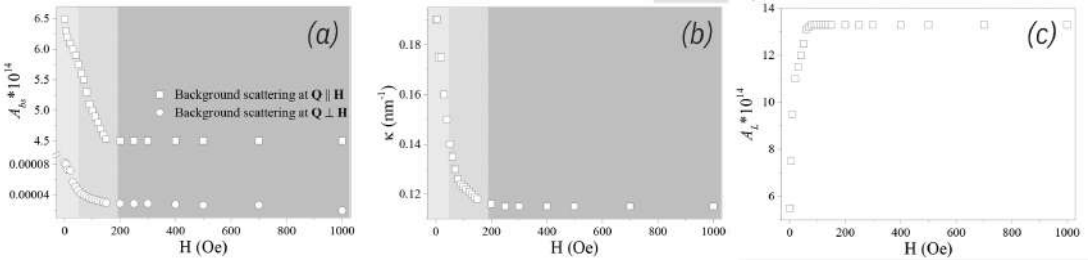

Рис. 2.

При этом ширина Брэгговских пиков ω не зависит от величины магнитного поля. Амплитуда диффузного рассеяния убывает с ростом магнитного поля и достигает минимума при = 200 Ое (Рис. 2*a*). Параметр к — обратный корреляционный радиус рассеивающего объекта, также быстро убывает при 0.5 < < 70 Ое, замедляет уменьшение при 70 < < 200 Ое и достигает минимума при > 200 Ое (Рис. 2*b*). Таким образом, можно выделить три структурных состояния магнитной жидкости. В не намагниченном образце при слабых полях $H < H_c$ образуются длинные, но слабо упорядоченные цепочки частиц гексаферрита. При $H > H_c$ эти цепочки трансформируются в изогнутые (спиралевидные) структуры, ориентированные вдоль магнитного поля. При $H \gg H_c$ спирали разбиваются на короткие прямые столбцы из 10–12 частиц, направленные исключительно вдоль магнитного поля. Эти результаты подтверждаются численным моделированием коллоидного раствора в магнитном поле.

1. T. Zuo, et al. Journal of Applied Crystallography **57**, 380–391 (2024).
2. A. I. Kovalev, et al. Phys. Atom. Nuclei **87**, 1416–1420 (2024).
3. V. K. Chakradhary, et al. Composites Part B: Engineering **183**, 107667 (2020).
4. S. S. Danewalia, et al. Mater. Today Bio. **10**, 100100 (2021).
5. S. Khabirova, et al. Dalton Transactions **52**(6), 1731–1741 (2023).
6. M. Zahid, et al. Phys. Scr. **96**(12), 125405 (2021).
7. E. A. Gorbachev, et al. Materials Horizons **11**(16), 3844–3855.

Приглашенный доклад

ПРИМЕНЕНИЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА ИМПУЛЬСНОМ ИСТОЧНИКЕ

А. И. Иваньков, Т. Н. Муругова, А. Х. Эльмекави, А. Х. Исламов, А. И. Куклин*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: ivankov@jinr.int

Метод малоуглового рассеяния нейтронов один из основных методов структурных исследований конденсированных сред. В докладе продемонстрированы исследования надмолекулярных структур на малоугловом спектрометре ЮМО (Дубна, ОИЯИ, ИБР-2)[1]. Представлены основные параметры спектрометра. Показаны достоинства использования импульсных источников для исследования методом малоуглового рассеяния нейтронов. Продемонстрировано, что одним из ключевых параметров спектрометра на основе импульсных источников является поток на образце, который наряду с многодетекторной системой позволяет значительно расширить динамический диапазон по переданному импульсу и сократить время проведения эксперимента. Обсуждаются вопросы использования нового холодного замедлителя на реакторе ИБР-2.

Обсуждаются вопросы, касающиеся особенностей реализации эксперимента на спектрометре ЮМО. Продемонстрировано, что время проведения эксперимента может достигать нескольких минут. Показаны преимущества современного программного обеспечения для обработки первичных данных со спектрометра [2]. Рассмотрены перспективы развития методики МУРН и, в частности, спектрометра ЮМО.

1. A. I. Kuklin et al., Crystallography Reports **66**, 2, 230 (2021).
2. A. G. Soloviev et al., Journal of Physics: Conference Series **848**, 1, 012020 (2017).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ВОЛОКОН И ИХ КОМПОЗИТОВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО НЕЙТРОННОГО И РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

М. Балашою[1,2,3]*, *С. А. Астафьева*[4], *Е. В. Иванова*[4], *Е. А. Лебедева*[4], *Д. К. Трухинов*[4], *А. И. Иваньков*[1], *А. Х. Эльмекави*[1,5], *О. Н. Лис*[1], *Ю. Е. Горшкова*[1], *В. С. Смирнова*[1], *А. В. Руткаускас*[1], *С. Е. Кичанов*[1]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Западный университет Тимишоары, Тимишоара, Румыния
[3]Национальный институт исследований и разработок в области физики и ядерной инженерии имени Хории Хулубея, Бухарест-Мэгуреле, Румыния
[4]Институт технической химии УрО РАН» – филиал Пермского федерального исследовательского центра УрО РАН, Пермь, Россия
[5]Отделение экспериментальной ядерной физики, Центр ядерных исследований, Египетское управление по атомной энергии, Каир, Египет
*E-mail: balas@jinr.ru

Углеродное волокно (УВ) имеет множество уникальных свойств, которые делают его одним из очень перспективных материалов в современной промышленности. УВ имеют широкую прикладную важность благодаря своим особенным свойствам, таким как высокая прочность, малый вес, устойчивость к высоким температурам и химическая инертность. Это делает их незаменимыми в самых разных отраслях, включая авиацию, автомобилестроение, электронику, медицину, строительство и спортивное оборудование.

В настоящее время ведутся активные исследования полимерных композиционных материалов (ПКМ), экранирующих электромагнитные волны (ЭМВ). Углеродные волокна являются перспективным материалом для использования в качестве наполнителя для этой цели [1]. Использование магнитных материалов в качестве компонентов широкополосных экранирующих материалов хорошо известно исследователям. Магнетит (Fe_3O_4) является эффективным наполнителем для материалов, поглощающих электромагнитные волны [2].

Особое внимание направлено на совершенствование структурной организации как самих получаемых материалов (металлоорганические каркасы, сегрегированные структуры, слоистые материалы, пены), так и наполнителей (модификация поверхности, структуры ядро-оболочка) [3, 4].

В данной статье представлен обзор ряда структурных [5] исследований волокон и композитов на их основе, включая наши собственные результаты по углеродным волокнам, покрытыми магнитными наночастицами, и внедренными в полимеры на основе акрилонитрил-бутадиен-стирола (АБС-пластик), для создания эффективных материалов с хорошим экранированием от электромагнитных помех (ЭМП) при использовании промышленных методов производства [6].

1. D.-h. Li, C.-x. Lu, J.-j. Hao, H.-m. Wang, NewCarbon Mater. **35**, 793 (2020).
2. A. A. Khodiri, M. Y. Al-Ashry, A. G. El-Shamy, J. Alloys Compd. **847**, 156430 (2020).
3. S. Liu, S. Qin, Y. Jiang, P. Song, H. Wang, Compos. Part A Appl. Sci. Manuf. **145**, 106376 (2021).
4. E. V. Ivanova, E. A. Lebedeva, D. K. Trukhinov, et al., Russian Chemical Bulletin **73**(8), 2177—2183 (2024).
5. M. Bălăşoiu, E. Kornilitsina, E. Lebedeva, et al., Romanian Journal of Physics 2025 (in preparation).
6. E. A. Lebedeva, E. V. Ivanova, D. K. Trukhinov, et al., Polymers **16**, 2153 (2024).

Устный доклад

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ИБУПРОФЕНА: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И DFT-ИССЛЕДОВАНИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

П. А. Гергележиу[1,2]*, *Е. В. Ракша*[1], *А. В. Белушкин*[1], *Е. А. Горемычкин*[1], *А. Б. Ересько*[1], *Д. М. Худоба1*[1]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Филиал МГУ имени М.В. Ломоносова в г. Дубне, Дубна, Россия
*E-mail: geregelezhiu@jinr.ru

Ибупрофен ((RS)-2-(4-изобутилфенил)-пропионовая кислота) – нестероидный противовоспалительный препарат из перечня жизненно необходимых и важнейших лекарств. Наряду с широким использованием в медицине, это соединение очень часто используется в качестве модельного объекта для разработки и демонстрации возможностей новых методов и подходов исследования структуры и свойств биологически активных соединений, для разработки новых лекарственных форм и средств адресной доставки. Ибупрофен представляет собой рацемическую смесь двух энантиомеров (R и S), неактивный R-энантиомер *invivo* подвергается метаболической инверсии и превращается в активный S, в то время как обратная инверсия незначительна. В результате исследований рацемата ибупрофена методами ИК- и Раман спектроскопии в комбинации с молекулярным моделированием удалось успешно соотнести большинство параметров экспериментальных спектров с соответствующими фрагментами структуры ибупрофена [1, 2]. Однако информация о колебаниях карбоксильной группы ибупрофена противоречива, что связано с ограничениями используемой модели – в случае одиночной молекулы в расчетах не учитываются межмолекулярные взаимодействия. По данным рентгеноструктурного анализа [3] в кристаллической структуре ибупрофена можно выделить структурный фрагмент, представляющий собой циклический димер R и S энантиомеров (рис. 1). Водородные связи в таком димере будут определять характер колебательных спектров ибупрофена.

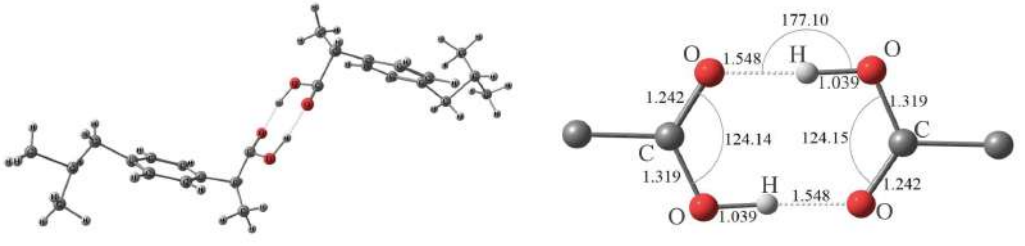

Рис. 1. Фрагмент S-R димерного кластера кристаллической решетки рацемического ибупрофена [1] (*а*); ключевые параметры молекулярной геометрии водородных связей в циклическом S-R димере ибупрофена, полученные на уровне теории BP86/def2-TZVP (*б*)

В работе представлены результаты комплексных исследований особенностей молекулярной динамики ибупрофена с использованием комбинации расчетных (DFT на уровне теории BP86/def2-TZVP) и экспериментальных методов: ИК- и Раман-спектроскопия, некогерентное неупругогое рассеяние нейтронов (НРН). В качестве модели для

расчетов методом DFT использовали S-R димерный кластер ибупрофена, что позволяет учесть наличие двух водородных связей между карбоксильными группами (рис. 1,*б*). Экспериментальные исследования методом НРН (времяпролетный спектрометр с инвертированной геометрией НЕРА на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2, ОИЯИ, г. Дубна) позволяют в значительной мере дополнить информацию о колебаниях, характеризующих межмолекулярные взаимодействия в структуре ибупрофена, поскольку в случае НРН отсутствуют правила отбора и в спектре доминируют полосы, соответствующие колебаниям протонов.

Показано, что наличие межмолекулярных водородных связей в циклическом R-S димере ибупрофена существенно влияет на колебательные частоты групп атомов, принимающих участие в межмолекулярных взаимодействиях. Использование димерного кластера в качестве модели для DFT-расчетов позволяет получить более корректные результаты, сравнимые с экспериментом [1, 2]. Установлены корреляции между расчетными и экспериментальными наблюдаемыми колебательными частотами ибупрофена. Выявлены ключевые колебательные частоты карбоксильной группы, которые могут быть использованы в качестве маркеров межмолекулярных взаимодействий при исследовании молекулярной динамики и динамики водородных связей ибупрофена и других соединений из этой группы лекарственных препаратов.

Работа выполнена при поддержке гранта молодым ученым и специалистам ОИЯИ 24-402-01.

1. M. L. Vueba et al., J. Pharm. Sciences. **97**, 845 (2008).
2. K. Logacheva et al., PEPAN Letters. **21**, 839 (2024).
3. P. Derollez et al., Acta Crystallogr. B. **66**, 76 (2010).

Устный доклад

КОМПЛЕМЕНТАРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЕННЫХ ОКСИДАМИ СТАЛЕЙ МЕТОДАМИ АТОМНО-ЗОНДОВОЙ ТОМОГРАФИИ, ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ И МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

А. В. Клауз, С. В. Рогожкин, А. А. Халявина, А. А. Богачев*

НИЯУ МИФИ, Москва, Россия
*E-mail: AVKlauz@mephi.ru

В перспективных ядерных и термоядерных реакторах материалы активной зоны должны обладать высокой радиационной стойкостью и жаропрочностью при температурах до 650 °C и дозах до 200 сна (смешений на атом). Перспективными материалами, способными удовлетворить эти требования, являются дисперсно-упрочненные оксидами (ДУО) стали, содержащие в своей матрице однородно распределенные термически стабильные наноразмерные оксиды [1–2].

Сравнение полученных данных после термического старения с данными для исходного состояния демонстрирует во всех сталях рост объёмной плотности кластеров (при сохранении или росте среднего размера) при старении в течение 500 ч, соответствующий стадии зарождения кластеров. В то время как после старения в течение 1000 ч обнаружено уменьшение объёмной плотности, что соответствует стадии созревания/коалесценции. Данные закономерности также подтверждаются анализом изменения концентрации химических элементов в матрице. Изменения объёмной плотности, средних размеров, химического состава кластеров, а также матрицы указывают на существенное взаимодействие кластеров и оксидов в исследуемых материалах в условиях термического старения при 650°C до 1000 ч.

После старения в течение 500 ч при 650°C обнаружено, что в 13.5Cr-Fe_3Y ODS оксидные частицы немного уменьшаются в размере до $\sim$10 нм при сохранении объёмной плотности; поры немного уменьшаются в размере до $\sim$3 нм и увеличивается их объёмная плотность до 42×10^{21}м$^{-3}$. Исследование после старения в течение 1000 ч при 650 °C обнаружило, что оксидные частицы сохраняют средний размер $\sim$10 нм, а объёмная плотность увеличивается до 7×10^{21}м$^{-3}$.

Исследование методом МУРР после термического старения показало незначительные увеличение (менее чем на 1 нм) средних размеров в исследованных сталях, а также уменьшение объёмной плотности (менее чем на 1×10^{22}м$^{-3}$) для 9Cr ODS и 10Cr ODS при термическом старении до 1000 ч. При этом в стали КР-3 ODS обнаружено небольшое увеличение объемной плотности включений (менее чем на 2×10^{22}м$^{-3}$), предположительно обусловленное взаимодействием подсистем оксидов и кластеров. В целом, полученные результаты демонстрируют высокую термическую стабильность наноразмерных оксидных частиц в исследованных ДУО сталях. В тоже время следует отметить, что низкий контраст кластеров при малоугловом рентгеновском рассеянии не позволил их выявить, и проанализировать их изменения при старении.

Комплекс исследований показал наличие характерных изменений в подсистеме кластеров при высокой стабильности подсистемы оксидных частиц, а также наличие их взаимодействия.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП КАМИКС (http:/kamiks.itep.ru) НИЦ «Курчатовский институт».

1. B. Mouawad, X. Boulnat, D. Fabrègue, M. Perez, Y. de Carlan, Journal of Nuclear Materials **465**, 54–62 (2015).
2. S. Xu, Z. Zhou, H. Jia, Z. Yao, Steel research int. **90**, 1800594 (2018).

Устный доклад

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ПРЕПАРАТА «АРБИДОЛ-НФ» МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

В. А. Чаусова[1]*, *М. А. Киселев*[1], *L. Almásy*[2]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Росси
[2]Institute for Energy Security and Environmental Safety, HUN-REN Centre for Energy Research, Budapest, Hungary
*E-mail: varvara@jinr.ru

Создание новых систем доставки лекарств — распространенный способ повысить эффективность известных препаратов. Примером такой разработки стала фосфолипидная транспортная наносистема (ФТНС), везикулярная система на основе соевых фосфолипидов, созданная в Институте биомедицинской химии им. Ореховича. Работы по данной системе описывают основные структурные характеристики частиц, которые могут быть использованы в будущем для модернизации ФТНС [1–3].

Данная работа посвящена анализу данных от малоуглового рассеяния нейтронов на нанолекарствах (ФТНС + лекарственное соединение). Мы рассматривали препарат «Арбидол», включенный в ФТНС (Арбидол-НФ). Измерения выполнены на малоугловых установках: ЮМО (ИБР-2, ОИЯИ, Дубна) [4] и YS-SANS (BNC, Будапешт) [5]. В качестве растворителя использовалась тяжелая вода. Были приготовлены образцы со следующими концентрациями: 5, 10 и 25% (ЮМО) и 5% и 25% (YS-SANS). Дополнительным объектом изучения на установке YS-SANS стало влияние чистоты соевых фосфолипидов на структуру системы.

При использовании более чистых соевых фосфолипидов везикулы препарата «Арбидол-НФ» обладают критически малыми размерами ($\bar{R} < 50$ Å) при средней толщине липидного бислоя $\bar{d} \approx 32$ Å. Из полученных данных можно сделать вывод, что везикулярная структура системы сохраняется при увеличении концентрации образца, и выбор соевых фосфолипидов определенной чистоты для создания ФТНС оказывает влияние на размер данной системы.

1. Н. В. Медведева и др., Биомедицинская химия **61**(2), 219–230 (2015).
2. E. V. Zemlyanaya et al., Journal of Physics: Conference Series **1023**(1), 012017 (2018).
3. V. A. Maslova et al., J. Surf. Investig. **18**, 929–935 (2024).
4. А. И. Куклин и др., Кристаллография **66**(2) С. 230–241 (2021).
5. L. Almásy, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **15**(3), 527–531 (2021).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СВОБОДНОГО ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ В ПРОЦЕССЕ ЗАПОЛНЕНИЯ/ВЫТЕКАНИЯ НЕСМАЧИВАЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

А. А. Белогорлов[1,2]*, *Ю. Е. Горшкова*[3], *Г. П. Копица*[4,5], *А. И. Куклин*[3], *Д. В. Львов*[2,6], *А. Н. Тюлюсов*[2,6], *Й. Шмайснер*[2,6]

[1]Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[4]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
[5]Институт химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия
[6]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: AABelogorlov@ips.ac.ru

Нанопористый материал в соединении с несмачивающей жидкостью являются перспективными системами по аккумулированию и генерации механической энергии для различных прикладных областей: от медицины до пожаротушения [1].

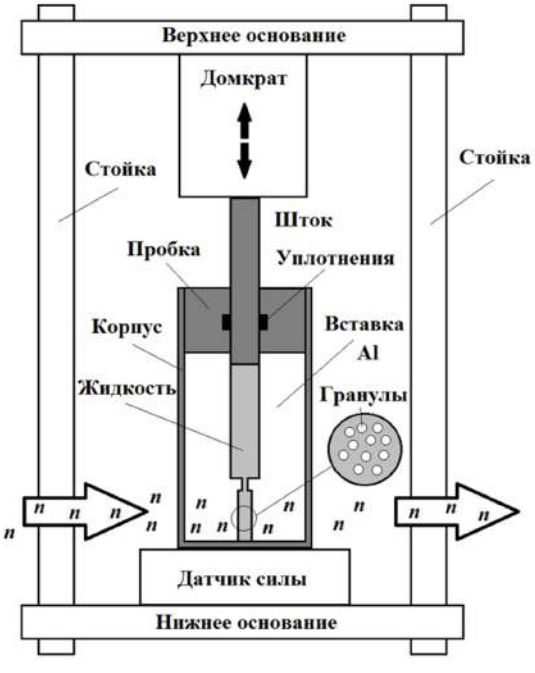

Рис. 1. Схема эксперимента с установкой избыточного давления (вид в профиль).

В случае приложения к таким системам избыточного давления пространство пор может заполняться несмачивающей жидкостью, а при снятии избыточного давления

жидкость может вытекать полностью, частично или не вытекать вообще. Процессы взаимодействия несмачивающих жидкостей с нанопористыми материалами требуют определения механизма диспергирования жидкостей в пространстве материала. Для этого было решено исследовать подобные системы с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), подходящего для рассеивателей размеров нанометрового диапазона и чувствительного к изменению контраста рассеяния для водородосодержащей несмачивающей жидкости.

Разработана методика и проведен эксперимент (рис. 1) по исследованию изменения свободного порового пространства нанопористых материалов в процессе заполнения/вытекания несмачивающей жидкости методом малоуглового рассеяния нейтронов. Исследование проводилось на дифрактометре малоуглового рассеяния нейтронов Yu–Mo лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, г. Дубна [2]. В качестве образцов использовались порошки гидрофобизированного силикагеля SG60C8F и SG40C1 с контрастной средой H_2O–D_2O. Смесь тяжелой и легкой воды была подобрана таким образом, чтобы контраст между матрицей силикагеля и жидкостью в нейтронном эксперименте был равен нулю. В этом случае при заполнении пор жидкостью малоугловое рассеяние на заполненных порах исчезает. Исследовалось изменение свободного порового пространства и степени заполнения пор при различных значениях давления в системе. Из поведения угловых спектров МУРН, представленных на рис. 2, видно, что процесс заполнения пор активно идет при давлениях более 300 атм.

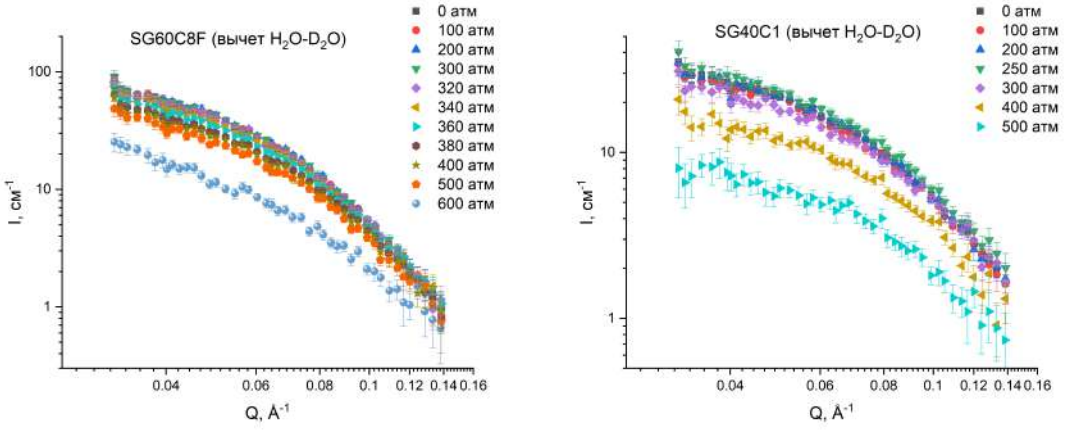

Рис. 2. Кривые МУРН для образцов SG60C8F и SG40C1 после вычета H2O-D2O контраста при изменении избыточного давления.

1. A. A. Belogorlov et al., Pharm. Chem. J. **54**, 10, 1063–1066 (2021).
2. A. I. Kuklin et al., J. of Phys: Con. Ser. **291**(1), 012013 (2011).

Устный доклад

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ХРОМАТИНА В ЯДРАХ ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е. Г. Яшина[1,2]*, *Е. Ю. Варфоломеева*[2], *Р. А. Пантина*[2], *Р. А. Ковалев*[2], *Н. Д. Федорова*[2], *Ю. Е. Горшкова*[3], *С. В. Григорьев*[2]

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[2]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия
[3]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: yashina_91@inbox.ru

Одним из наиболее информативных и востребованных методов определения структуры неупорядоченных биологических объектов является метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и рентгеновского излучения (МУРР). Исследования крупномасштабной организации хроматина с помощью ультра малоугловых техник нейтронного рассеяния, таких как Спин-Эхо МУРН и Ультра МУРН, демонстрируют наличие структуры логарифмического фрактала в ядрах нормальных и опухолевых клеток [1–6]. В классическом малоугловом рассеянии структура логарифмического фрактала наблюдается как кубический закон рассеяния зависимости от модуля переданного импульса ($I \sim Q^{-3}$) [1–4], а в Спин-Эхо малоугловом рассеянии структура логарифмического фрактала наблюдается как экспоненциальная Спин-Эхо корреляционная функция ($G = \exp(-z/\xi)$) [4–6]. В ядрах нормальных клеток, таких как лимфоциты крысы структура логарифмического фрактала наблюдается в диапазоне масштабов от 3,7 μm до 60–30 nm [1,6], в то время, как в ядах опухолевых клеток, таких как HeLa – от 5,1 μm до 200 nm [2,5].

Стоит отметить, что структура логарифмического фрактала является универсальной для большинства типов ядер и образуется из системы полостей, которые формируют систему транспортных каналов, необходимую для метаболизма и инфраструктуры внутри ядра, а также формирует собой пространство потенциально необходимое для осуществления биологических функций ДНК.

Эксперименты по МУРН и МУРР на ядрах опухолевых клеток HeLa демонстрируют наличие объемно-фрактальной структуры в диапазоне масштабов от 200 nm до 30 nm и фрактальной размерностью DF близкой к 2,5 [3]. В то время как эксперименты по МУРР на ядрах опухолевых клеток HeLa с подавленной транскрипционной активностью двумя разными способами (культивирование в условиях дефицита питательной среды и культивирование с добавлением ингибитора транскрипции актиномицина Д), демонстрируют отсутствие объемно-фрактальной структуры, при этом наблюдается наличие 20–30 нанометровых петель нуклеосомной фибриллы. Результаты этих экспериментов иллюстрируют связь наличия объемно-фрактальных структур в ядре с высокой транскрипционной активностью хроматина, характерной для опухолевых клеток. Также эта гипотеза подтверждается исследованиями структуры хроматина в ядрах нормальных клетках и их раковых аналогов с помощью метода МУРР. Эксперименты проводилось на установке малоуглового рассеяния рентгеновского излучения Xenox 3.0 (ОИЯИ, Дубна, Россия) на ядрах лимфоцитов крысы (низкая транскрипция) и ядрах раковых клеток лимфоцитов NC-37 (высокая транскрипционная активность), а также на ядрах нейтрофилов свиньи (низкая транскрипция) и ядрах раковых лейкоцитов клеточной линии

K562 (высокая транскрипционная активность) и в обоих случаях продемонстрировали наличие объемно-фрактальной структуры размером порядка 100 nm и с фрактальной размерностью D близкой к 2.6 в ядрах опухолевых клеток, и ее отсутствие в ядрах нормальных клеток.

Таким образом, высокая транскрипционная активность хроматина, характерная для опухолевых клеток связана с наличием объемно-фрактальной структуры в ядре, а метод малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения является хорошим инструментом для исследования структурных особенностей хроматина в опухолевых клетках, а также различных изменений в хроматине под воздействием веществ, влияющих на активность генов на эпигенетическом уровне.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-72-00128).

1. E. G. Iashina , E. Yu. Varfolomeeva, R. A. Pantina, et al., Physical Review E **104**(6), 064409 (2021).
2. S. V. Grigoriev, E. G. Iashina, B. Wu, et al., Physical Review E **104**(4), 044404 (2021).
3. Е. Г. Яшина, Е. Ю. Варфоломеева, Р. А. Пантина, и др., Письма в ЖЭТФ **118**(10), 776–781 (2023).
4. E. G. Iashina, E. V. Velichko, M. V. Filatov, et al., Physical Review E **96**(1), 012411 (2017).
5. E. G. Iashina, M. V. Filatov, R. A. Pantina, et al., Journal of Applied Crystallography **52**(4), 844–853 (2019).
6. E. G. Iashina, W. G. Bouwman, C. P. Duif, et al., Journal of Applied Crystallography **56**(5), 1512–1521 (2023).

Секция 9.

Прикладные и индустриальные исследования с нейтронами

АНАЛИЗ НАНОСТРУКТУРЫ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ЯДЕРНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

С. В. Рогожкин[1,2]

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия
*E-mail: Sergey.Rogozhkin@itep.ru
SVRogozhkin@mephi.ru

Наноструктура конструкционных материалов ядерных энергетических установок во многом определяет эксплуатационные свойства, а в наноструктурированных сплавах и исходное состояние. Под облучением происходит эволюция наноструктуры (формирование радиационных дефектов, предвыделений и выделений фаз, перераспределения примесей и легирующих элементов). Это приводит к хорошо известным макроскопическим проявлениям, таким как распухание, охрупчивание и т.д. В тоже время экспериментальное изучение процессов на таких масштабах в сталях и других многокомпонентных материалах было затруднительно. Изучение структуры материалов проводится с использованием ряда экспериментальных методик. Высокую степень разрешения обеспечивают: просвечивающая электронная микроскопия (см., например [1, 2]), объединенная с рентгеновской спектроскопией или спектрометрией электронных энергетических потерь [3], атомно-зондовая томография [4], малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) [5], позитронная аннигиляционая спектроскопия [6]. Эти методы являются взаимодополняющими, и исчерпывающую информацию дает только комплексный анализ радиационно-индуцированных эффектов [5, 6].

МУРН позволяет определить с высокой точностью объемную плотность включений и нанокластеров, а также получить их распределение по размерам. В настоящей работе представлены результаты анализа наноструктуры различных реакторных сталей комплексом методик и продемонстрированы возможности МУРН при анализе сложной наноструктуры в реакторных материалах [7]. Значительное внимание уделено дисперсно-упрочненным оксидами сталям, содержащим высокую плотность оксидных включений и нанокластеров, обогащенных Y, O и другими легирующими элементами.

1. S. V. Rogozhkin, A. A. Bogachev A.A. Nikitin, et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **486**, 1–10 (2021).
2. S. V. Rogozhkin, A. A. Khomich, A. A. Bogachev, et al. Physics of Atomic Nuclei **83**(11), 1519–1528 (2020).
3. M. Klimenkov, R. Lindau, A. Möslang, J. Nucl. Mater. **386–388**, 553–556 (2009).
4. S. V. Rogozhkin, A. A. Aleev, A. G. Zaluzhnyi, et al, J. Nucl. Mater. **409**, 94–99 (2011).
5. E. Meslin, M. Lambrecht, et al, J. Nucl. Mater. **406**, 73–83 (2010).
6. A. Kryukov, L. Debarberis, A. Ballesteros, et al, J. Nucl. Mater. **429**, 190–200 (2012).
7. S. V. Rogozhkin, A. V. Klauz, Yu. Ke, et al. Nanomaterials **14**, 194 (2024).

Устный доклад

МЕТРОЛОГИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ НЕЙТРОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Е. В. Алтынбаев[1,2]*, *К. В. Гоголинский*[2], *Н. Н. Моисеев*[3]

[1]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
[2]НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
[3]ВНИИМ им. Д. И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: e.altynbaev@spbu.ru

Метрологическое обеспечение нейтронных измерений представляет собой комплекс мероприятий, направленных на достижение и поддержание требуемой точности измерений параметров нейтронных полей, таких как плотность потока, энергетическое распределение, мощность дозы и параметры взаимодействия с ядрами конструкционных и делящихся материалов.

Актуальность данной задачи обусловлена широким применением нейтронных измерений в таких критически важных областях, как ядерная энергетика (контроль работы реакторов, радиационная безопасность, повышение точности определения содержания урана-235 в топливных сборках), медицина (снижение риска опасного переоблучения онкологических больных при проведении нейтронной и нейтронозахватной терапии, снижение дозовых нагрузок на персонал), материаловедение (анализ структуры материалов, неразрушающий анализ состава) и фундаментальные научные исследования.

Для решения задачи метрологического обеспечения нейтронных измерений разрабатывается проект, направленный на организацию и проведение научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ с целью создания эталонов и средств измерений основных параметров ионизирующих излучений, в т.ч.:

- аттестация нейтронного спектрометра по времени пролета «ГНЕЙС» на базе синхроциклотрона «СЦ-1000» с энергией протонов 1 ГэВ в НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ в качестве рабочего эталона плотности потока тепловых нейтронов. Это позволит решить задачу аттестации средств измерений нейтронного излучения в соответствии с действующими требованиями ГК «Росатом»;
- развитие средств измерений спектральных характеристик выведенных пучков тепловых и холодных нейтронов с целью последующей аттестации исследовательских источников нейтронов. Решение данной задачи актуально в связи с перспективами строительства и ввода в эксплуатацию ГК «Росатом» пучковых исследовательских ядерных реакторов с холодными и горячими источниками нейтронов в ряде дружественных стран.

Таким образом, метрологическое обеспечение нейтронных измерений является важнейшим элементом развития ядерных технологий и смежных областей науки. Реализация представленного в настоящей работе проекта позволит не только сохранить, но и расширить метрологические возможности России в области нейтронных измерений. Особую значимость приобретает разработка альтернативных эталонных источников на базе ускорительной техники, что особенно актуально в условиях вывода из эксплуатации исследовательских реакторов старого поколения. Также это позволит поддержать экспортный потенциал российских ядерных технологий, а также укрепить позиции страны в международном научном сообществе. Дальнейшее развитие данного направления должно включать как модернизацию экспериментальной базы, так и подготовку квалифицированных кадров, способных решать сложные метрологические задачи нового поколения.

ДИФРАКЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА ПРОДУКТОВ ПИРОХИМИЧЕСКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ МОДЕЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

О. А. Голосов[1]*, *С. С. Хвостов*[1], *А. Ф. Губкин*[1,2], *П. Н. Мушников*[3], *Ю. П. Зайков*[3], *А. Н. Пирогов*[2], *М. А. Сёмкин*[2], *Н. В. Глушкова*[1]

[1]АО «Институт реакторных материалов», Заречный, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт высокотемпературной электрохимиии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*E-mail: golosov_oa@irmatom.ru

В России принята стратегия на развитие двухкомпонентной ядерной энергетики, основанной на использовании методов пирохимической переработки ОЯТ. Для полного извлечения целевых компонентов необходима тщательная отработка всех этапов и стадий пирохимической переработки ОЯТ. В череде решения этих задач особая роль отводится отработке этапов пирохимической переработки, в том числе на образцах модельного ядерного топлива (МЯТ).

В данной работе приведены результаты исследований фазового состава с использованием метода дифракции нейтронов 5 образцов МЯТ, имитирующих возможные составы ОЯТ, в исходном состоянии и после различных стадий пирохимической переработки, в частности после этапа металлизации оксидного топлива.

Исследовались образцы МЯТ в виде механической смеси UO_2 и ZrO_2 с соотношением (в масс.%):
– UO_2 : ZrO_2 = 95 : 5 в исходном состоянии (образец № 1);
– UO_2 : ZrO_2 = 95 : 5 после прессования, спекания и размола (образец № 2);
– UO_2 : ZrO_2 = 95 : 5, образец № 2 после электролитического восстановления и отгонки электролита (образец № 3);
– UO_2 : ZrO_2 = 95 : 10 после прессования, спекания и размола (образец № 4);
– UO_2 : ZrO_2 = 95 : 10, образец № 4 после электролитического восстановления и отгонки электролита (образец № 5).

Исследования выполнены на дифрактометре высокого разрешения Д-7а исследовательского ядерного реактора ИВВ-2М (г. Заречный). Анализ экспериментальных данных проводился с использованием полно профильного метода Ритвельда при помощи программного пакета *FullprofSuite*. Результаты исследований и анализа исследуемых образцов приведены в таблице 1.

Установлено, что образец № 1 МЯТ представляет собой механическую смесь диоксида урана UO_2 с содержанием (88,8 $\pm$ 1,1) масс.%, нестехиометрической фазы UO_{2+x} с избытком (x) по кислороду на уровне порядка 0,2 и содержанием (5,5 $\pm$ 0,3) масс.%, включающая фазу моноклинного диоксида циркония m-ZrO_2 в количестве (5,4 $\pm$ 0,3) масс.%.

В результате отжига исходных смесей диоксидов урана и циркония после их прессования, спекания и размола (образцы № 2 и № 4 МЯТ) выявлено снижение содержания моноклинного циркония с одновременным формированием смешанных твердых растворов $(U,Zr)O_{2+x}$. Образование этой фазы приводит к уменьшению содержания двуокиси урана в образцах, особенно сильно этого выражено на образце № 4 с почти в два раза большим содержанием циркония.

Таблица 1. Результаты исследований образцов № 1–5

Номер образца	Фаза	Группа	Содержание, масс.%	Параметр решетки, нм		
				a	*b*	*c*
1	UO_2	$Fm-3m$	88,8 ± 1,1	0,54690 ± 0,00003	–	–
	m-ZrO_2	$P2_1/c$	5,4 ± 0,3	0,5174 ± 0,0019	0,5213 ± 0,0020	0,5262 ± 0,0074
	UO_{2+x} ($x \approx 0,2$)	Fm-3m	5,5 ± 0,3	0,54228 ± 0,0000	–	–
	α-Fe	$Im-3m$	0,3 ± 0,1	0,28618 ± 0,00014	–	–
2	UO_2	$Fm-3m$	78,5 ± 1,2	0,54641 ± 0,00003	–	–
	m-ZrO_2	$P2_1/c$	2,7 ± 0,2	0,5220 ± 0,0004	0,5162 ± 0,0004	0,540 ± 0,011
	$Zr_yU_{1-y}O_{2+x}$	$Fm-3m$	18,8 ± 0,7	0,54170 ± 0,00003	–	–
3	α-U	$Cmcm$	81,7 ± 1,4	0,28586 ± 0,00002	0,58674 ± 0,00004	0,49625 ± 0,00003
	UO_2	$Fm-3m$	15,5 ± 0,4	0,54692 ± 0,00003	–	–
	$(Zr,U)O_{2+x}$	$Fm-3m$	0,6 ± 0,3	0,54102 ± 0,00022	–	–
	Zr	$P6_3/mmc$	2,2 ± 0,2	0,32432 ± 0,00008	–	0,52033 ± 0,00012
4	UO_2	$Fm-3m$	60,9 ± 1,1	0,54624 ± 0,00003	–	–
	m-ZrO_2	$P2_1/c$	1,7 ± 0,3	0,5274 ± 0,0012	0,5204 ± 0,0009	0,532 ± 0,014
	t-ZrO_2	$P4_2/nmc$	2,0 ± 0,2	0,36375 ± 0,0019	–	0,5289 ± 0,0005
	$Zr_yU_{1-y}O_{2+x}$	$Fm-3m$	35,4 ± 0,9	0,54035 ± 0,00004	–	–
5	α-U	$Cmcm$	66,2 ± 1,3	0,28582 ± 0,00020	0,58675 ± 0,00004	0,49629 ± 0,00004
	UO_2	$Fm-3m$	26,7 ± 0,7	0,54692 ± 0,00003	–	–
	$(Zr,U)O_{2+x}$	$Fm-3m$	1,8 ± 0,4	0,54018 ± 0,00008	–	–
	Zr	$P6_3/mmc$	5,3 ± 0,2	0,32456 ± 0,00004	–	0,52025 ± 0,00012

Выявлено что, повышенное содержание двуокиси циркония снижает процент выхода металлического урана, оставляя почти в два раза большую долю невосстановленного диоксида урана.

ИССЛЕДОВАНИЕ НДС СФЕРИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ ИЗ РЕССОРНОПРУЖИННОЙ СТАЛИ ПОСЛЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

О. Н. Василенко[1]*, *К. Е. Мызнов*[1], *Д. Г. Ксенофонтов*[1], *А. В. Батуева*[1], *И. Д. Карпов*[2], *А. А. Митрофанов*[3], *С. С. Пузырев*[3], *А. И. Елизарьев*[3]

[1]Институт физики металлов имени М. Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[3]АО «ЕВРАЗ НТМК», Нижний Тагил, Россия

*E-mail: vasilenko@imp.uran.ru

Напряженно-деформированное состояние (НДС) изделий, испытывающих ударные нагрузки, является одним из ключевых факторов, определяющих их эксплуатационную пригодность и безопасность. Разработка научно обоснованных методик и средств неразрушающего контроля НДС является актуальным направлением исследований. Целью работы являлось установление потенциальной возможности использования магнитных параметров для контроля НДС участков сферических объектов из рессорно-пружинной стали после термомеханической обработки путем проведения магнитных измерений с помощью структуроскопа с использованием специально разработанного и изготовленного приставного преобразователя. Далее были выполнены исследования распределения остаточных напряжений и деформаций по поверхности объектов методом нейтронной дифракции для подтверждения вышеуказанного возможности.

Дифракция нейтронов представляет собой мощный инструмент для исследования напряжённо-деформированного состояния в объёмных поликристаллических объектах. Метод является неразрушающим и, благодаря высокой проникающей способности тепловых нейтронов в большинстве промышленных сплавов, даёт возможность измерить трёхмерное распределение напряжений в массивных металлических изделиях [1]. Большинство современных нейтронных стресс-дифрактометров позволяют проводить исследования в стальных образцах толщиной до 40 мм [2].

Анализ данных нейтронной стресс-дифрактометрии показал, что распределение радиальных деформаций в исследованном объекте по исследуемой плоскости на глубине 3,5 мм оказалось неоднородным. Присутствуют области с высокими значениями межплоскостных расстояний и участок с низкими значениями. Во всех точках с высокими величинами присутствуют сильные микронапряжения.

Тангенциальные (направленные по касательной к исследуемой плоскости) остаточные напряжения на глубине 3,5 мм оказались сильно сжимающими (от минус 657,97 плюс/минус 46,78) МПа в пяти исследованных точках. Однако, все исследованные пять точек находятся в области с низкими значениями d112, и для формирования более полной картины распределения напряжений рекомендуется провести дополнительные измерения серии точек из области с высокими значениями межплоскостных расстояний d112. Для снижения погрешностей, связанных с большими полуширинами дифракционных пиков в данной области, следует использовать увеличенный пробный объём $3\times3\times3$ мм^3.

Распределение радиальных деформаций по глубине объекта контроля (по крайней мере на глубинах до 15 мм) является сильно неоднородным, отсутствует радиальная симметрия распределения деформаций. На некоторых глубинах обнаруживаются высокие микронапряжения.

Были построены графики зависимостей магнитных характеристик, измеренных на поверхности объекта, от полуширины пика нейтронной дифракции, графики представлены на рисунке 1.

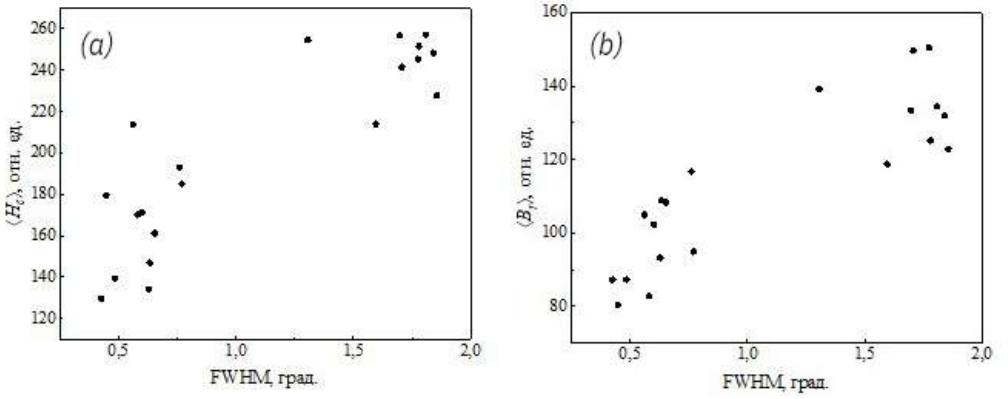

Рис. 1. (*a*) Зависимость коэрцитивной силы от полуширины пика нейтронной дифракции. (*b*) Зависимость остаточной магнитной индукции от полуширины пика нейтронной дифракции.

В ходе анализа полученных результатов было установлено, что с увеличением межплоскостного расстояния коэрцитивная сила и остаточная магнитная индукция падают, а с увеличением полуширины пика – растут, не наблюдается корреляционной зависимости рентгеновских характеристик с максимальной магнитной индукцией и анизотропией всех трёх магнитных характеристик. Таким образом, можно сделать вывод, что с помощью магнитных методов и средств неразрушающего контроля возможно осуществлять контроль НДС.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и договора о выполнении научно-исследовательских работ ИФМ УрО РАН и АО «ЕВРАЗ НТМК» от 30 мая 2024 года № 27/2024.

1. M. T. Hutchings, P. J. Withers, T. M. Holden, T. Lorentzen, Introduction to the Characterization of Residual Stress by Neutron Diffraction, Taylor and Francis, London, (2005).
2. V. Em, I. Karpov, W. Woo, P. Mikula, Metals **14**, 638 (2024).

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАЛЬНЫХ ПЛАСТИНАХ ПОСЛЕ ДРОБЕУДАРНОЙ ОБРАБОТКИ

И. Д. Карпов[1,3]*, *В. Т. Эм*[1,3], *Е. П. Николаева*[2], *И. В. Сергеичев*[3], *Б. С. Волосков*[3]

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск, Россия
[3]Сколковский институт науки и технологий, Центр технологий материалов, Москва, Россия
*E-mail: Karpov_ID@nrcki.ru

В результате дробеударной обработки на поверхности металлической детали образуются остаточные сжимающие напряжения, которые повышают прочность, коррозионную стойкость и стойкость к образованию трещин. Сжимающие напряжения вблизи поверхности должны компенсироваться растягивающими напряжениями на глубине в объёме материала. Надежная количественная информация о напряженно-деформированном состоянии в этих системах необходима для понимания процессов формирования остаточных напряжений в них, оптимизации параметров технологических процессов поверхностной обработки, верификации различных теоретических моделей формирования остаточных напряжений.

В данной работе методом дифракции нейтронов с высоким пространственным разрешением ($\sim$ 0,2 мм) исследованы остаточные напряжения в пластинах из стали 30ХГСА толщиной 5 мм после дробеударной обработки. Показано, что остаточные напряжения образуются не только вблизи обработанной поверхности, а по всей толщине пластины. Зоны сжимающих напряжений образуются вблизи обработанной и необработанной поверхностей пластин, а зона растягивающих напряжений – в средней части. Ширина зон и максимальные значения напряжений зависят от режима обработки. При более интенсивной обработке максимальные сжимающие напряжения и ширина зоны сжимающих напряжений вблизи обработанной поверхности увеличиваются, а вблизи необработанной поверхности уменьшаются.

Проведены нейтронные эксперименты по измерению напряжений вблизи обработанной поверхности пластин с использованием метода $\sin^2\psi$. Результаты согласуются с результатами, полученными стандартным нейтронным методом с измерением трёх главных компонент тензора деформации. Нейтронный метод $\sin^2\psi$ может быть использован для измерения напряжений вблизи поверхности образцов большой толщины, поскольку в отличие от стандартного метода не имеет принципиальных ограничений по толщине образца.

Работа выполнена на оборудовании уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» при поддержке гранта Российского научного фонда №24-19-00484.

Устный доклад

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИН, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ СТАЛИ AISI 316L И AISI 410 МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

М. М. Мурашев, В. Т. Эм, И. Д. Карпов*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: mihail.mmm@inbox.ru

При производстве металлических изделий методом аддитивных технологий (АТ) высокие градиенты температур, а также высокие скорости нагрева и охлаждения могут приводить к появлению различного рода неоднородностей во внутренней структуре изделия, таких как внутренние дефекты (поры, трещины, нарушение геометрии), области с преимущественной ориентацией зерен. Количество пор и включений во многом определяет итоговые механические свойства готового изделия, а области с преимущественной ориентацией зерен (неоднородная текстура) приводит к их анизотропии. Поэтому для обеспечения заданных эксплуатационных характеристик объектов, изготовленных методами АТ, требуется проведение исследований их внутренней структуры.

В данной работе представлены исследования внутренней структуры стальных пластин, изготовленных по технологии прямого лазерного выращивания из стали AISI 316L и AISI 410 методами нейтронной визуализации и дифракции.

Результаты проведенных исследований показывают, что производство изделий методом прямого лазерного выращивания из сталей AISI 316L и AISI 410 при данных режимах печати ведет к появлению сильно выраженной неоднородной текстуры из областей размерами от долей миллиметра до нескольких миллиметров с преимущественной ориентацией зерен, которая может сильно меняться при переходе от одной области к другой. В образце из стали AISI 410 было обнаружено большое количество пор диаметром до 400 мкм, которые локализованы на границе между проходами печати.

Методы нейтронной дифракции и визуализации показали возможность качественного определения неоднородности текстуры в массивных металлических образцах без измерения полюсных фигур и построения функции распределения ориентации. При этом использование метода нейтронной томографии позволяет качественно определить неоднородность текстуры по всему объему образца.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С БОРСОДЕРЖАЩИМ НАПОЛНИТЕЛЕМ ДЛЯ НЕЙТРОННОЙ ЗАЩИТЫ

Ю. О. Четвериков[1]*, *Е. В. Дергачева*[1], *В. В. Тарнавич*[1], *А. В. Кротов*[2], *М. М. Мурашев*[3], *И. В. Смирнов*[4]

[1]НИЦ «КИ» – ПИЯФ, Гатчина Россия
[2]ООО «РАД», Всеволожск, Россия
[3]НИЦ «КИ», Москва, Россия
[4]СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Исследована радиационная стойкость пластиковых композитных материалов с борсодержащим наполнителем 24–25% по массе для печати методом послойного наплавления нитей. Полимерная матрица представляет собой акрилонитрилбутадиенстирольные и полиэтилентерефталат-гликолевые пластики. Введение бора уменьшает глубину проникновения тепловых нейтронов на 56–78% с 3 до 0,65 мм. Образцы композитных и матричных материалов экспонировались на нейтронном плутоний-бериллиевом источнике в течение 130 сут. Механические испытания показали увеличение прочности и пластичности на ∼20% облученного полиэтиленте-рефталатгликоля с аморфным бором. Значительных изменений механических свойств облученных образцов матричных пластиков, как и пластика акрилонитрилбутадиенстирола с нитридом бора, не установлено.

Устный доклад

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МАТЕРИАЛАХ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

В. Т. Эм[1,2]*, *И. Д. Карпов*[1,2], *И. В. Сергеичев*[2]

[1]1Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
[2]2Сколковский институт науки и технологий, Центр технологий материалов, Москва, Россия
*E-mail: em_VT@nrcki.ru

Характерные для аддитивных технологий (АТ) высокие градиенты температур и высокие скорости нагревания и охлаждения приводят к формированию в АТ-материалах больших остаточных напряжений (ОН), которые могут существенно ухудшить прочностные характеристики АТ-изделий и их коррозионную стойкость. Поэтому надежная количественная информация о напряженно-деформированном состоянии в АТ материалах необходима для понимания процессов формирования остаточных напряжений в них, оптимизации параметров технологических процессов их изготовления и пост-производственной термообработки, верификации различных теоретических моделей формирования остаточных напряжений.

Благодаря высокой проникающей способности нейтронов в большинстве промышленных сплавов (~50 мм в стали) нейтрон-дифракционный метод является в настоящее время единственным неразрушающим методом, который позволяет измерить ОН в глубине массивных материалов.

Целью настоящей работы было провести нейтронным методом систематическое исследование ОН в образцах цилиндрической формы и в форме пластин, изготовленных методом селективного лазерного сплавления (СЛС) из аустенитной стали 316L.

На стресс-дифрактометре СТРЕСС реактора ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт» исследовалось распределение напряжений в цилиндрических образцах диаметром от 4 мм до 20 мм и пластинах толщиной от 2 мм до 20 мм. Для выделения пробного объема (ПО) в образцах использовались щели шириной от 0.2 мм до 1 мм. Минимальный ПО при измерении аксиальной компоненты деформации в цилиндрическом образце ⌀4 мм был ~0.1 мм^3 (ПО = 0.3×0.3×1мм^3). При измерении цилиндрических образцов для увеличения количества отражающих зерен в ПО образцы вращались вокруг своей оси. Для уменьшения биений образца при вращении образец с помошью гониометрической головки выставлялся так, чтобы ось вращения совпадала с осью образца.

Измерения показали, что распределение ОН по диаметру в цилиндрических образцах и по толщине в пластинах имеет форму параболы. Вблизи поверхности образцов формируются растягивающие напряжения, которые с высоким градиентом растут при приближении к поверхности. Эти растягивающие напряжения компенсируются сжимающими напряжениями в центральной части образцов.

Эксперименты показали, что распределение напряжений по диаметру в цилиндрических образцах и по толщине в пластинах в относительных единицах, приведенных к диаметру (толщине), не зависит от диаметра (толщины) образца.

Таким образом, для образцов, изготовленных по одной технологии (СЛС) при одинаковых условиях достаточно измерить распределение напряжений для одного размера диаметра (толщины). Распределение напряжений для других размеров можно рассчитать.

Работа выполнена на оборудовании уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» при поддержке гранта Российского научного фонда №24-19-00484.

Секция 10.

Фундаментальные исследования с нейтронами

Приглашенный доклад

ЭФФЕКТ УСКОРЕНИЯ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ НЕЙТРОНОВ ЧЕРЕЗ УСКОРЯЮЩИЙСЯ КРИСТАЛЛ

А. И. Франк[1]*, *В. А. Бушуев*[2], *М. А. Захаров*[1], *Г. В. Кулин*[1]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]2Московский государственный университет, Москва, Россия
*E-mail: frank@jinr.ru

В работах [1, 2] был зарегистрирован эффект, состоящий в изменении энергии нейтронов при их прохождении через преломляющий образец, движущийся с ускорением. Аналогичный эффект для света был ранее предсказан в работе [3]. Качественное объяснение этих двух явлений сводилось к представлению о разностном эффекте Доплера. Поскольку за время распространения волны в образце скорость образца меняется, то величина доплеровских сдвигов частоты при преломлении на входной и выходной поверхностях образца, отличается не только по знаку, но и по абсолютной величине. Такая интерпретация эффекта полностью справедлива в случае преломления нейтронной волны, когда физически значимые явления происходят только на границах образца, но едва ли вполне корректна для света.

В то же время было показано, что исходя только из принципа эквивалентности можно единым образом описать изменение частоты и энергии при прохождении через преломляющий образец как нейтронов, так и света. При этом основным фактором, определяющим величину сдвига частоты при прохождении волны через образец, движущийся с постоянным ускорением, является величина временной задержки , возникающая из-за преломления волны в образце. В результате появилось представление об универсальном оптическом явлении, справедливом для волн любой природы и названном в [1] эффектом ускоряющегося вещества (ЭУВ). Впоследствии было осознано, что представление о связи эффекта только с преломлением является необоснованно узким, а изменение частоты волны неизбежно должно возникать при взаимодействии с любым объектом, движущимся с ускорением [4]. При этом изменение частоты во всех случаях определяется соотношением

$$\Delta\omega = k_0 a\tau, \qquad (1)$$

где k_0 – волновое число падающей волны и a – ускорение.

Временная задержка рассеянной волны по отношению к падающей может возникать по любой причине. В нейтронной оптике возникновение временной задержки, не связанной с обычным преломлением, демонстрировалось в экспериментах, в которых нейтроны проходили через кристалл в условиях, близких к условию Брэгга [5-7]. Из соотношения (1) следует, что в этих условиях приведение образца в ускоренное движение также должно приводить к изменению энергии прошедших через него нейтронов. Для того, чтобы определить величину изменения частоты и энергии, следует только правильно вычислить величину временной задержки, возникающей вследствие отличия групповой скорости нейтрона в кристалле от вакуумного значения.

Такое изменение энергии действительно наблюдалось в эксперименте [8], где нейтроны с энергиями вблизи условия Брэгга проходили через осциллирующий в простран-

стве кристалл кварца. Нами были сделаны приближенные оценки ожидаемой величины эффекта изменения энергия в условиях, близких к условиям этого эксперимента. Для групповой скорости нейтронов [9] было принято значение

$$\mathrm{v} = \frac{\hbar k}{m*} = \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{dF}{d(k_0^2)}\right)^{-1}, \qquad (2)$$

где k – волновое число в среде, характеризующейся законом дисперсии $k = F(k_0^2)$. Дисперсионное соотношение для двух ветвей было найдено из решения уравнения Шредингера в двухволновом приближении.

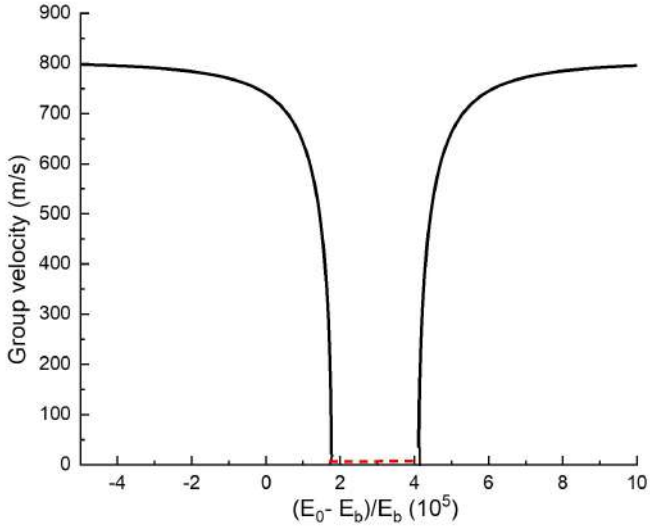

Рис. 1. Групповая скорость нейтрона в кристалле кварца в зависимости от отклонения энергии нейтрона E0 от брэгговского значения Eb. Красная пунктирная линия соответствует области отражения, где проходящая волна отсутствует.

Полученные оценки величины изменения энергии нейтронов в условиях, близких к условиям эксперимента [8], качественно согласуются с результатами последнего. Можно полагать, что этот эксперимент, наряду с результатами работ [1, 2], является еще одной демонстрацией справедливости эффекта ускорения в нейтронно-оптических явлениях.

1. A. I. Frank, P. Geltenbort, M. Jentschel et al. Phys. At. Nucl. **71**, 1656–1674 (2008).
2. A. I. Frank, P. Geltenbort, M. Jentschel et al. JETP Lett. **93**, 361–365 (2011).
3. K. Tanaka, Phys. Rev. A **25**, 385–390 (1982).
4. A. I. Frank. Physics Uspekhi **53**, 500–502 (2020).
5. C. G. Shull, A. Zeilinger, G. L. Squirs et al., Phys. Rev. Letters **44**, 1715–1718 (1980).
6. V. V. Voronin, E. G. Lapin, S. Yu. Semenikhin, et al., JETP Lett. **71**, 76–79 (2000). ,
7. V. V. Voronin, Y. V. Borisov, A. V. Ivanyuta et al. JETP Lett. **96**, 609–612 (2013).
8. V. V. Voronin, Y. A. Berdnikov, A. Y. Berdnikov et al. JETP Lett. **100**, 497–502, (2014).
9. A. I. Frank. Physics Uspekhi **61** (9) 900–901 (2018).

Устный доклад

О ЗАКОНЕ ДИСПЕРСИИ В ВЕЩЕСТВЕ, ДВИЖУЩЕМСЯ С УСКОРЕНИЕМ

М. А. Захаров

Объединённый институт ядреных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: zakharovmax@jinr.ru

Потенциальный закон дисперсии медленных нейтронов в веществе известен уже более 80 лет [1]. Он описывается соотношением:

$$k^2 = k_0^2 - 4\pi\rho b, \tag{1}$$

здесь k – волновое число в среде, k_0 – волновое число падающих нейтронов, ρ – атомарная плотность вещества, b – длина когерентного рассеяния ядрами вещества. Такой закон дисперсии эквивалентен наличию внутри среды потенциала:

$$U = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho b. \tag{2}$$

Вместе с тем изначально было ясно, что построенная теория должна иметь область применимости и поправки. Поправки к теории дисперсии связаны в первую очередь с учётом многократного рассеяния нейтронной волны в веществе [2]. Подробный анализ этой проблемы приведён в работах [3, 4]. Носов и Франк обратились к проблеме применимости теории дисперсии [5, 6]. В работах авторы показали, что при уменьшении длины волны падающих нейтронов меньше некоторой, амплитуда суммарной рассеянной волны приобретает неконтролируемый рост и выходит за пределы применимости Борновского приближения.

Весьма интересен вопрос видоизменения известного закона дисперсии для вещества в экзотических условиях. Например, в случае, когда среда движется с ускорением. Здесь известны два явления, которые должны влиять на взаимодействие нейтронов с ускоряющимся веществом. В работе [7] предсказывается существование интерференционных эффектов, связанных с неинерциальностью системы. Второе явление связано непосредственно с однократным рассеянием на отдельном ядре и называется эффектом ускорения.

Эффект заключается в изменении энергии и импульса частицы при взаимодействии с объектом, движущимся с ускорением

$$\Delta E \sim \hbar k a \tau, \tag{3}$$

здесь k – волновое число, – ускорение объекта, τ – время взаимодействия частицы с объектом.

Эффект наблюдался при прохождении нейтронов через ускоряющийся преломляющий образец в эксперименте [8]. Результаты эксперимента достаточно хорошо совпадают с теоретическими оценками, однако оценки основаны на предположении о справедливости теории дисперсии в случае ускоренного вещества, что не является очевидным. Одновременно с этим результаты работ [10, 11] позволяют предположить, что изменение энергии частицы должно иметь место уже при однократном рассеянии на ускоренном ядре.

В связи с вышесказанным расчёт поправок к закону дисперсии нейтронов на случай ускоренного движения вещества и анализ возможности их экспериментального наблюдения становится актуальным.

Доклад посвящён обсуждению проблемы взаимодействия медленных нейтронов с веществом, движущимся с ускорением. Рассматривается возможная трансформация

известного закона дисперсии нейтронов из-за влияния эффекта ускорения. В докладе представлены последние результаты теоретического исследования проблемы рассеяния нейтронной волны на атомном ядре, движущемся с ускорением.

Рассматривается нерелятивистский случай в неинерциальной системе координат покоя ядра. Волновая функция рассеянного состояния представляется в виде решения интегрального уравнения Липпмана-Швингера в первом Борновском приближении:

$$\Psi(\vec{r},t)=\int_{-\infty}^{t}\int_{0}^{+\infty}U(\vec{r}')\Psi(\vec{r}',t)G(\vec{r}',t;\vec{r},t)d\vec{r}'t'. \tag{4}$$

Здесь в качестве потенциала U выбран псевдо-потенциал Ферми:

$$U(\vec{r}')=b\frac{2\pi\hbar^2}{m}\delta(\vec{r}'-\vec{r}_0). \tag{5}$$

Вместо волновой функции в рамках Борновского приближения взята падающая плоская волна в неинерциальной системе отсчёта:

$$\Psi(z',t')=e^{-\frac{i}{\hbar}mat'z'-\frac{i}{\hbar}\frac{ma^2t'^3}{6}}e^{ikzik\frac{at'^2}{2}-ik\omega t'}. \tag{6}$$

Функция Грина рассматриваемой задачи выглядит следующим образом:

$$G(\vec{r},t;\vec{r}',t')=-\theta(t-t')(t-t')^{(}-3/2)\sqrt{\frac{1}{2\pi i}\frac{m^3}{\hbar^5}}e^{i\frac{m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2+(y-y')^2+\left(z-z'-\frac{a}{2}(t^2-t'^2)\right)^2}{t-t'}}. \tag{7}$$

В предположении малости ускорения ядра, на промежутке времени, когда скоростью ядра по сравнению со скоростью налетающего нейтрона можно пренебречь, для области в окрестности ядра, достаточно малом, чтобы фиктивные силы неинерциальной системы координат незначительно влияли на волновую функцию, вычисление интеграла (4) становится возможным. Итоговая волновая функция расеянного состояния представляется следующим выражением:

$$\Psi(x,y,z,t)=-e^{ik\left(z_0+\frac{at^2}{2}\right)-i\omega t}\left(1+\frac{5}{4}\frac{maR}{\hbar^2k^2/2m}\right)^{-1/2}\frac{b}{R}e^{ikR+i\frac{1}{4}\frac{maR}{\hbar^2k^2/2m}kR}. \tag{8}$$

Здесь

$$R=\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-at^2/2-z_0)^2}, \tag{9}$$

Выражение (8) допускает ясную интерпретацию. Волновая функция имеет вид сферической волны с искажённым волновым фронтом, в амплитуде и фазе волнового состояния имеются квантовые поправки, связанные с неинерциальностью системы.

1. L. Foldy, Phys. Rev. **67**, 107 (1945).
2. M. Lax, Rev. Mod. Phys. **85**, 287 (1952).
3. V. F. Sears, Physics Reports **82**, 1 (1982).
4. M. Warner, J. E. Gubernatis, Phys. Rev. B **32**, 6347 (1985).
5. A. I. Frank and V. G. Nosov, Phys. Atom. Nucl. **58**, 402 (1995).
6. V. G. Nosov, A. I. Frank, Phys. Rev. A **55**, 1129 (1997).
7. А. И. Франк, Письма в ЖЭТФ **100**, 696 (2014).
8. A. I. Frank, P. Geltenbort, M. Jentschel,et al. Phys. of At. Nuc. **71**, 1656 (2008).
9. A. I. Frank, Phys. Part. Nuclei **47**, 647–666 (2016).
10. A. I. Frank, Physics-Uspeckhi **63**, 500–502 (2020).
11. M. A. Zakharov, G. V. Kulin and A. I.Frank, Eur. Phys. J. D **75**, 47 (2021).

Устный доклад

ВЫБОР НЕЙТРОНООПТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРИ ОПИСАНИИ МНОГОКРАТНОГО МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ С УЧЕТОМ ПСЕВДОМАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия
*E-mail: lvov@itep.ru

Для получения информации о внутренней структуре конденсированных сред на надатомном масштабе широко используется метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) [1]. Наличие у нейтрона спина при рассеянии на ядрах, также обладающих ненулевым спином, приводит к наличию слагаемого в выражении для потенциала сильного взаимодействия, зависящего от взаимного направления спинов нейтрона и ядра (псевдомагнитное взаимодействие). Для получения поляризованных мишеней используется метод динамической поляризации, что дает возможность варьирования контраста при проведении экспериментов по малоугловому рассеянию поляризованных нейтронов и существенно увеличивает разрешающую способность метода МУРН. В настоящее время метод динамической поляризации ядер в однократном малоугловом рассеянии нейтронов активном используется и развивается [2].

В работе [3] был проведен анализ многократного малоуглового рассеяния нейтронов с учетом псевдомагнитного взаимодействия. При этом амплитуда рассеяния вычислялась в приближении эйконала

$$f(\boldsymbol{q}) = \frac{p_0}{2\pi i}\int d^2\rho[S(\boldsymbol{\rho})-1]\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho}), \tag{1}$$

$$S(\boldsymbol{q}) = \exp\left(-i\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dz}{\mathrm{v}}V(\boldsymbol{r})\right),\ \ \boldsymbol{r}=(\boldsymbol{\rho},z) \tag{2}$$

Здесь начальный импульс нейтрона $\boldsymbol{p}_0=(0,0,p_0)$, v – его скорость, $\boldsymbol{\rho}$ – прицельный параметр, $\boldsymbol{q}$ – импульс рассеяния, $\boldsymbol{q}\boldsymbol{p}_0=0$ и $q\ll p_0$.

Потенциал Ферми взаимодействия нейтронов со средой

$$V(\boldsymbol{r}) = V_q(\boldsymbol{r}) = V_s(\boldsymbol{r}) = \sum_R n_R\sum_x \theta(\boldsymbol{x}\in V_R)\frac{2\pi}{m}\delta_\varepsilon(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})(b_x^0+b_x^1\boldsymbol{S}_x\boldsymbol{I}), \tag{3}$$

где V_q – не зависящая от спинов нейтрона и ядра часть взаимодействия, рассмотренная выше, V_s – псевдомагнитное ядерное взаимодействие, n_R – числа заполнения, $\boldsymbol{S}_x$ – оператор спина ядра, расположенного в узле $\boldsymbol{x}$, который находится внутри рассеивателя объемом V_R, $\boldsymbol{I}$ – оператор спина нейтрона. Обычно потенциал Ферми используется при вычислении амплитуды рассеяния в борновском приближении, в этом случае в качестве $\delta_\varepsilon(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})$ берется дельта-функция Дирака. Однако при применении эйконального приближения это очевидно приведет к расходимости в выражении (2). Поэтому можно использовать «размытую» дельта-функцию, которую можно выбрать, например, в форме $\delta_\varepsilon(\boldsymbol{r}) = (2\pi\varepsilon^2)^{-3/2}\exp(-r^2/(2\varepsilon^2))$, причем радиус ε потенциала Ферми ядра удовлетворяет условиям $|f|<\varepsilon<\lambda\!\!\!^{-}$, где f – амплитуда рассеяния нейтрона на ядре, $\lambda\!\!\!^{-}=\lambda/2\pi$, λ – длина волны нейтрона. При таком выборе потенциала расходимости исчезают, но конечный результат зависит от радиуса ε.

В работе [4] на основе системы уравнений многократного рассеяния было показано, что для рассеяния нейтронов в твердых телах вычисление волновой функции может быть проведено в приближении эйконала, но примененном не к истинному ядерному потенциалу и не к квазипотенциалу Ферми, а к среднему потенциалу. В данной работе мы упрощаем вывод из [4] и обобщаем его на псевдомагнитное взаимодействие.

Ищем решение уравнения Шредингера

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s})\right)\psi(\boldsymbol{r},\sigma) = E\psi(\boldsymbol{r},\sigma), \quad U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}) = \frac{2\pi}{m}\sum\nolimits_{\boldsymbol{R}}(b_0 + b_1\boldsymbol{S_R I})\delta_\varepsilon(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) \tag{4}$$

для задачи рассеяния при условии $E > U$. Выберем начальное состояние в виде

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\sigma) = e^{ikz}\xi_0(\sigma) \tag{5}$$

и положим, как и в обычном построении эйконального приближения

$$\psi(\boldsymbol{r},\sigma) = e^{ikz}\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma)).$$

Имеем

$$\frac{1}{m}\left(kp_z + \frac{p^2}{2}\right)\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma) = -U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s})\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma). \tag{6}$$

Видим, что, как и в обычном эйконале, $\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma)$ является гораздо более медленной функцией координат, чем e^{ikz} т.к. существенная длина ее изменения $l \sim \frac{k}{mU} = \frac{k^2}{mu} \gg \lambda\!\!\!^{-}$. Поэтому уравнение (6) можно усреднить по $\boldsymbol{r}$ на масштабе l_{no}, таком, что $l \gg l_{no} \gg \lambda\!\!\!^{-}$ При этом в главном порядке, остается уравнение с усредненным (нейтронооптическим) потенциалом:

$$\frac{1}{m}\left(kp_z + \frac{p^2}{2}\right)\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma) = -U_{no}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s})\psi_1(\boldsymbol{r},\sigma). \tag{7}$$

Усредняющую функцию естественно выбрать так, что она заполняет всю элементарную ячейку Ω_R, связанную с узлом решетки $\boldsymbol{R}$. При этом внутри образца

$$U_{no}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}) = \frac{2\pi b_0}{m\Omega} + \frac{2\pi b}{m\Omega}\sum_R \theta(\boldsymbol{r}\in\Omega_{\boldsymbol{R}})\boldsymbol{S_R I}. \tag{8}$$

Формула (8) обобщает нейтронооптический потенциал на псевдомагнитное взаимодействие. Далее можно непосредственно перейти к вычислению интенсивности многократного МУРН в эйкональном приближении с потенциалом $U_{no}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s})$.

Работа выполнена в рамках финансирования государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. L. A. Feigin, D. I. Svergun, Structure Analysis by Small-Angle X-Ray and Neutron Scattering (Springer, 1987). С. В. Вонсовский, Магнетизм, Наука, Москва, (1971).
2. Y. Noda, S. Koizumi, T. Maeda, T. Inada and A. Ishihara, J. Appl. Cryst. **56**, 1015 (2023).
3. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, XI Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии – ЛаПлаз-2025»: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2025, С. 390
4. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, Нейтронные исследования конденсированных сред. Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 188 с.

Устный доклад

СТАТУС УСТАНОВКИ FISCO НА РЕАКТОРЕ ПИК

Н. М. Ольхович, А. М. Тягельская, А. С. Воробьев, О. А. Щербаков*

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: olhovich_nm@pnpi.nrcki.ru

В настоящее время в НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ создаётся установка FISCO (FISsion COrrelation) для многопараметрических исследований процесса деления тяжёлых ядер под действием тепловых нейтронов, когда в каждом акте деления одновременно регистрируются легкий и тяжелый осколки, длиннопробежные частицы, нейтроны и гамма-кванты деления. Анализ полученных на установке данных позволит получить информацию о всевозможных корреляциях вторичного излучения в зависимости от массы, заряда и энергии осколка.

Установка будет размещена на выведенном пучке H7-2 реактора ПИК. Основными узлами установки являются: детектор осколков деления (ионизационная камера деления), многосекционный детектор нейтронов и γ-квантов деления (сцинтилляционные детекторы) и детектор множественности нейтронов деления (БЖСД – большой жидкостный сцинтилляционный детектор). Моделирование установки выполняется по методу Монте-Карло с использованием программного комплекса GEANT4.

Устный доклад

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НА НЕЙТРОННОМ ВРЕМЯПРОЛЁТНОМ СПЕКТРОМЕТРЕ ГНЕЙС

А. М. Тягельскаян, Н. М. Ольхович, А. С. Воробьев, О. А. Щербаков*

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: tiagelskaia_am@pnpi.nrcki.ru

Синхроциклотрон ПИЯФ с энергией протонов 1 ГэВ был запущен в 1969 году. В 1975 году начали действовать созданные на базе ускорителя нейтронный источник испарительного (spallation) типа и времяпролётный спектрометр ГНЕЙС. Начиная с этого времени, ГНЕЙС эффективно используется для изучения взаимодействия нейтронов с атомными ядрами в интервале энергии нейтронов 0,1 эВ – 500 МэВ.

В данном докладе приведено краткое описание нейтронного источника и времяпролётного спектрометра ГНЕЙС. Основные параметры установки ГНЕЙС даны в сравнении с аналогичными установками мирового уровня. Экспериментальные возможности ГНЕЙСа продемонстрированы с помощью примеров некоторых выполненных ранее экспериментов в области ядерной физики и прикладных исследований. В настоящее время на спектрометре ГНЕЙС проводится цикл исследований процесса деления, включающий в себя измерения сечений деления тяжёлых ядер и анизотропии осколков деления.

Устный доклад

УСТАНОВКА «БЕТА-РАСПАД НЕЙТРОНА» ДЛЯ РК ПИК

А. П. Серебров, А. К. Фомин, О. М. Жеребцов, Г. Н. Клюшников, А. О. Коптюхов, В. А. Лямкин, А. Н. Мурашкин, Д. В. Прудников*

1НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: serebrov_ap@pnpi.nrcki.ru

Нейтронный приборный комплекс «Бета-распад нейтрона» будет расположен на пучке поляризованных холодных нейтронов на канале ГЭК-3 Н0. Установка предназначена для измерения электронной, нейтринной и электрон-нейтринной асимметрий бета-распада нейтрона. Необходимость эксперимента обусловлена тем, что результаты последних наиболее точных экспериментальных данных распада нейтрона, проведённые на уровне точности 10^3 не могут быть описаны в рамках Стандартной модели. Основу установки составляет сверхпроводящий соленоид, создающий магнитное поле в однородной области 0.35 Тл. Электроны и протоны, образующиеся при распаде нейтрона, движутся в магнитном поле вдоль магнитных силовых линий. Для выбора заданного угла вылета электронов используется эффект магнитного зеркала за счет создания области с более сильным магнитным полем с величиной индукции 0.88 Тл. Область распада выделяется по протонами, которые будут дополнительно ускорены электрическим полем. Для этого используется электростатическая система, позволяющая поднять напряжение в области распада до 30 кВ. Для регистрации электронов и протонов используются детекторы на входе и выходе нейтронного пучка.

Стендовые доклады

Стендовый доклад

ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ НА УСТАНОВКАХ ЦКП ИЯИ РАН

С. Н. Аксенов, Д. Н. Трунов, Р. А. Садыков, А. Г. Гаврилюк, В. Н. Марин*

Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк, Россия

*E-mail: axenov@inr.ru

В Институте ядерных исследований РАН функционирует Центр коллективного пользования «Ускорительный центр нейтронных исследований структуры вещества и ядерной медицины». В состав комплекса входит Импульсный источник нейтронов, изотопный комплекс и комплекс протонной терапии на базе линейного ускорителя протонов ИЯИ РАН - единственный научный комплекс данного типа в России и Евро-Азиатском регионе. На базе нейтронного комплекса функционирует ряд установок, позволяющих проводить дифракционные, рефлектометрические и малоугловые нейтронные исследования. В их числе доступны устройства окружения образца, такие как криостаты и камеры высокого давления типа поршень-цилиндр.

Помимо нейтронных методов, в ЦКП (центр коллективного пользования) представлено оборудование для комплементарных исследований наноструктур и наноматериалов, в том числе сверхпроводников. Это включает методы на основе оптических, рентгеновских, магнитных, электрических измерений, а также исследования с использованием эффекта Мёссбауэра. Часть экспериментов может проводиться в условиях криогенных температур. Особого внимания заслуживает комплекс для подготовки образцов к измерениям при сверхвысоких давлениях (до 300 ГПа) с использованием камер на основе алмазных наковален — технология, недоступная в других ЦКП.

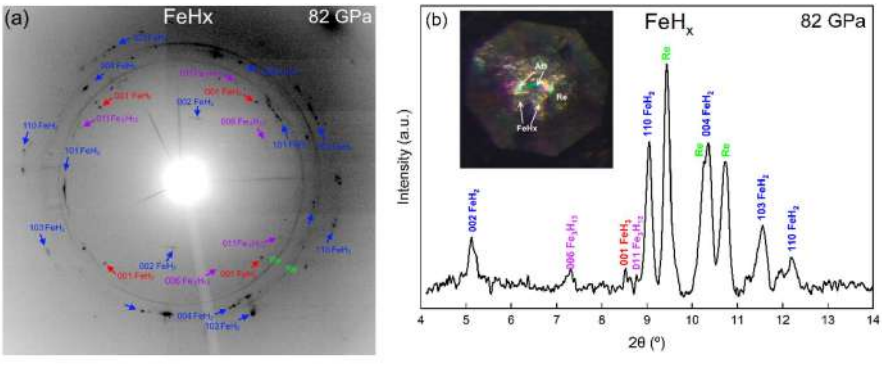

Рис. 1. (*a*) – Двумерная дифрактограмма гидридов железа при давлении 82 ГПа; (*b*) – проинтегрированная одномерная дифрактограмма. Во врезке показана фотография образца FeH_x, синтезированного в системе Fe – NH_3BH_3 в камере высокого давления с Re-гаскетой. Рефлексы индентифицированных фаз FeH_2, FeH_3 и Fe_3H_{13} подписаны синим, красным и фиолетовым цветами соответственно [1].

В работе представлено доступное оборудование, используемое при исследованиях при высоком давлении и ряд исследований, проводимых с его помощью.

1. А. Г. Гаврилюк, И. А. Троян, В. В. Стружкин, и др., Письма в ЖЭТФ **118**, 735–747 (2023).

Стендовый доклад

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ УСТАНОВОК ПРИБОРНОЙ БАЗЫ РЕАКТОРНОГО КОМПЛЕКСА ПИК (ПБ РК ПИК) СИЛАМИ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ» – ПИЯФ

Е. В. Алтынбаев[1,2]*, *С. С. Мохова*[1], *В. А. Соловей*[1], *В. В. Воронин*[1,2]

[1]НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: altynbaev_ev@pnpi.nrcki.ru

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – один из ведущих научных центров России, играющий ключевую роль в развитии научной инфраструктуры и создании уникальных экспериментальных установок. Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова (ПИЯФ), входящий в состав НИЦ «Курчатовский институт», представляет собой важнейший научно-технологический комплекс, специализирующийся на фундаментальных и прикладных исследованиях в области ядерной физики, нейтронной физики, физики элементарных частиц, материаловедения и радиационной биологии. П роизводственный и кадровый потенциал института позволяет создавать уникальное научное оборудование для исследовательских станций:

- нейтронные суперзеркальные поляризующие элементы;
- нейтроноводные тракты различной геометрии;
- оптические элементы с нейтрон-отражающими наноструктурированными покрытиями;
- устройства монохроматизации нейтронных потоков;
- флипперы и компоненты магнитных систем;
- источники холодных нейтронов на основе водорода и дейтерия;
- детекторы нейтронов (линейные газоразрядные позиционно-чувствительные, многопроволочные пропорциональные камеры, сцинтилляционные счётчики) на основе изотопов ^{3}He и ^{6}Li;
- детекторные системы научно-исследовательских станций различного исполнения;
- мониторы и ловушки нейтронного пучка;
- специализированную регистрирующую электронику, обеспечивающая обработку сигналов, и соответствующее программное обеспечение.

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ обладает наработками, позволяющими изготовить как компоненты научно-исследовательских станций, так и научно-исследовательские станции под ключ, реализовать необходимый объем работ и отработать технологии производства комплектующих. В настоящий момент разработанные силами сотрудников института технологические заделы активно внедряются в производственные процессы, тем самым осуществляя разработку и поставку наукоемкой продукции для удовлетворения потребностей ПБ РК ПИК.

Реализация вышеперечисленных научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ обеспечивает технологический суверенитет России в области технологий рассеяния нейтронов для изучения конденсированного состояния вещества.

Стендовый доклад

THE EFFECTS OF HIGH PRESSURE ON THE CRYSTAL STRUCTURE AND VIBRATION SPECTRA OF MAGNETOPLUMBITE $PbFe_{12}O_{19}$

A. G. Asadov[1,2]*, *R. Z. Mehdiyeva*[2], *D. P. Kozlenko*[1], *A. I. Mammadov*[2], *E. V. Lukin*[1], *S. E. Kichanov*[1]

[1]Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia
[2]Institute of Physics, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan
*E-mail: asifasadov@jinr.r

The response of magnetoplumbite ($PbFe_{12}O_{19}$ or related hexaferrites) to high-pressure conditions is critical for understanding its structural resilience and functional adaptability in extreme environments. This study investigates the pressure-induced crystal structure evolution, lattice distortions, and possible phase transitions of magnetoplumbite using synchrotron X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy calculations. High-pressure experiments reveal anisotropic compression behavior, with notable distortions in the FeO_6 octahedra and PbO_{12} polyhedra that govern the magnetoplumbite lattice [1]. A gradual reduction in unit cell volume is observed, accompanied by a shift in Fe–O bond lengths and angles, indicating pressure-driven distortion of the hexagonal close-packed framework [2]. Above a critical pressure thres- hold (∼20 GPa), a reconstructive phase transition occurs, destabilizing the magnetoplumbite structure in favor of a high-pressure polymorph with modified magnetic properties. These findings highlight the interplay between structural integrity and external pressure [3], providing key insights for designing hexaferrite-based materials for high-pressure applications, such as magnetic sensors and data storage devices.

1. K. Scheunemann, Hk. Müller-Buschbaum, Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry **37** 2261–2263 (1975) (https://doi.org/)10.1016/0022-1902(75)80723-8
2. A. G. Asadov, D. P. Kozlenko, A. Mammadov, et al., Physica B: Condensed Matter **655** 414753 (2023) (https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.414753)
3. H. Man, A. Ghasemi, M. Adnani, et al., Material Science (2022) (https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.06758

НЕЙТРОННАЯ СТРЕСС-ДИФРАКТОМЕТРИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЦИРКОНИЕВЫХ КАНАЛАХ СУЗ РБМК

Я. А. Белоусов[1,2], *Г. О. Александров*[1,2], *В. И. Пастухов*[3], *С. А. Аверин*[3], *В. А. Цыгвинцев*[3], *С. В. Соловьева*[3], *И. Д. Карпов*[4], *В. Т. Эм*[4], *А. Ф. Губкин*[1,2,3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2]2Институт естественных наук и математики, УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
[3]АО «Институт реакторных материалов», г. Заречный, Россия
[4]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: agubkin@imp.uran.ru

В качестве конструкционного материала активных зон атомных реакторов часто применяются циркониевые сплавы. Причиной этого является малое сечение их взаимодействия с тепловыми нейтронами, а также высокая устойчивость физико-химических свойств при их использовании в условиях облучения высокими потоками нейтронов, высоких температур и агрессивных сред. Тем не менее, циркониевые сплавы подвержены замедленному гидридному растрескиванию, связанному с образованием гидридных фаз, блистеров и преципитатов [1].

В данной работе проведено нейтрон-дифракционное и рентгеновское исследование остаточных напряжений в циркониевом фрагменте канала СУЗ реактора РБМК в области вокруг сварного шва (см. рис. 1) с целью выяснения роли макроскопических напряжений (1го рода) в развитии процессов замедленного гидридного растрескивания.

Нейтрон-дифракционный эксперимент выполнялся на дифрактометре СТРЕСС, установленном на горизонтальном экспериментальном канале исследовательского реактора ИР-8, НИЦ КИ. Рентгеновский эксперимент выполнялся на дифрактометре Bruker D8 Advance на экспериментальной площадке АО «ИРМ».

Экспериментальные данные, полученные с помощью нейтронной стресс-дифракции (Рисунок 2), показывают, что в зоне термического воздействия на расстоянии ~15 мм от края сварного шва осевая и кольцевая компоненты остаточных напряжений демонстрируют аномальное поведение с высоким градиентом напряжений и сменой знака. Именно в этой области наиболее активно происходит концентрация водорода и активизируется процесс замедленного гидридного растрескивания [2]. Подобное поведение хорошо согласуется с известным из литературы механизмом диффузии водорода в области растягивающих напряжений. Полученный результат демонстрирует, что остаточные напряжения, образующиеся в зоне термического воздействия при сваривании циркониевой трубы и ниппеля, могут играть значительную роль в развитии замедленного гидридного растрескивания в процессе эксплуатации. Вместе с тем, отметим, что результаты сканирования остаточных напряжений по линии 1 и линии 2, смещенными на величину углового расстояния 900 существенно различаются. Это свидетельствует о неоднородном распределении остаточных напряжений по окружности трубы вследствие особенностей технологического процесса сварки. Тем не менее, отметим, что аномальное поведение остаточных напряжений на расстоянии ~15мм от края шва наблюдается в обоих случаях.

Работа выполнена в рамках Госзадания Минобрнауки РФ для ИФМ УрО РАН.

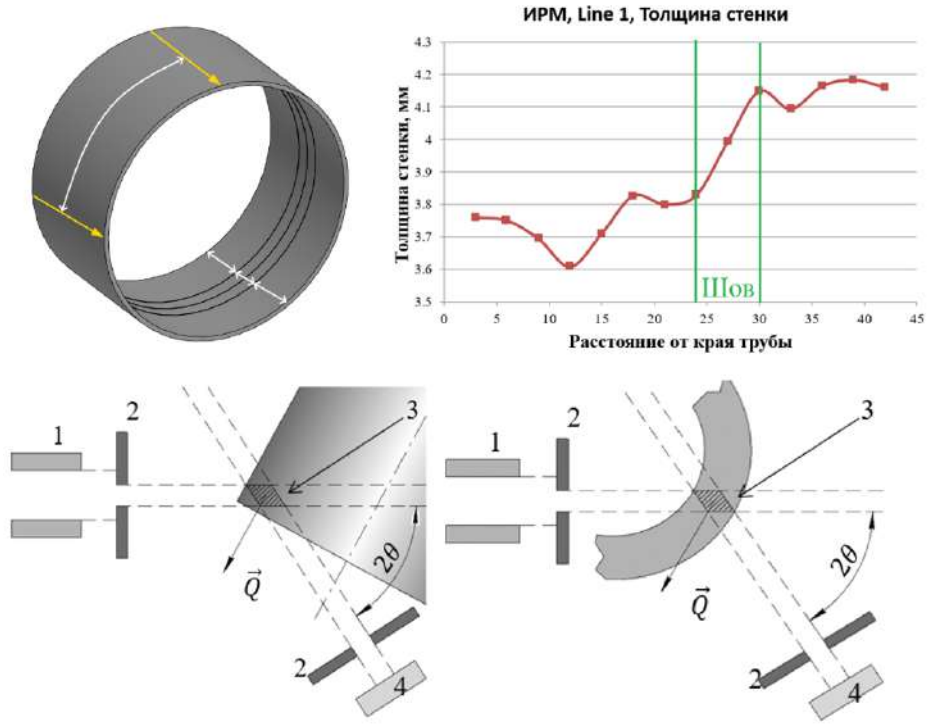

Рис. 1. Общий вид образца с указанием двух направлений сканирования (желтые линии), результат измерения толщины стенки трубы вдоль направления сканирования, размещение образца на стресс-дифрактометре при измерении осевой и кольцевой компонент напряжения.

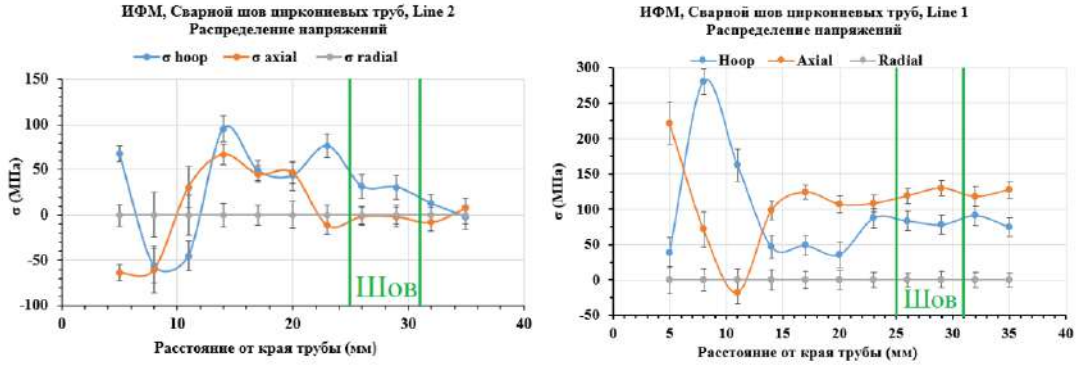

Рис. 2. Сравнение результатов сканирования остаточных напряжений по двум линиям вдоль оси трубы.

1. M. P. Puls, The Effect of Hydrogen and Hydrides on the Integrity of Zirconium Alloy Components: Delayed Hydride Cracking, Springer Verlag, London, 2012.
2. С. А. Аверин, В. А. Цыгвинцев, М. В. Евсеев, и др., ВАНТ **5**(96), 49 (2018).

Стендовый доклад

ОБРАБОТКА ДАННЫХ ВРЕМЯПРОЛЕТНОГО ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ПО МАЛОУГЛОВОМУ РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ

Р. Д. Борисов[1,2]*, *Л. А. Азарова*

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург, Россия
[2]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: st095754@student.spbu.ru

Малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) — неразрушающий дифракционный метод, основанный на упругом рассеяние нейтронов на неоднородностях образцы (1–1000 нм), превышающих длину волны излучения. Данный метод позволяет проводить анализ структурных характеристик материалов на нанометровом масштабе, включая определение размеров, морфологии и межчастичных взаимодействий в системах нанообъектов, молекулярных ансамблей, кластерных систем и пр. [1].

Актуальность метода стимулирует развитие математического моделирования МУРН экспериментов, являющимся ключевым инструментом по разработке и оптимизации исследовательских установок. Существует два способа проведения МУРН эксперимента: монохроматический и времяпролетный. Использование широкого спектра во времяпролетном МУРН позволяет заметно увеличить доступный диапазон переданных импульсов, но также сильно усложняет обработку экспериментальных данных: появляется дополнительная степень свободы (по сравнению с монохроматическим МУРН) – длина волны нейтрона, определяемая по времени его пролета от системы прерывателей до детектора, за счет использования импульсной структуры пучка.

Доклад посвящен разработке и оптимизации методов обработки времяпролетных данных численных экспериментов. моделируемых в программе McStas. Основной целью работы является создание алгоритма для обработки экспериментальных данных и построение кривых рассеяния с минимальными потерями точности. Реализация алгоритма выполнена на языке программирования Python. В качестве виртуального образца использовалась модель монодисперсного раствора твердых сфер радиусов порядка 100 – 1000 ангстрем. Для формирование импульсной структуры была использована конфигурация типа «слепая пара» [2] системы прерывателей модели МУРН установки.

В ходе работы были решены следующие задачи:

- генерация времяпролётных данных в формате, соответствующем реальным экспериментальным данным;
- определение длин волн нейтронов по времени их регистрации;
- азимутальное усреднения картины рассеяния на детекторе и учёт спектрального распределения нейтронов;
- усреднение кривой рассеяния с учётом разрешений по длине волны и переданному импульсу.

Результаты работы включают алгоритм обработки времяпролетных данных численного эксперимента в McStas, обеспечивающий построение кривых рассеяния с наименьшей погрешностью.

1. W. Schmatz et al., Journal of Applied Crystallography **7**, 2, 96–116 (1974).
2. A. A. Van Well, H. Fredrikze, Physica B: Condensed Matter, **357**, 1–2, 204–207 (2005).

Стендовый доклад

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ХРАНЕНИИ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ В ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ НАД МАГНИТНЫМ ЗЕРКАЛОМ

В. А. Васильева, М. А. Захаров*

Объединённый институт ядреных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: vava.21@uni-dubna.ru

Гравитационное взаимодействие - единственное из четырех известных типов взаимодействия, которое не имеет строгого квантового описания в рамках Стандартной модели. Экспериментальное изучение влияния гравитации в квантовых системах чрезвычайно затруднено слабостью гравитационного взаимодействия по сравнению с остальными силами. Ультрахолодные нейтроны (УХН) являются одной из наиболее удобных частиц для исследования гравитации в квантовой области, поскольку не обладают электрическим зарядом, а их квантово-оптические свойства проявляются достаточно ярко из-за большой длины волны.

При хранении нейтронов на зеркале в гравитационном поле их вертикальное движение квантуется, а энергетический спектр состояния принимает дискретный вид. Впервые о явлении квантования энергии нейтронов в гравитационном поле говорится в работе Франка и Лущикова [1]. Квантовые состояния нейтрона с дискретным энергетическим спектром в гравитационном поле вблизи поверхности называют гравитационными уровнями. Существование гравитационных уровней для нейтрона было продемонстрировано в экспериментах Несвижевского [2]. Дальнейшее развитие направление исследование гравитационных уровней нейтронов получило в работах научной группы Хартмута Абеля [3, 4], в котором изучались переходы между гравитационными уровнями, вызванными периодическим нестационарным внешним воздействием на квантовую систему. В указанных выше работах нейтроны хранились на материальном зеркале, однако существует идея альтернативного подхода, в котором вместо материального зеркала предлагается использовать магнитное зеркало Владимирского [5, 6], когда нейтрон «левитирует» в магнитном поле (рис. 1). Хранение нейтронов над магнитным зеркалом возможно благодаря наличию у нейтрона магнитного момента. Преимуществом данного подхода является возможность управлять параметрами квантовой системы путём изменения параметром магнитного поля зеркала.

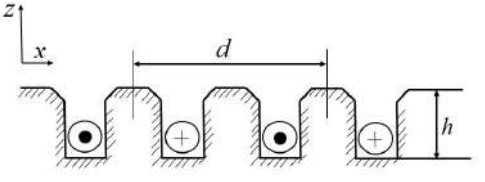

Рис. 1. Плоское магнитное зеркало. Периодическая структура из проводников с током [6].

Доклад посвящен результатам работы по развитию направления исследования нестационарных квантовых эффектов при хранении УХН в гравитационном поле над магнитным зеркалом. Была решена квантовая задача о переходах нейтронов между гравитационными уровнями в системе гравитационного и магнитного полей в присутствии внешнего нестационарного периодического воздействия.

Движение нейтронов в системе из гравитационного поля и магнитного поля, создаваемого зеркалом Владимирского, описывается нестационарным уравнением Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(z,t)}{\partial t} = (H_0 + H')\psi(z,t). \quad (1)$$

Стационарная часть гамильтониана $_0$ имеет вид:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + mgz + \mu B \exp\left(-\frac{2\pi}{d}z\right), \quad (2)$$

здесь m – масса нейтрона, μ – магнитный момент нейтрона.

Нестационарная часть гамильтониана H' описывает внешнее воздействие на квантовую систему, вызывающую переходы нейтронов между уровнями. В качестве внешнего воздействия было рассмотрено такое изменение параметров магнитного поля, что периодически изменяет положение потенциальной ямы в пространстве.

Уравнение (1) решалось в рамках теории нестационарных возмущений, в которой волновая функция нейтронов представлялась в виде суммы состояний гравитационных уровней стационарной системы (2) с зависящими от времени амплитудами.

$$\psi(z,t) = \sum_n a_n(t)\psi_n(z,t) = \sum_n a_n\psi_n(z)\exp(-\omega_n t). \quad (3)$$

Здесь частоты ω_n соответствуют энергиям n-го уровня.

Волновые функции ψ_n стационарных состояний для гамильтониана (2) достаточно сложно вычислить аналитически, однако возможно так подобрать параметры магнитного зеркала, чтобы для первых нескольких уровней стало применимо приближение гармонического осциллятора. В качестве начального состояния была взята нейтронная волна нулевого гравитационного уровня.

В результате расчётов была получена эволюция волновой функции с течением времени (рис. 2*a*). Была оценена интенсивность волны первых гравитационных уровней в конечный момент времени внешнего воздействия в зависимости от частоты возмущения (рис. 2*b*). Провал в интенсивности соответствует резонансной частоте переходов между энергетическими уровнями.

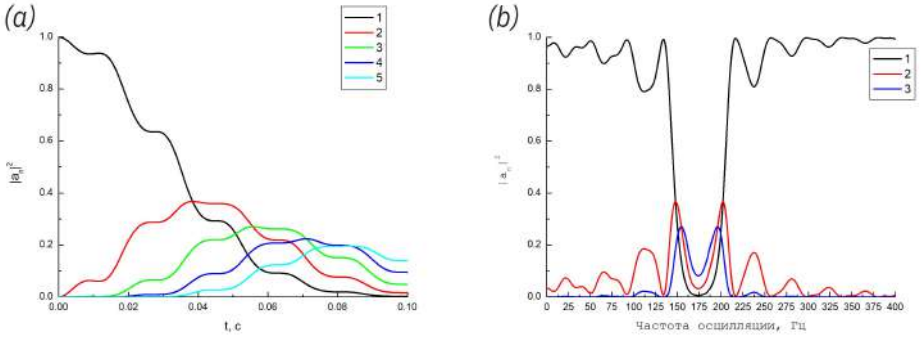

Рис. 2. (*a*) – Зависимость интенсивности состояний гравитационных уровней от времени для резонансной частоты возмущений. (*b*) – Зависимость интенсивности состояний гравитационных уровней в конечный момент времени от частоты возмущений.

1. V. Luschikov, A. Frank, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **28**, 607 (1978).
2. V. Nesvizhevsky et al., Nature **415**, 297 (2002).
3. G. Cronenberg et al., Nature Physics **14**, 1022 (2018).
4. M. Suda et al.,. Z. Naturforsch **77**, 875 (2022).
5. A. I. Frank, V. G. Nosov, JETP Letters **79**, 313 (2004).
6. В. В. Владимирский, ЖЭТФ **39**, 1062 (1960).

Стендовый доклад

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ЛЕГИРОВАННЫХ И НЕЛЕГИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ BiOX И $BiOXO_3$ (X = Br, I) ДЛЯ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ ВОДЫ

И. Г. Генов[1,2]*, *Д. П. Козленко*[1], *О. Ю. Пономарева*[1], *И. И. Виноградов*[1], *А. Н. Нечаев*[1], *Т. Н. Вершинина*[1,3], *О. Н. Лис*[1], *А. В. Руткаускас*[1], *А. В. Данина*[1], *Е. А. Корнеева*[1], *М. Н. Мирзайев*[1,4,5]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Институт по электрохимии и энергетических систем им. Акад. Евгеня Будевского- Болгарская академия наук, София, Болгария
[3]Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
[4]Институт радиационных проблем Министерства науки и образования Азербайджанской Республики, Баку, Азербайджан
[5]Университет Хазар, Баку, Азербайджан
*E-mail: genov@jinr.ru

Фотокаталитические полупроводники могут расщеплять органические загрязнители до нетоксичных малых молекул посредством фотоиндуцированных реакций окисления и безвредны для окружающей среды. Многофункциональными полупроводниками, которые используются в качестве фотокатализаторов являются оксиды металлов. У них гибкая запрещенная зона, которую можно адаптировать под конкретные приложения. Ее энергию можно сузить путем легирования как катионами, так и анионами. Легирование является эффективным методом настройки запрещенной зоны оксидов металлов. В результате фотокатализаторы имеют более высокое поглощение видимого света по сравнению с чистым оксидом металла.

BiOX и $BiOXO_3$ были идентифицированы как материалы с полупроводниковыми свойствами, подходящими для фотокатализа, с шириной запрещенной зоны ~3,3 эВ. Они являются подходящими фотокатализаторами как для расщепления воды, так и для фотокаталитического разложения органических загрязнителей. Добавление различных галогенных элементах повышает их фотокаталитическую активность. Галогенные элементы могут играть важную роль в улучшении фотокатализа путем изменения структуры и морфологии BiOX и $BiOXO_3$.

Целью нашей работы является повышение эффективности фотокатализатора из BiOX и $BiOXO_3$.

Таким образом все фотокатализаторы были изготовлены, охарактеризованы и испытаны для определения влияния галогенных элементов в сторону улучшения фотокаталитических характеристик путем деградации красителя RhB.

Стендовый доклад

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НАНОЧАСТИЦАМИ СИЛИКАТ-ГИДРАТА КАЛЬЦИЯ

А. М. Гурьянов[1]*, *С. А. Гурьянов*[2]

[1]Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
[2]Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия
*E-mail: gurjanovam@mail.ru

При гидратации цементного раствора образуются наночастицы силикат-гидрата кальция (C–S–H). Распределение по форме и размерам наночастиц C–S–H влияет на прочность, долговечность, водостойкость, морозостойкость, коррозионную стойкость, и другие свойства цементного камня. Важными факторами являются также соотношение свободной и связанной воды, наличие пор. Все это относится к структурным параметрам материала на микро- и наноуровне.

В данной работе с помощью метода малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) проведено исследование in situ формирования структуры на наноуровне образцов гидратированного портландцемента [1,2]. Время экспозиции образцов составляло 28 дней.

Спектры интенсивностей МУРН образцов гидратированного портландцемента были измерены в Петербургском институте ядерной физики (г. Гатчина) на дифрактометре «Мембрана-2». Диапазон регистрируемых упругих переданных нейтронных импульсов q находился в пределах от 0,03 нм$^{-1}$ до 0,8 нм$^{-1}$. Рассеянные образцами нейтроны регистрировались в интервале углов $\pm$0,017 рад.

Для реализации метода контраста затворение портландцемента проводилось как обычной (H_2O), так и тяжелой (D_2O) водой.

Для всех образцов наблюдалась степенная зависимость интенсивности рассеяния от переданного нейтронного импульса q. При выполнении условия qR >1 (режим Порода) для интенсивностей малоуглового рассеяния имеет место степенная зависимость от переданного нейтронного импульса. Отклонение показателя степени n от асимптотики Порода (n = 4) указывает на фрактальные свойства рассеивающих объектов и позволяет определить их фрактальную размерность. В случае объемных или массовых фракталов показатель степени совпадает с фрактальной размерностью $n = D_V$ и принимает значение из интервала $1 < D_V < 3$. В случае рассеяния объектами, имеющими фрактальную поверхность, фрактальная размерность $D_S = 6n$ и принимает значение из интервала $2 < D_S < 3$. Соответственно показатель степени находится в интервале $3 < n < 4$. Таким образом, по наклону прямолинейных участков зависимостей МУРН, построенных в двойном логарифмическом масштабе, определялась принадлежность рассеивающих объектов к определенному типу фрактала (объемному или поверхностному), а также величина фрактальной размерности.

Применение метода контраста позволило определить изменение соотношения свободной и связанной воды в процессе гидратации портландцемента.

1. A. M. Guryanov, Proc. Engin. **111**, 283–289 (2015).
2. A. M. Guryanov, Proc. Engin. **153**, 217–222 (2016).

Стендовый доклад

ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИАНИЛИНОМ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА PRUSSIAN WHITE НА ЕГО СВОЙСТВА

М. Е. Донец, Р. Н. Васин, С. В. Сумников, О. Ю. Пономарева, Е. А. Корнеева, Е. В. Андреев, Н. Ю. Самойлова*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: mdonets@jinr.ru

В последние годы натрий-ионные аккумуляторы (SIB) привлекают большое внимание из-за высокого спроса на ресурсы для крупномасштабных приложений [1, 2]. Натрий является одним из самых распространенных элементов в земной коре и близок по своим свойствам к литию.

Prussian Blue (PB) и его аналоги, такие как Prussian White (PW), представляют большой интерес являясь катодными материалами для натрий-ионных источников тока [3–5]. Гексацианоферрат натрия PW — коммерчески доступный катодный материал для натрий-ионных аккумуляторов. Однако структура гексацианоферрата содержит воду, и электрохимические характеристики PW сильно зависят от уровня дегидратации материала. Более того, электроды PW показывают быстрое снижение емкости, что связано с межфазными химическими реакциями, которые можно было бы подавить, нанеся на активный материал защитное покрытие.

В данной работе было исследовано влияние покрытия материала PW слоем полианилина (PANI) на его структуру, фазовые переходы и электрохимические характеристики, в том числе и после термической обработки электродов.

Материал PW@PANI демонстрирует разрядную емкость 89,1 мАч $г^{-1}$ при 85 мА $г^{-1}$ с сохранением емкости 78,4% в течение 500 циклов, в то время как электрод PW@PANI, подвергнутый предварительной сушке при 140°C, показывает стабильную емкость до $\approx$ 97 мАч $г^{-1}$ в течение первых 200 циклов при 85 мА $г^{-1}$. Однако, сохранение его емкости в течение 500 циклов ниже по сравнению с невысушенным электродом PW@PANI. Сушка электродов PW@PANI при 180°C приводит к быстрому снижению емкости. Впервые проведено сравнительное исследование порошка PW, пропитанного раствором кислоты HCl, используемого при синтезе PW@PANI, но без нанесения слоя PANI. Этот материал демонстрирует электрохимические характеристики, сравнимые с PW@PANI, что, таким образом, затрудняет определение истинного вклада покрытия PANI в отмеченную в литературе более высокую электрохимическую стабильность модифицированного материала по сравнению с исходным PW.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00261).

1. T. Liu [et al.] Environ. Sci. **12**, 1512–1533 (2019).
2. H. Zhang [et al.] Adv. Energy Mater. **13**, 2300149 (2023).
3. X.-Y. Fu [et al.] Rare Met. **44**(1), 34–59 (2024).
4. Y. Bai [et al.] Eur. J. Inorg. Chem. **26**, e202300246 (2023).
5. W.-J. Li [et al.] Small **15**, 1900470 (2019).

Стендовый доклад

РАССЕЯНИЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ ОТ 2D ПЕРИОДИЧЕСКИХ И ФИБОНАЧЧИ ГЕТЕРОСТРУКТУР

В. Д. Жакетов[1,2]*, *Д. А. Норов*[3], *А. Н. Черников*[1]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Московский физико-технический институт, Москва, Россия
[3]Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
*E-mail: zhaketovvd@nf.jinr.ru

Низкоразмерные магнитные и сверхпроводящие гетероструктуры демонстрируют сложные явления из-за конкурирующих параметров порядка. В то время как периодические системы сверхпроводник/ферромагнетик (S/F) хорошо изучены, квазипериодические структуры остаются менее изученными. Основываясь на предыдущих работах по поляризованной нейтронной рефлектометрии (PNR) [1-4], это исследование изучает более сложные слоистые архитектуры и новые свойства в квазипериодических системах. Предварительные результаты по квазипериодическим структурам демонстрируют осуществимость их создания и характеризации с помощью PNR. Эта работа демонстрирует возможности PNR в изучении сложных взаимодействий S/F и открывает новые направления для исследования магнитных и сверхпроводящих явлений в квазипериодических гетероструктурах. Дальнейшие исследования будут сосредоточены на детальном анализе магнитного упорядочения и сверхпроводящих корреляций в системах с низкой симметрией.

В работе [5] описывается наблюдение сверхпроводящего перехода в объемном квазикристалле Al–Zn–Mg при температуре $T_C < 0.05$ К («фрактальная» сверхпроводимость). Говоря о магнитном поведении в ряде квазикристаллов, наблюдалось состояние спинового стекла, но в работе [6] показано, что в квазикристаллах Au–Ga–Gd и Au–Ga–Tb возможен «экзотический» дальний магнитный порядок. Исследования сложных сверхпроводящих и магнитных явлений, для которых характерны сверхнизкие температуры фазовых переходов, требуют создание новых низкотемпературных систем. Разрабатывается рефрижератор растворения с несимметричным векторным криомагнитом на основе ВТСП, криостат с откачкой ^{4}He с высокооднородным магнитным полем, создаваемым магнитом с теплыми катушками.

1. Yu.V. Nikitenko et al., Physics of Particles and Nuclei **53**, 6, 1089–1125 (2022).
2. D. I. Devyaterikov et al., Journal of Surface Investigation **16**, 5, 839–842 (2022).
3. Yu.N. Khaydukov, Phys. Rev. B **99**, 140503(R) (2019).
4. V. D. Zhaketov et al., Physics of the Solid State **65**, 7 (2023).
5. K. Kamiya et al., Nature Communications, 9:154 (2018).
6. R. Tamura et al., J. Am. Chem. Soc. **143**, 19938–19944 (2021).

Стендовый доклад

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ФАЗ В $Fe_{75}Ga_{12.5}Ge_{12.5}$ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР: НЕЙТРОННОЕ ДИФРАКЦИОННОЕ IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ

А. С. Захарова[1]*, *Т. Н. Вершинина*[1], *С. В. Сумников*[1], *А. М. Балагуров*[1], *И. С. Головин*[2], *Дж. Хао*[3], *Х. Лю*[3], *Л. Хе*[3]

[1]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
[2]Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
[3]Spallation Neutron Source Science Center, Дунгуань, Китай
*E-mail: zakharova.anna.nano@gmail.com

В настоящей работе проведено исследование эволюции фазового состава сплава $Fe_{75}Ga_{12.5}Ge_{12.5}$ в условиях непрерывного нагрева до 1000°C и последующего охлаждения при скорости изменения температуры ±2°C/мин. Измерения нейтронных дифракционных спектров проведены на дифрактометре общего назначения GPPD, действующего на импульсном источнике CSNS (Китай). Для набора *insitu* данных использовались 90°-детекторы с $\Delta d/d \approx 0.006$, индивидуальные спектры регистрировались каждые 5 мин.

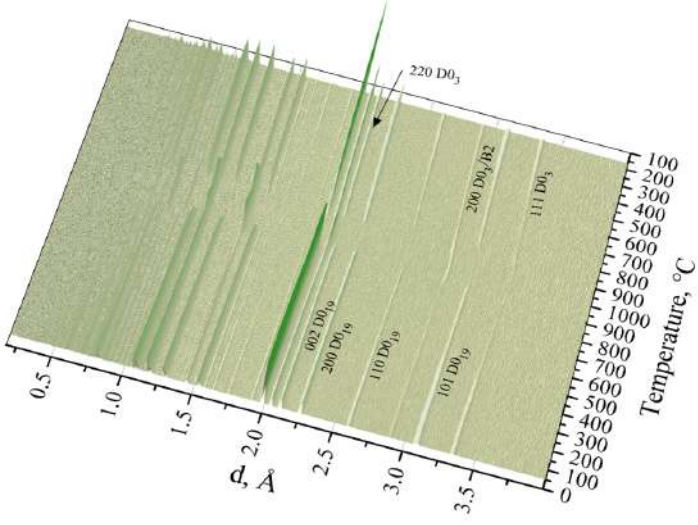

Рис. 1. 3D карта температурной эволюции дифракционных спектров.

В исходном литом состоянии сплав $Fe_{75}Ga_{12.5}Ge_{12.5}$ содержит две структурные фазы с упорядочением по типу $D0_3$ и $D0_{19}$ (рис. 2*a*). Известно, что, фазовый состав сплава $Fe_{75}Ge_{25}$ в исходном литом состоянии является смесью Fe_3Ge ($D0_{19}$) и $B8_2$ [1], а $Fe_{75}Ga_{25}$ находится в однофазном $D0_3$ состоянии [2]. Таким образом, фазовый состав сплава $Fe_{75}Ga_{12.5}Ge_{12.5}$ представляет собой промежуточный вариант между фазовыми составами крайних состояний, соответствующих бинарным составами $Fe_{75}Ge_{25}$ и $Fe_{75}Ga_{25}$.

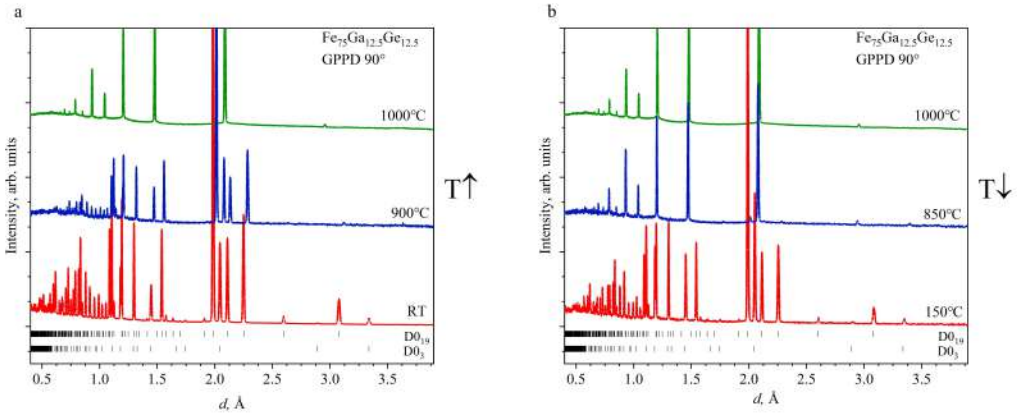

Рис. 2. Отдельные дифрактограммы, измеренные при нагреве (*a*) и охлаждении (*b*) для нескольких фиксированных температур. Штрихами обозначены положения пиков фаз при комнатной температуре (*a*) и при температуре 150°C (*b*).

Из 3D-карты эволюции дифракционных спектров (рис. 1) можно видеть, что в процессе нагрева по достижении 950°C имеет место переход $D0_3 \rightarrow B_2$, о чем свидетельствует исчезновение соответствующих сверхструктурных рефлексов. Также при этой температуре полностью исчезает фаза $D0_{19}$.

При охлаждении сверхструктурный пик (111) фазы $D0_3$ появляется при необычно высокой температуре ($\approx$ 900°C), что соответствует обратному переходу $B_2 \rightarrow D0_3$. При $\approx$ 870°C появляется основной рефлекс (200) фазы $D0_{19}$, малоинтенсивные сверхструктурные пики (110), (101) этой фазы становятся хорошо различимы при температуре 850°C. При дальнейшем охлаждении до 150°C двухфазное состояние $D0_3$ + $D0_{19}$ сохраняется, но изменения интегральных интенсивностей пиков свидетельствуют о росте объемной доли $D0_3$ по сравнению с исходным литым состоянием (рис. 2*b*).

Дальнейшая обработка дифракционных спектров позволит получить информацию о температурном поведении параметров элементарных ячеек структурных фаз, их объемных долей и возможной модификации микроструктуры сплава.

1. A. M. Balagurov et.al., Phys. Rev. Mater. **7**, 603 (2023)
2. I. S. Golovin et al., J. All. Comp. **675**, 393 (2016).

Стендовый доклад

МАШИННО-ОБУЧАЕМЫЕ МЕЖАТОМНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ КООРДИНАЦИОННО-ОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

П. П. Кобчикова

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: polinakob@jinr.ru

Машинно-обучаемые межатомные потенциалы (MLIP, Machine-Learned Interatomic Potentials) становятся всё более востребованными в задачах молекулярного моделирования, особенно когда речь идёт о структурно сложных и электронно неоднородных системах. В частности, системы, находящиеся на границе между координационной и органической химией — такие как комплексы фенантролина меди и индольные соединения, близкие по структуре к триптанам, — представляют собой важный класс объектов для применения MLIP. Их изучение актуально не только с фундаментальной точки зрения, но и в контексте биофизики, где подобные структуры используются как модельные системы для изучения молекулярного узнавания, координационной селективности и динамики связей в условиях, приближённых к биологическим средам.

Координационные комплексы с переходными металлами, включающие азотсодержащие лиганды (например, производные фенантролина), могут моделировать активные центры металлопротеинов или вмешиваться в их функции. Индольные производные, включая структуры, близкие к триптанам, демонстрируют структурную гибкость и способность к специфическому связыванию с биомолекулами, что делает их важными модельными системами при изучении взаимодействий «молекула–мишень» и конформационной адаптивности. Тонкая настройка геометрии и электронных свойств в этих системах определяет их биологическую активность, а значит, требует точных инструментов для их теоретического описания.

Классические межатомные потенциалы не способны адекватно описывать сложные проявления координации, изменения валентных состояний, делокализацию заряда и специфические слабые взаимодействия, критичные для биологически значимых состояний. В таких условиях MLIP, основанные на нейросетевых или графовых архитектурах (например, SchNet, NequIP, MACE), обучаются на высокоточных квантовохимических данных и демонстрируют способность воспроизводить потенциальную энергию и её производные с точностью, сопоставимой с методами *abinitio* [1].

Однако реализация MLIP в биофизически значимых координационных системах сопряжена с рядом методических вызовов. Необходимо учитывать широкий спектр возможных координационных состояний, чувствительность к окружению (включая водную среду и ионы), конформационную гибкость, множественность функциональных групп и сложную топологию молекул. Формирование репрезентативных обучающих выборок и обеспечение переноса моделей между системами разной природы остаются открытыми задачами [2]. Кроме того, важна интерпретируемость моделей — возможность сопоставления выходов MLIP с химически значимыми параметрами.

Таким образом, применение MLIP к системам типа фенантролин меди и триптаноподобных структур отвечает актуальному биофизическому запросу на точные и масштабируемые модели, способные описывать молекулы с гибкой структурой и богатой электронной природой в условиях, приближённых к биологическим.

1. J. Qi, T. W. Ko, B. C. Wood, T. A. Pham, S. P. Ong, npj Comput. Mater. **10**, 57 (2024).
2. M. Kulichenko, B. Nebgen, N. Lubbers et al., Chem. Rev. **124**, 13681 (2024).

СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ ТРЕХМЕРНЫХ МАССИВОВ ДАННЫХ СИНХРОТРОННОЙ И НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

Е. С. Коваленко, К. М. Подурец, М. М. Мурашев, П. В. Гурьева, А. А. Пойда*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: kovalenko_es@nrcki.ru

При исследовании методом компьютерной томографии внутреннего строения объектов, состоящих из нескольких разнородных частей, может возникнуть необходимость применения различных типов проникающего излучения (например, синхротронного излучения и тепловых нейтронов), имеющих разную природу взаимодействия с веществом. Такой подход оказывается полезным при изучении объектов, составленных из веществ, сильно различающихся по ослаблению разных типов проникающего излучения, что часто характерно для геологических, палеонтологических и объектов культурного наследия.

В работе рассмотрен метод совмещения трехмерных массивов данных томографической реконструкции, полученных в различных экспериментальных условиях. Метод основан на возможности определения координат четырех опорных точек, расположенных внутри или на поверхности объекта исследования без применения искусственных контрастных меток, что актуально при исследованиях образцов, механическое или химическое воздействие на которые недопустимо. Приводятся примеры совмещения результатов нейтронных и синхротронных томографических экспериментов, выполненных при исследовании объектов культурного наследия. Точность совмещения зависит от точности определения координат опорных точек, которая в данной работе составила 2–3 воксела.

Работа выполнена с использованием оборудования уникальных научных установок «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» и «Курчатовский специализированный источник синхротронного излучения («КИСИ-Курчатов»)» при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета грантов в форме субсидий № 075-15-2025-451 от 30.05.2025.

Стендовый доклад

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ СЧИТЫВАНИЯ И СБОРА ДАННЫХ ДЛЯ ПОЗИЦИОННО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ДЕТЕКТОРОВ НЕЙТРОНОВ С РЕЗИСТИВНОЙ НИТЬЮ

А. А. Богдзель, В. И. Боднарчук, А. А. Козляковская, Е. И. Литвиненко, В. М. Милков*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
*E-mail: nasta94@jinr.ru

Проведение исследований конденсированных сред на современном уровне характеризуется постоянным совершенствованием методики измерений, ростом числа управляемых и контролируемых параметров, увеличением количества и усложнением используемых в эксперименте детекторов и систем окружения образца, повышением требований к точности и быстродействию регистрирующей аппаратуры, и требует постоянного развития спектрометров реактора ИБР-2.

В рамках подготовки к запуску на реакторе 8-ми канального позиционно-чувствительного детектора на основе ^{3}He трубок с резистивной нитью была разработана система считывания и сбора данных. В качестве системы сбора и накопления был использован диджитайзер с открытой ПЛИС DT5560SE, что позволило реализовать и провести сравнение различных методов обработки детекторных сигналов. Для системы сбора и накопления данных был выполнен подбор оптимальных параметров для различных методов обработки сигналов. Представлены результаты тестовых измерений системы детектирования с источником нейтронов ^{252}Cf.

Данная работа выполняется в рамки проектов/подпроектов 04-4-1149-3-2021/2028, «Научно-методические исследования и разработки для изучения конденсированных сред на нейтронных пучках ИБР-2» и 04-4-1149-3-3-2024/2028, «Разработка и развитие элементов инфраструктуры спектрометров на реакторе ИБР- 2».

РЕНТГЕН- И НЕЙТРОН-ДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ИЗОТОПНО МОДИФИЦИРОВАННОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

М. Е. Комшина[1]*, *К. Ф. Шумовская*[1], *А. Ф. Губкин*[2], *М. А. Сёмкин*[2], *М. В. Суханов*[1], *О. Ю. Трошин*[1], *А. Д. Буланов*[1]

[1]Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН, Нижний Новгород, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*E-mail: m.komshina@yandex.ru

Получение и исследование свойств моноизотопных элементов в форме простых веществ и их соединений с высокой изотопной и химической чистотой, являются активно развивающимся научным направлением химии и материаловедения. Изотопы кремния ^{28}Si, ^{29}Si, ^{30}Si уже нашли применение для уточнения числа Авогадро и создания прототипов квантовых компьютеров. В литературе указывается на зависимость оптических свойств диоксида кремния от его изотопного состава: уменьшение показателя преломления и снижение оптических потерь. Однако информация о получении и свойствах образцов изотопологов SiO_2 в литературе отсутствует, а имеющиеся расчетные модели дают довольно спорные результаты. Целью работы является изучение особенностей кристаллических структур диоксида кремния различного номинального состава по изотопам кремния $^{28}SiO_2$ и $^{28}Si_{0.5}{}^{30}Si_{0.5}O_2$.

Гидротермальным методом в реакторе высокого давления получены высокочистые поликристаллические образцы низкотемпературной модификации диоксида кремния (α-кварц) с различным изотопным составом $^{28}SiO_2$ и $^{28}Si_{0.5}$ (содержание основных изотопов кремния от 99,3 ат.% до 99,99 ат.%). Прецизионные рентгенографические измерения образцов выполнены с применением порошкового дифрактометра Tongda TD-3700 (геометрия съемки на отражение, матричный детектор HPC 1D Mythen) с источником Cu $K_{\alpha 1,2}$-излучения в диапазоне углов рассеяния (2Θ) от 10,00° до 85,00° и шагом 0,02°. Функция разрешения рентгеновского дифрактометра уточнена с применением стандартного образца Si (SRM 640d).

Нейтронографические измерения образцов диоксида кремния выполнены на дифрактометре высокого разрешения Д-7а (аттестованное значение длины волны монохроматизированного пучка нейтронов λ = (0,1529 ± 0,0003) нм) в Отделе работ на атомном реакторе Института физики металлов УрО РАН, смонтированного на горизонтальном экспериментальном канале ГЭК-7 исследовательского водо-водяного ядерного реактора ИВВ-2М (г. Заречный, Свердловская область). Накопленная статистика двух повторных измерений составляла 290000 имп. на точку в диапазоне углов от 10,0° до 115,0° и шагом 0,1°. Обработка дифракционных данных выполнена с помощью полнопрофильного анализа по методу Ритвельда в пакете программ Fullprof Suite. Для визуализации моделей кристаллических структур использовалась программа VESTA. Для анализа разрешенных симметрией решетки структурных искажений SiO_2 использовался программный пакет ISODISTORT.

На рисунке 1 показаны экспериментальная и расчетная рентгено- и нейтронограмма образца $^{28}SiO_2$. Из рисунка видно, что отсутствие форм-факторной зависимости в рассеянии нейтронов и принципиально иной механизм взаимодействия нейтронов с веществом приводят к существенному перераспределению интенсивностей Брэгговских пиков по сравнению с данными рентгеновской дифракции и, в частности, к росту интенсивности пиков в области больших переданных импульсов.

В качестве базовой модели для уточнения кристаллической структуры исследуемых образцов была выбрана тригональная структура природной смеси изотопов (прототип α-кварц, SiO_2) с пространственной группой $P3_121$ (№ 152, гексагональная установка), параметры элементарной ячейки a = 0,4910 нм; c = 0,5400 нм. В данной структуре ионы Si^{4+} занимают частную позицию 3a: (x/a, 0, 1/3), с координатой x/a = 0,5302;

ионы O^{2-} расположены в позиции общего типа – 6c: (x/a, y/b, z/c), где x/a = 0,4151; y/b = 0,1476; z/c = 0,1194 [1]. При частичном замещении в исследуемых образцах изотопа ^{28}Si на ^{30}Si наблюдается ряд деформационных смещений атомов и изменений длин связей ближайшего окружения на фоне увеличения объёма элементарной ячейки от 0,11318 нм^3 до 0,11326 нм^3.

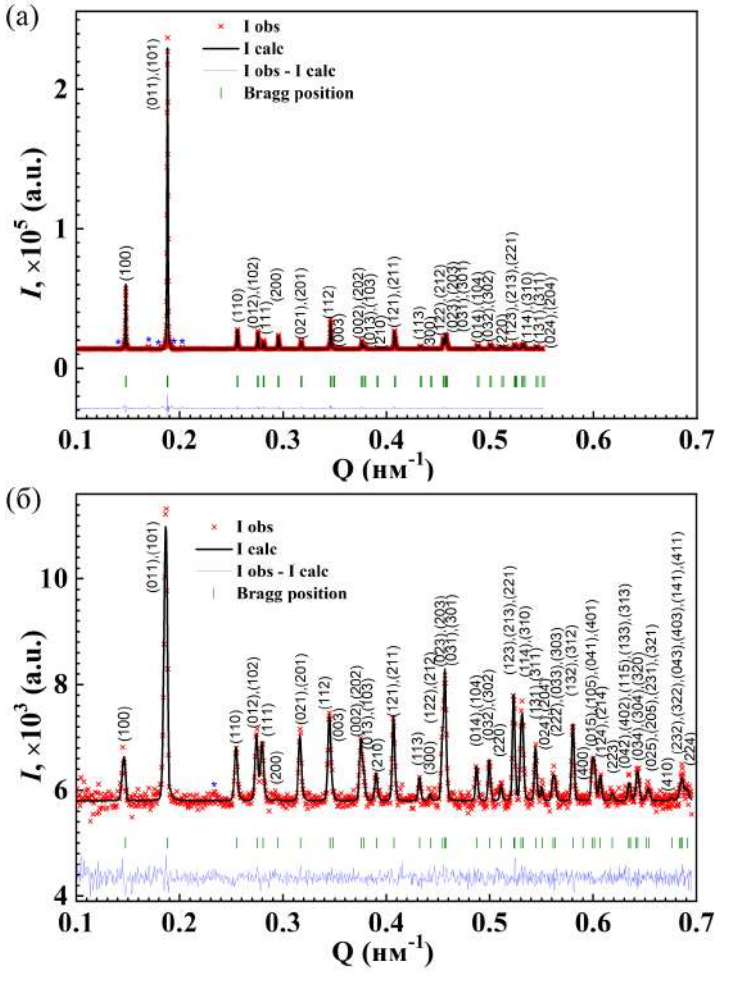

Рис. 1. Результаты уточнения по методу Ритвельда рентгено- (*а*) и нейтронограммы (*б*) образца $^{28}SiO_2$: красные точки – эксперимент, черная линия – модельный профиль, синяя линия – разностная кривая между экспериментальным и модельным профилями, зеленые метки указывают на позиции брэгговских пиков основной фазы, в круглых скобках обозначены (*hkl*) индексы рефлексов, звездочками отмечены дополнительные рефлексы.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и ИХВВ РАН (FFSR-2025-0003).

1. A. P. Dindune, Z. A. Konstant, G. V. Ozolin'sh, et al., Inor. Mater. **7**, 1476 (1971).

Стендовый доклад

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ОБЛУЧЕННЫХ ОБРАЗЦАХ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ТИПА Х16-Н19: НЕЙТРОН-ДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

Б. В. Краснояров[1], *М. А. Сёмкин*[1,2], *И. А. Портных*[3], *В. Л. Панченко*[3], *В. И. Пастухов*[3], *В. И. Воронин*[2], *А. Ф. Губкин*[1,2,3]*

[1]Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева, УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]АО «Институт реакторных материалов» ГК Росатом, г. Заречный, Россия
*E-mail: agubkin@imp.uran.ru

Аустенитные нержавеющие стали являются наиболее предпочтительным материалом оболочек ТВЭЛ реакторов на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем из-за их высокой прочности и вязкости при умеренных температурах, превосходной совместимости с натрием и высокой коррозионной стойкости. Основным фактором, ограничивающим длительность работы ТВЭЛов, фактором является радиационное распухание оболочек из аустенитной стали [1].

Для повышения эффективности реакторов на быстрых нейтронах планируется увеличение срока эксплуатации ТВЭЛов до достижения выгорания топлива более 15% т. а. (тяжелых атомов) и, соответственно, повреждающей дозы не менее 140 сна. Для решения этой задачи необходимо знание механизмов, определяющих эволюцию структурно-фазового состояния материала при облучении в диапазоне температур и доз, характерных для быстрых реакторов. Более того, для прогнозирования ресурса эксплуатации изделий из оболочечных материалов при помощи современных расчетных кодов необходимы т.н. реперные точки без которых невозможна валидация работы каких-бы то ни было алгоритмов. Это ставит перед экспериментаторами задачу аккуратной количественной оценки фазового состава и (микро)структурных параметров материала при различных значениях повреждающей дозы и температурах облучения.

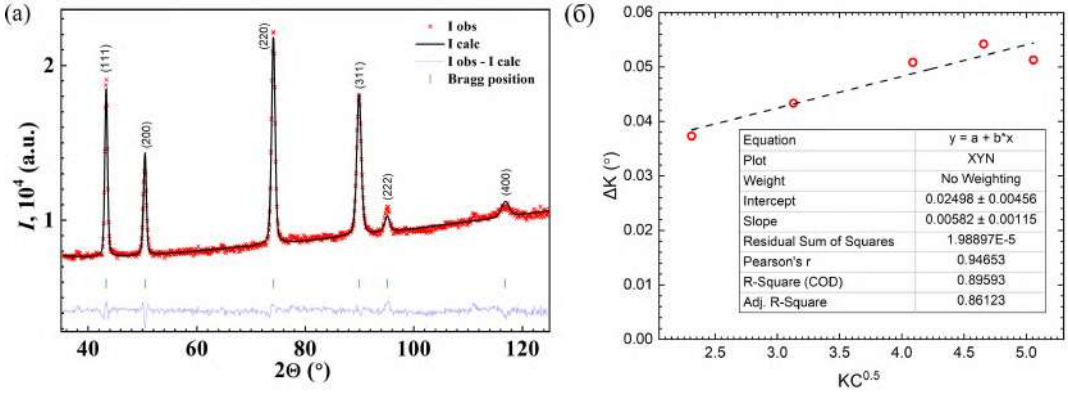

Рис. 1. (*а*) Нейтронограмма образца стали Х16-Н19 с повреждающей дозой 5 сна, облученного при температуре 370 °С. (*б*) Линейная аппроксимация зависимости уширения дифракционных пиков Δ*K* от параметра зависимости от параметра $KC^{0.5}$ [2].

В данной работе нейтронная дифракция высокого разрешения использовалась для оценки структурных и микроструктурных параметров серии образцов аустенитной ста-

ли типа Х16-Н19, облученных до различных значений повреждающей дозы в интервале от 5 до 99 сна при различных температурах. В качестве основного метода анализа использовались обычный и модифицированный методы Уильямсона-Холла [2].

В качестве примера на рис. 1 приведена нейтронограмма образца стали Х16-Н19 с повреждающей дозой 5 сна, облученного при температуре 370 °С и линейная аппроксимация зависимости уширения дифракционных пиков ΔK от параметра зависимости от параметра $KC^{0.5}$ [2].

В рамках проведенного анализа удалось получить величины микродеформаций и размер области когерентного рассеяния (ОКР) (стандартный метод Уильямсона-Холла), величину плотности дислокаций и преобладающий тип дислокаций (модифицированный метод Уильямсона-Холла). Полученные результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Величины микродеформаций, размера ОКР, плотности дислокаций и преобладающий тип дислокаций в образцах стали Х16-Н19 облученных до различных значений повреждающей дозы в интервале от 0 до 99 сна при различных температурах

Повреждающая доза / температура	Микродеформация [10^{-4}]	Размер ОКР [нм]	Плотность дислокаций ρ [$\times 10^{10}$] см$^{-2}$	Преобладающий тип дислокаций
0 сна / (референс)	23.5	~83	1.28	Краевые
5 сна / 370 °С	39.5	~553	1.58	Краевые
84 сна / 530 °С	33.0	~105	1.53	Краевые
93 сна / 460 °С	29.0	~553	1.19	Винтовые
99 сна / 505 °С	43.0	~416	0.67	Винтовые

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

1. С. И. Пороллo, Ю. В. Конобеев, С. В. Шулепин, Ат. Энерг. **106**(4), 188 (2009).
2. T. Ungár, A. Borbély, Appl. Phys. Lett. **69**, 3173 (1996).

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ДИФРАКЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ НА УСТАНОВКАХ ЛАБОРАТОРИИ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ ОИЯИ

С. Е. Кичанов, Д. П. Козленко, О. Н. Лис, Е. В. Лукин, А. В. Руткаускас, Б. Н. Савенко*

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

*E-mail: lukin@jinr.ru

В Лаборатории Нейтронной Физики Объединенного Института Ядерных Исследований проводятся исследования магнитной и кристаллической структуры различных соединений методом нейтронной и рентгеновской дифракции. Такие исследования помогают лучше понимать особенности физических свойств исследуемых соединений. Одним из важных направлений лаборатории является изучение структуры соединений при экстремальных условиях, в частности при высоких давлениях, так как использование высоких давлений является контролируемым методом изменения структуры исследуемых соединений. Высокое давление влияет на длину межатомных связей, взаимное расположение атомов в кристаллической решетке, что в свою очередь отражается на физических свойствах исследуемых материалов.

Для проведения экспериментов по нейтронной и рентгеновской дифракции при высоких давлениях используются 2 установки на импульсном реакторе ИБР-2: ДН-12 и ДН-6, и рентгеновский источник Xeuss 3.0 высокой яркости. В настоящей работе показаны конструкционные особенности и экспериментальные возможности установок, представлена концепция проведения экспериментов с камерами высокого давления на нейтронных и рентгеновском пучках.

Стендовый доклад

СОСТОЯНИЯ СТРУКТУРЫ СПЛАВА $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$

В. И. Максимов[1]*, *Е. Н. Максимова*[1], *С. В. Андреев*[2], *М. А. Сёмкин*[1,2]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия
*E-mail: maximov@imp.uran.ru

Методами нейтронной дифракции проведено исследование структурных изменений в сплаве $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$, подвергнутом разливке на вращающийся медный диск (спиннингованию) с последующим высокотемпературным отжигом. Нейтронографические данные, в отличие от рентгенографических измерений [1] показывают, что образцы $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ после спиннингования достигают аморфного состояния, лишь частично. На основе полученных данных, в работе анализируется на качественном уровне сущность эффектов деструктуризации и восстановления структуры сплава изученного состава путем разливки и термообработки, предлагается подход к моделированию реальной структуры для понимания возникающих структурных состояний в сплаве.

Интерметаллические соединения $RT_{12-x}M_x$ (R – редкоземельный металл, T – 3d-переходный металл, M – легирующий элемент) со структурой типа $ThMn_{12}$ рассматриваются в качестве перспективных материалов для постоянных магнитов ввиду меньшего содержания редкоземельного металла и использования сравнительно дешевого самария [1–3]. В качестве наиболее перспективного материала для постоянных магнитов целесообразно использовать соединение с минимальным содержанием элемента , например, Ti. Уже с одним атомом Ti формируется фаза $SmFe_{11}Ti$ с тетрагональной структурой типа $ThMn_{12}$ и на ее основе можно достичь в образцах высоких значений величины максимального энергетического произведения $(BH)_{max}$ более 30 МГсЭ при комнатной температуре [4].

Целью работы было установить доминирующие процессы формирования кристаллической и магнитной структур сплава $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ в исходном состоянии и после оптимального протокола отжига для формирования их магнитотвердого состояния с наилучшими гистерезисными характеристиками.

На нейтронограмме образца быстрозакаленной ленты сплава $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ после спиннингования (исходное состояние) на рис. 1, как видно, наблюдаются довольно отчетливые максимумы. Положения наблюдаемых максимумов соответствуют области расположения узлов обратного пространства фазы $ThMn_{12}$, которым отвечают рефлексы на рентгенограммах, полученных после отжига образца при высоких температурах. В сопоставлении с данными работы [1], проявленные на рассматриваемой нейтронограмме рефлексы соответствуют структурообразующим плоскостям (202), (400), (321) и (222), (420), (411) фазы $ThMn_{12}$. Можно заметить, что нейтронограмма образца после спиннингования содержит признаки наличия и основной линии (110) плоскости фазы α-Fe. Из чего следует считать, что в наблюдаемых на нейтронограмме рис. 1*c* максимумах присутствует дифракционный вклад в интенсивность от перечисленных структурообразующих плоскостей. Если обсуждаемый вклад в интенсивность максимумов нейтронного рассеяния является преобладающим, аморфизация образца, признаки которой проявились в рентгено- и электронографии, не является объемным эффектом в результате спиннингования при условиях, реализованных в настоящей работе. При этом, в наблюдаемые эффекты в виде максимумов магнитная составляющая

рассеяния вряд ли вносит сколько-нибудь существенный вклад: на картинах нейтронного рассеяния образца, восстановленного после отжига (полученная экспериментальная нейтронограмма при тех же условиях съемки показана на вставке 2 к рис. 1) видно, что наблюдаются отчетливые максимумы примерно той же интенсивности, что и для исходного состояния, но менее размытые и с меньшим уширением линий. Вместе с тем, рассматривая внимательно картину рентгеновского рассеяния на вставке 1 к рис. 1, на наблюдаемом фоне явного гало можно усмотреть предельно слабые рефлексы, которые свидетельствуют о зарождении микрокристаллического состояния.

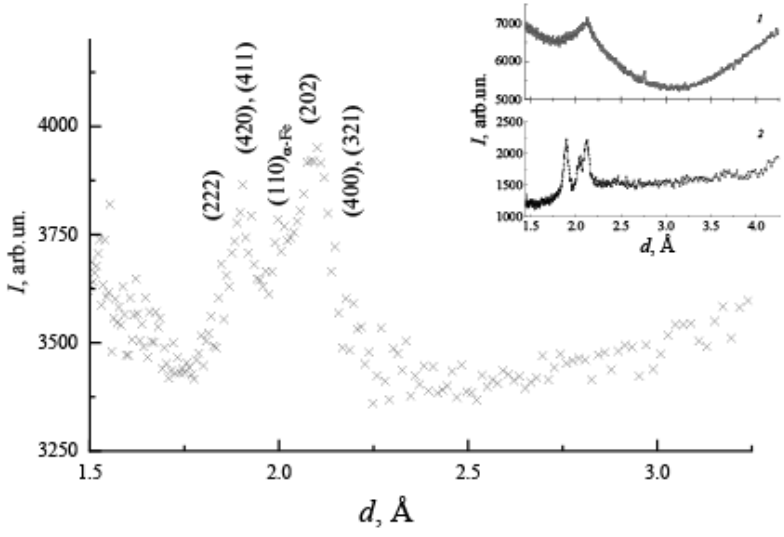

Рис. 1. Экспериментальная нейтронограмма быстрозакаленной ленты сплава $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ после спиннингования. На вставке: 1 – рентгенограмма $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ после спиннингования (данные работы [1]); 2 – нейтронограмма образца сплава $(Sm_{0.9}Zr_{0.1})Fe_{11}Ti$ после 1 часового отжига при 800 °C.

По представленному, обсуждаются подходы к моделированию структурных состояний, исходя из сложности регистрируемых картин рассеяния. Полученные на исследованных образцах результаты могут предполагать разные модели реальной структуры, поиск и верификация которых, ввиду необходимости рассматривать вопросы в комплексе, должны проводиться с привлечением данных других методов исследования.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

1. D. S. Neznakhin, S. V. Andreev, M. A. Semkin, et al., J. Magn. Magn. Mater. **484**, 212 (2019).
2. P. Tozman, H. Sepehri-Amin, Y. K. Takahashi, et al., Acta Mater. **153**, 354 (2018).
3. W. Körner, G. Krugel, C. Elsässer, Sci. Rep. **6**, 24686 (2016).
4. G. C. Hadjipanayis, A. M. Gabay, A. M. Schönhöbel, et al., Engineer. **6**, 141 (2020).

Стендовый доклад

ПОРТАТИВНЫЙ ДЕМОНСТРАЦИОННЫЙ СТЕНД ДЛЯ ПОКАЗА И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ОТ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ СЧЕТЧИКОВ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

В. Н. Марин, Д. Н. Трунов, Р. А. Садыков*

Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия
*E-mail: marin@inr.ru

Портативный демонстрационный стенд для показа и обработки данных от сцинтилляционных счетчиков тепловых нейтронов нового типа. Стенд предназначен для обучения студентов физических ВУЗов работы со счетчиками на нейтронных пучках. На нем можно наблюдать как счет импульсов от нейтронов, так и при наличии импульсного источника нейтронов дифракцию при использовании время пролетной методики.

В ИЯИ РАН были разработаны сцинтилляционные счетчики тепловых нейтронов нового типа. Эффективность счетчика доведена выше 75%, что сравнимо с гелиевыми счетчиками. Разброс эффективности счетчиков не более 5%. Это позволило отказаться от использования гелиевых счетчиков. Сейчас на нейтронографических установках ИЯИ РАН успешно используются разработанные нами сцинтилляционные счетчики тепловых нейтронов.

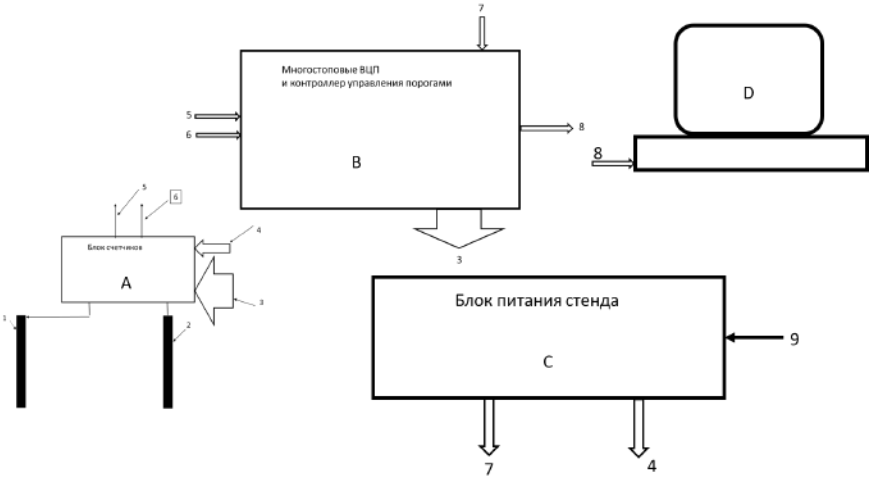

Рис. 1. Структурная схема демонстрационного стенда.

Эти счетчики достаточно новые и еще не приобрели широкую известность, поэтому было решено разработать демонстрационный стенд для обучения студентов физических ВУЗов и показа работы счетчиков и методики работы с ними. Стенд демонстрирующий работу нейтронных твердотельных сцинтилляционных счетчиков тепловых нейтронов с сцинтиллятором ZnS(Ag)/LiF, кремниевыми фотоумножителями и световодом из полиметилметакрилата, а также демонстрирующий применение время пролетной методики измерения.

На нем можно наблюдать как счет импульсов от нейтронов, так и при наличии импульсного источника нейтронов дифракцию при использовании время пролетной методики. Напряжение питания счетчиков не более 35 В, поэтому можно применять в любых помещениях и лабораториях. Стенд имеет удаленный блок счетчиков что позволяет безопасно работать как с нейтронным источником ^{252}Cf. так и с нейтронным пучком.

Стенд состоит из следующих блоков:

A. Блок сцинтилляционных счетчиков тепловых нейтронов.
B. Блок много стоповых время- цифровых преобразователей (ВЦП) и контроллера управления порогами счетчиков.
C. Блок питания.
D. Ноутбук.

1. В. Н. Марин и др., Письма в ЖТФ **41**(18), 96–101 (2015).
2. ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА, 1, 1–8 (2018).

Стендовый доклад

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУР НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ $Pr(Ca_{1-x}Sr_x)_2Mn_2O_7$

А. Н. Матвеева[1]*, *В. А. Орлова*[2], *А. А. Быков*[1], *К. Ю. Терентьев*[1]

[1]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
[2]Акционерное общество «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: matveeva_an@pnpi.nrcki.ru

Двухслойные манганиты являются хорошо изученными [1, 2] и интересными с точки зрения применения в техники материалами [3]. В таких соединениях присутствует колоссальное магнетосопротивление [4], что открывает возможности применения в таких технологиях, как магнитная память постоянного доступа и спиновая электроника. Существует возможность тонкой настройки физических эффектов в кристалле под действием химического сжатия, внешнего давления, подмагничивание 3*d*-подрешетки со стороны редкоземельной подрешетки или внешнего магнитного поля.

Исследуемые здесь монокристаллы состава $Pr(Ca_{1-x}Sr_x)_2Mn_2O_7$ были выращены методом оптической зоной плавки. Образцы монокристаллов имеют неправильную форму и размеры приблизительно $10\times4\times3$ мм^3.

Был проведен элементный анализ методом рентгеновской флюоресценции на волнодисперсионном спектрометре последовательного типа Bruker S8 Tiger с Rh рентгеновской трубкой. Обработку данных выполняли с использованием программного обеспечения SPECTRA plus и сравнение с рассчитанными значениями массовых долей каждого элемента. По результатам элементного анализа состав соответствует заложенному стехиометрическим соотношением компонентов. Сделаны СЭМ микрофотографии и сделан анализ состава по всей поверхности монокристалла и в трещинах, методом сканирующей электронной микроскопии в сочетании с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией.

Фазовый анализ и уточнение структурных характеристик выполняли методом рентгеновской дифракции на дифрактометре Bruker D2 Advance, CuK_α-излучение, напряжении рентгеновской трубки 40 kV токе 40 mA. Сканирование рентгенограмм осуществляли в диапазоне углов отражения 2θ от 10 до 70°. Обработку результатов проводили с использованием программы Diffrac.Eva, Topas и картотеки PDF-2 ICDD. На рентгеновском дифрактометре Rigaku проводили измерения параметров элементарной ячейки при низких температурах: 7, 10, 15, 20, 30, 50, 100, 300K, CuK_α-излучение.

Получены кристаллические структуры при низких температурах и при комнатной температуре. Уточнены заселенности позиций в соответствии с результатами энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии $Pr(Ca_{0.8}Sr_{0.2})_2Mn_2O_7$.

Пространственная группа *Cmc*21, получены параметры элементарной ячейки *a* = 19.2708(10) (Å), *b* = 5.4220(2) (Å), *c* = 5.4773(2) (Å) и координаты атомов в ней. При понижении температуры на рентгенограмме видно перераспределение интенсивности, что свидетельствует о небольшом изменении координат атомов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-22-00236.

1. T. Kimura and Y. Tokura, Annu. Rev. Mater. Res. **30**, 451 (2000).
2. C. D Ling and al, Phys. Rev. B. **62**, 15096 (2000).
3. M. B. Salamon, Rev. Mod. Phys. **73**, 583 (2001).
4. Y. Moritomo and al, Letters to Nature **380**, 141 (1996).

THE INFLUENCE OF Zn DOPING ON THE CATION DISTRIBUTION AND STRUCTURAL PROPERTY IN FERRITE SPINEL $CoFe_2O_4$

N. T. Nghiêm[1,2,3]*, *S. E. Kichanov*[2], *A. V. Rutkauskas*[2], *E. V. Lukin*[2]

[1]Instutute of Oceanography, Vietnam Academy of Science and Technology, Nha Trang, Vietnam
[2]Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
[3]Faculty of Electronics, Electrical Engineering and Material Technology, University of Sciences, Hue University, Hue, VietNamй
*E-mail: nghiem@jinr.ru

Spinel ferrite MFe_2O_4 (M = Co, Fe, Mn, Zn...) has a face-centered cubic crystal structure and belongs to the $Fd\bar{3}m$ space group [1].

Based on the distribution of M and Fe cations on the tetrahedral and octahedral sites, the structural formula of MFe_2O_4 is defined as $\left(M_{\delta}^{2+}Fe_{1-\delta}^{3+}\right)\left[M_{1-\delta}^{2+}Fe_{1+\delta}^{3+}\right]O_4^{2-}$, where the round brackets and square brackets represent the tetrahedral and octahedral sites, respectively, $0 < \delta < 1$ is the inversion factor, there are 3 types: normal ($\delta = 1$), inverse ($\delta = 0$) and mixed spinel ($0 < \delta < 1$) [1].

Cobalt ferrite $CoFe_2O_4$ (CFO) has attracted great research interest due to its potential applications in many fields such as high-density data storage, lithium batteries, sensors, magnetic fluids, electronic generators, environmental, biomedical, etc., as well as its attractive physical properties [2, 3]. The replacement of magnetic Co^{2+} by non-magnetic cations Zn^{2+} in the spinel ferrite phase can cause significant changes in their structural, optical, magnetic, and other properties, due to the distribution of cation ions between the available A and B sites. A recent study showed a similar effect when $CoFe_2O_4$ nanoparticles synthesized by the sucrose-assisted combustion route were doped with Zn, both saturation magnetization (Ms) and remanent magnetization (Mr) decreased with increasing Zn concentration, which was also related to the occupancy of octahedra and tetrahedra [4].

In this paper, we present a systematic study of the structural and magnetic properties of Zn-doped CFO prepared by the solid-state reaction method and using a combination of X-ray diffraction, neutron diffraction, Raman scattering, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and magnetic measurements. The X-ray diffraction and neutron diffraction results demonstrate that the Zn-doped CFO have a cubic spinel structure belonging to the $Fd\bar{3}m$ space group. The XPS spectrum shows that the presence of Zn^{2+} ions causes the change of Fe^{3+} cations from tetrahedral sites to octahedral sites and the opposite for Zn^{2+} cations. The saturation magnetization decreases significantly with increasing Zn doping concentration. The results obtained show that the magnetic moment of site A decreases as non-magnetic Zn ions increase at site A, leading to paramagnetism, while the magnetic moment of site B increases as Fe^{3+} ions increase at site B.

1. T. Thi Ngoc Nha, D. N. Toan, P. H. Nam, et al., J. Alloys Compd. **996**, 174773 (2024).
2. Y. Oh, M. Sahu, S. Hajra, et al., J. Electron. Mater. **51**, 1933–1939 (2022).
3. T. Kmječ, N. T. Nghiem, N. Truong-Tho, et al., Coord. Ceramics International **51**, 5168–5180 (2025).
4. M. A. Gabal, A. A. Al-Juaid, S. M. Al-Rashed, et al., J. Magn. Magn. Mater. **426**, 670–679 (2017).

Стендовый доклад

АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ МЕТОДАМИ НЕЙТРОННЫХ ТОМОГРАФИИ И РАДИОГРАФИИ

А. А. Павельева, Е. В. Алтынбаев*

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия
*E-mail: paveleva_aa@pnpi.nrcki.ru

Нейтронные томография (НТ) и радиография (НР) являются неразрушающими методами исследования. Метод нейтронной радиографии основан на регистрации теневых проекций объекта, просвечиваемого нейтронным пучком. Контраст изображения обусловлен вариациями плотности и/или химического состава, и может быть усилен за счет изменения длины волны нейтронного излучения. Данные методы являются широко востребованными в различных областях науки, промышленности и культуры.

Применение нейтронных томографии и радиографии, в качестве методов исследования, открывает возможность исследования образцов и изделий сложных форм без разрушения и деформации, в том числе для обнаружения дефектов, включений, несплошностей во внутренних объемах, что актуально для аддитивных технологий, исследования водородного охрупчивания материалов, для авиационной, судостроительной и автомобильной промышленностей и т.п. Помимо вышеуказанного, применение данных методов позволяет исследовать микроструктуру объектов, характер распределения фаз, а также, оценивать эффективность материалов радиационной защиты в поглощении нейтронов, исследовать материалы – накопители водорода, аккумуляторы, элементы питания и процессы, протекающие в них в результате их эксплуатации.

В данном докладе будет отражена актуальность создания станции для томографических и радиографических исследований крупных объектов посредством нейтронного излучения на базе реакторного комплекса ПИК. Также будут рассмотрены некоторые результаты мирового опыта применения данных методов.

Как известно, большое влияние на механические свойства металлов и сплавов оказывает их фазовый состав. Таким образом, благодаря томографическим исследованиям, изменяя применяемую длину волны нейтронов, удалось различить феррит и мартенсит на толщине образца в 1,5 см (рис. 1), что нам демонстрируют авторы работы [3].

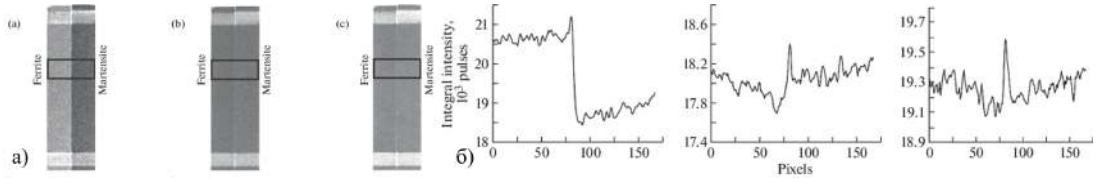

Рис. 1. (*а*) Рентгенограммы исследуемых образцов, полученные на длинах волн a) 4,1, b) 2,86, c) 3,7 Å; (*б*) профили интенсивности для выбранной области [3].

Наличие и распределение водорода в металлах долгое время является актуальным вопросом в материаловедении, создании новых конструкционных сплавов и в области изучения материалов-накопителей водорода. Обнаружение водородного охрупчивания в объеме без деформации, так же возможно благодаря применению нейтронной томографии (рис. 2) [1].

Дифракционный контраст, лежащий в основе данных методов, возникающий благодаря брэгговскому рассеянию нейтронов на плоскостях исследуемой кристаллической

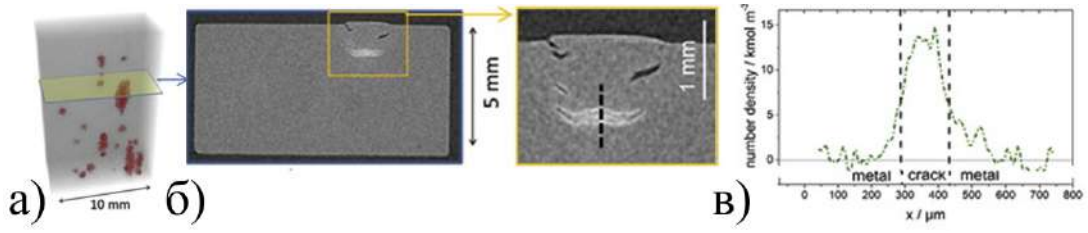

Рис. 2. (*a*) Пример томографии высокого разрешения железа, электрохимически насыщенного водородом. Водород отмечен красным. (|textitб) Эффекты охрупчивания. Поры заполнены водородом – светлые, поры вблизи поверхности свободны от водорода – темные. (*в*) Профиль концентрации водорода вдоль пунктирной линии на, о чем рассказывают нам авторы работы [1].

решетки, обычно используется для визуализации фазовых различий и выявления текстурных неоднородностей как в инженерных объектах, так и в артефактах культурного наследия (рис. 3).

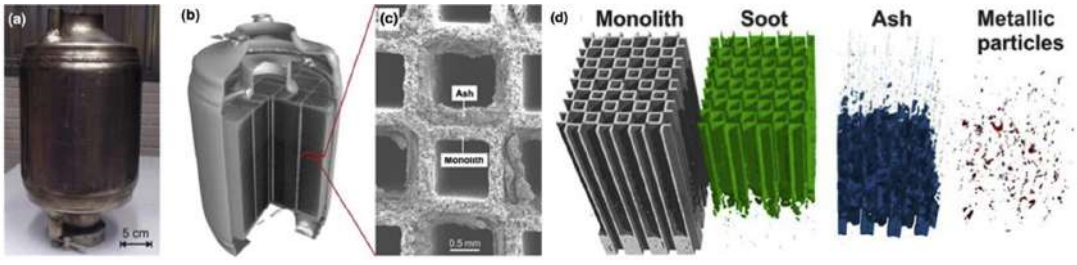

Рис. 3. (*a*) Фотография герметичного сажевого фильтра. (*b*) Нейтронная томография. (*c*) СЭМ, показывающая слой сажи толщиной 250 мм на поверхности стенки фильтра. (*d*) Нейтронная томография высокого разрешения с применением времяпролетной технологии: сегментация отдельных компонентов образца.

Стоит отметить, что посредством данных методов также возможно исследовать и магнитные материалы, о чем свидетельствуют результаты, показанные ниже [4].

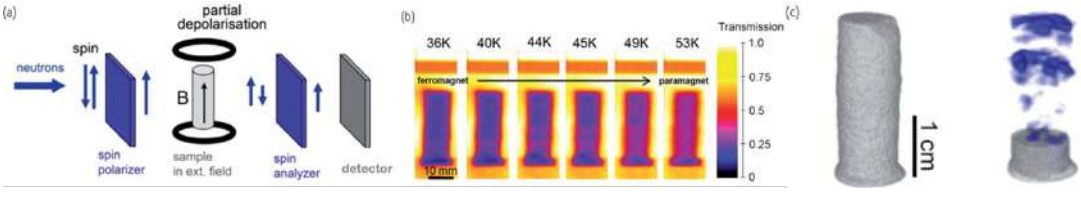

Рис. 4. (*a*) Принцип нейтронно-деполяризационной визуализации. (*b*) Температурная зависимость нейтронной деполяризации поликристалла. (*c*) Исследование парамагнитных областей (светло-серые), ферромагнитные – синие [4].

1. N.K. Bilheux. Advances in Neutron Radiography (2016).
2. M. M. Murashev, Instruments and Experimental Techniques (2021).
3. N. A. Kardjilov, Materials Today (2018).
4. D. X. Goers, Journal of Power Sources (2004).

Стендовый доклад

IN SITU ИССЛЕДОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ВЭС СОСТАВА HfNbTaTiZr

Е. А. Петрикова[1]*, *Ю. Ф. Иванов*[1], *Н. А. Прокопенко*[1], *Н. Н. Коваль*[1], *А. Н. Шмаков*[2]

[1]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия
[2]Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия
*E-mail: elizmarkova@yahoo.com

В данной работе представлены результаты исследования с помощью синхротронного излучения процесса формирования металлических пленок ВЭС состава HfNbTaTiZr, синтезированных в многоэлементной газо- металлической плазме. Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) на основе тугоплавких металлов, обладающие необычным сочетанием физико-механических, трибологических, электрофизических и т. д. свойств, могут быть рекомендованы для использования в различных областях промышленности и медицины. Сплав TiNbZrTaHf может быть использован в биомедицинских целях, так как содержит только биосовместимые элементы [1–3].

Целью работы является исследование процесса роста пленок ВЭС системы Ti–Nb–Zr–Ta–Hf в режиме реального времени методом рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения. Эксперименты по нанесению многоэлементных пленок металлов проводили на установке ВЭИПС-1, разработанной в ИСЭ СО РАН для исследования процессов формирования пленок и покрытий на источнике синхротронного излучения. Процесс формирования структуры тонких пленок *in situ* с высоким временным разрешением изучали, используя источник синхротронного излучения – накопитель электронов ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН. Съемка и запись рентгенограмм осуществлялись в непрерывном режиме каждую минуту. В качестве подложки были использованы образцы твердого сплава ВК8 (WC-8%Co) размерами 10×10×5 мм.

Исследования *in situ* процесса формирования металлического покрытия (подложка – твердый сплав ВК8) на основе высокоэнтропийного сплава TiNbZrTaHf, выявили многостадийный многофазный характер процесса роста покрытия. На первой стадии напыления покрытия наблюдается формирование -фазы, имеющей гексагональную кристаллическую решетку. Можно предположить, что данная фаза является переходной фазой, расположенной на границе контакта подложки и покрытия. На второй стадии процесса напыления покрытия наблюдается формирование двух фаз (β-фазы и α-фазы), имеющих ОЦК кристаллическую решетку. На начальной стадии формирования α-фазы выявляется аморфно-кристаллическое состояние материала покрытия. На заключительной стадии формирования покрытия в угловом интервале существования аморфно-кристаллического состояния покрытия выявляются два дифракционных максимума, указывающих на формирование еще одной новой фазы.

Благодарности. Работа выполнена в рамках РНФ проекта № 24-69-00074.

1. M. Slobodyan, E. Pesterev, A. Markov. Materials Today Communications. **36**, 106422 (2023)
2. J. Zýka, J. Málek, Z. Pala, L. Andršová, J. Veselý. Metal-2015. Conference Paper. – June 3rd – 5th 2015, Brno, Czech Republic, EU.
3. A. Biesiekierski, J. Wang, M. Abdel-Hady Gepreel, C. Wen. Acta Biomater. **8**, 1661–1669 (2012).

Стендовый доклад

НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ И ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПУТЕЙ МИГРАЦИИ КАТИОНОВ Li^+ + И Na^+ В СИСТЕМЕ $(Li,Na)_{1+}V_3O_8$

Н. В. Проскурнина[1]*, *Е. А. Шерстобитова*[1,2], *М. С. Щелканова*[3], *Г. Ш. Шехтман*[3], *Xiaobai Ma*[4], *Е. А. Морхова*[5], *Н. А. Кабанова*[5], *М. А. Сёмкин*[1,6], *В. И. Воронин*[1], *А. Ф. Губкин*[1,6]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[4]Neutron Scattering Laboratory, China Institute of Atomic Energy, Beijing, China
[5]Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
[6]Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия
*E-mail: proskurnina@imp.uran.ru

В данной работе в рамках комплексного подхода с использованием рентгеноструктурных и нейтронографических измерений исследовалась кристаллическая структура ванадиевых бронз системы $(Li,Na)_{1+}V_3O_8$. Совместная обработка данных дифракции рентгеновских лучей и рассеяния нейтронов полнопрофильным методом Ритвельда позволила уточнить положения подвижных атомов лития и натрия по кристаллографическим позициям в моноклинной $P2_1/m$ слоистой структуре [1]. Показано, что избыточное содержание лития/натрия ($0 < x \leq 0.3$) приводит к их статистическому распределению между слоями $[V_3O_8]^-$ и увеличивает расстояния между ними вдоль направления [100].

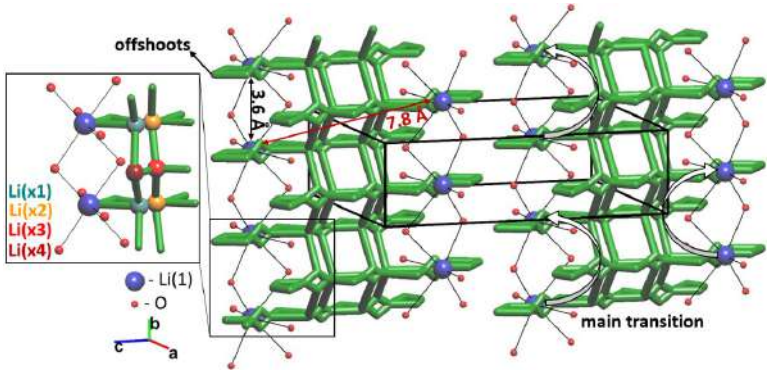

Рис. 1. Схематическое представление карты путей миграции катионов Li^+ и их распределение по возможным позициям в структуре LiV_3O_8 [1].

Методом разбиения Вороного при помощи комплекса структурно-топологических программ ToposPro [2] проведен анализ путей миграции катионов в структуре $(Li,Na)^{1+}V_3O_8$. Для всех исследуемых составов получены карты систем пустот и каналов с одномерным типом проводимости вдоль кристаллографического направления [010]. В качестве примера на рис. 1 показана карта путей миграции катионов Li^+ и их распределение по возможным кристаллографическим позициям в структуре LiV_3O_8. Геометрико-топологический анализ путей миграции катионов показал, что каналы состоят из вакантных октаэдрических и тетраэдрических позиций, по которым осуществляется диффузия катионов Li^+/Na^+ по прямому механизму перескока.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН и ИВТЭ УрО РАН (122020100210-9).

1. E.A. Sherstobitova, Ye.A. Morkhova, et al., Solid State Ionics **427**, 116904–7, (2025).
2. V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, D. M. Proserpio, Crystal Growth & Design, **14**(7), 3576–3586, (2014).

Стендовый доклад

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА ПЕРОВСКИТА $Ba_{1.8}Dy_{1.2}Fe_{2.1}Co_{0.9}O_{7.95}$

Н. В. Проскурнина[1]*, *В. И. Воронин*[1], *И. А. Бастрон*[2], *В. А. Черепанов*[2], *М. А. Сёмкин*[1,2,3]

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия
[3]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
*E-mail: proskurnina@imp.uran.ru

Перовскиты с дефицитом кислорода, обладают привлекательными физическими свойствами: высокой электронно-ионной проводимостью и высокой подвижностью кислородной подрешетки [1]. Благодаря этому их можно использовать в качестве сенсоров, катализаторов или катодных материалов для твердооксидных топливных элементов [2]. Широкий диапазон гомогенности по кислороду обеспечивает упорядочение вакансий и образование ряда слоистых кристаллических сверхструктур. Внутри- и межслойные обменные взаимодействия 3d-переходных металлов формируют интересные магнитные состояния в слоистых перовскитах.

Нами проведены комплексные нейтронографические измерения поликристаллического образца $Ba_{1.8}Dy_{1.2}Fe_{2.1}Co_{0.9}O_{7.95}$ в широком интервале температур от 8 K до 773 K на нейтронном дифрактометре ДИСК, установленном на горизонтальном канале исследовательского реактора ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт». Использовался монохроматический пучок нейтронов (5×10) мм^2.

Описание дифрактограмм выполнено полнопрофильным методом Ритвельда с использованием программного обеспечения Fullprof Suite. Для визуализации моделей наблюдаемых структур использовалась программа VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis), инструмент ISODISTORT применялся для анализа и описания особенностей магнитной структуры и трансформации кристаллохимической ячейки при фазовом переходе.

Из результатов анализа нейтронограмм при комнатной температуре установлено, что исследуемое соединение образуется однофазным и кристаллизуется в тетрагональную ячейку $P4/mmm$ со структурой слоистого перовскита с параметрами решетки $a_c = b_c = 0{,}3906(3)$ нм и $c_c = 1{,}1740(1)$ нм. Утроение параметра с связано с различием ионных радиусов Ba^{2+} и Dy^{3+}, вследствие чего наблюдается последовательное чередование слоев, содержащих только барий или диспрозий.

Антиферромагнитная (АФМ) структура описывается волновым вектором k = (0,5, 0,5, 0,5) и магнитной пространственной группой $Imma1'_b[Bmmm]$. На рис. 1 показаны магнитная (слева) и кристаллохимическая (справа) ячейки исследуемого перовскита. Начала координат ячеек повернуты вокруг длинной оси относительно друг друга на угол 45°, формируя базисные плоскости из коротких осей $a_m = c_m = a_c \cdot \sqrt{2} = b_c \cdot \sqrt{2}$; и выстраивая длинные оси в соотношении $b_m = c_c \cdot 2$.

На рис. 2*а* приведены температурные зависимости параметров кристаллической решетки. Видно, что в области магнитного фазового перехода наблюдается увеличение скорости роста параметра длинной оси перовскита, в то время как в базисной плоскости ab сохраняется ее линейная зависимость во всем интервале исследуемых температур (от 8 K до 773 K). На рис. 2*б* показаны температурные зависимости магнитного момента подрешеток железа и кобальта в перовските. Спины магнитных моментов подрешеток упорядочены АФМ вдоль оси $_m$ и являются скомпенсированными по каждой из подрешеток. Между подрешетками (межслойное) косвенное обменное взаимодействие осуществляется вдоль длинной оси b через кислород в позиции 2h. При комнатной температуре спиновый магнитный момент в пирамидальном окружении $\mu_{pyr} = 3{,}5(2)\ \mu_B$ выше, чем в октаэдрическом $\mu_{oct} = 2{,}9(2)\ \mu_B$. Разницу можно отнести к валентному состоянию: ожидается, что все железо находится в спиновом состоянии

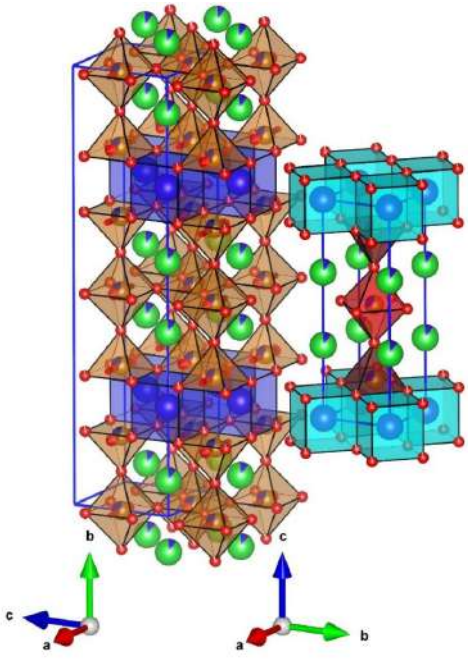

Рис. 1. Магнитная (слева) и кристаллохимическая (справа) ячейки образца $Ba_{1.8}Dy_{1.2}Fe_{2.1}Co_{0.9}O_{7.95}$

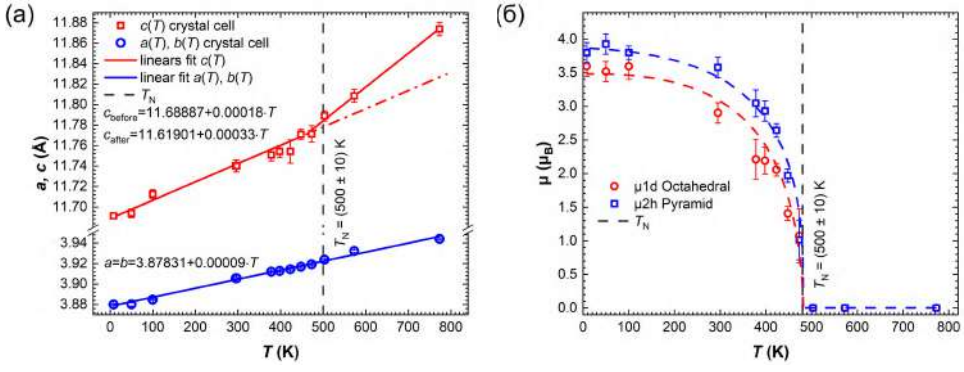

Рис. 2. Температурные зависимости (*а*) параметров кристаллической структуры и (*б*) магнитного момента железа и кобальта в перовските $Ba_{1.8}Dy_{1.2}Fe_{2.1}Co_{0.9}O_{7.95}$

Fe^{3+}, тогда как кобальт может обладать смешанной валентностью. Объемный магнитный момент на формульную единицу в магнитной ячейке перовскита является скомпенсированным. Температура Нееля составляет $T_N = (500 \pm 10)$ K.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

1. E. V. Tsipis, V. V. Kharton, J. Sol. St. Electrochem. **12** (11), 1367–1391 (2008).
2. E. Chavez, M. Mueller, L. Mogni, and A. Caneiro, J. Phys. **167**, 012043 (2009).

Стендовый доклад

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ АВТОМАТИЗАЦИИ СТАНЦИЙ РК ПИК И ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

К. А. Пшеничный, В. А. Поляков*
ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия
*E-mail: pshenichnyi_ka@pnpi.nrcki.ru

В рамках строительства исследовательских станций РК ПИК на площадке ПИЯФ НИЦ КИ необходимо было выбрать «технологический стек» программного обеспечения. В качестве решения было принято выбрать фреймворк Tango-Controls [1] и систему Nicos [2], которые в настоящее время успешно внедряются и апробируются.

В структуре программного обеспечения (Рис. 1.) можно условно выделить три уровня иерархии. Первый уровень: «низкий», на этом уровне происходит непосредственное управление устройствами (например, двигателями, датчиками температуры, дискретными портами ввода/вывода, детекторами и т.д.) как независимыми единицами. Программным обеспечением в данном случае являются драйверы устройств или встроенное программное обеспечение контроллеров.

Вторым уровнем является «средний». На этом уровне организуется работа SCADA системы при помощи фреймворка Tango-controls [1], который состоит из Tango Device серверов (Tango-DS). Это программы, которые, с одной стороны, работают с устройствами (отправляют аппаратно-зависимые команды устройствам, получают ответ), с другой стороны, сами управляются при помощи «tango://» протокола. При этом Tango-DS могут взаимодействовать между собой, отрабатывая, например, некоторые события или создавая программные блокировки в зависимости от условий. Каждый Tango-DS регистрируется в базе данных Tango-database (Tango-DB), где хранятся некоторые параметры устройства, его метрики и регистрируется путь к устройству вида «tango://путь/к/устройству», таким образом убирается зависимость от сетевых адресов конкретных устройств для систем более верхнего уровня и сохраняется конфигурация устройства.

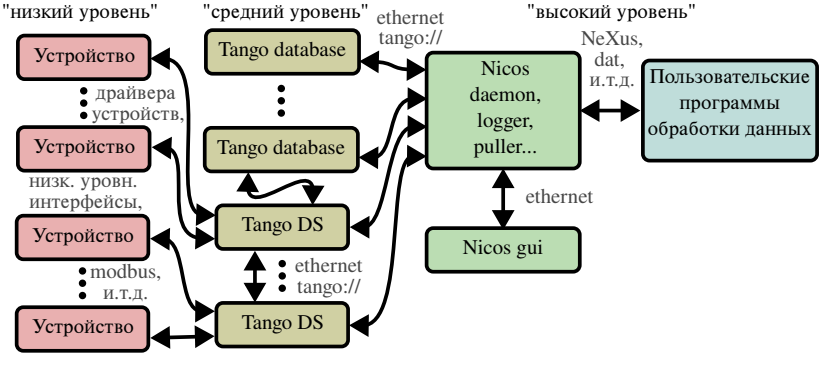

Рис. 1. Структура программного обеспечения

На пользовательском «высоком» уровне работает система управления экспериментом Nicos [2], которая поддерживает tango-протокол, имеет клиент-серверную архитектуру и состоит из множества компонентов. Один из которых — это Nicos-daemon,

сервис, который запускается на сервере установки и обеспечивает работу системы. В системе регистрируются tango-устройства, алгоритмизация работы с которыми обеспечивается при помощи скриптового языка Python. Пользователь использует Nicos-gui для подключения к Nicos-daemon для запуска или остановки проведения эксперимента. В конечном счете по результатам эксперимента пользователь получает файлы необходимого формата, содержащие сохраненные метрики, значения детекторов, позиции осей и т. д. Одним из форматов, который поддерживает Nicos, является NeXus [3].

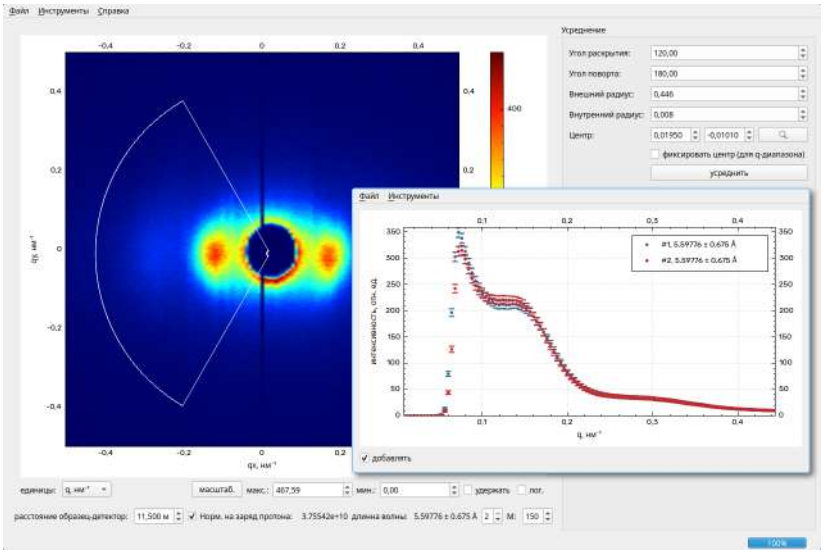

Рис. 2. Пользовательский интерфейс программы CSNSProcessing

Для работы с этим форматом была написана программа (Рис. 2) на языке C++ с использованием фреймворка Qt6. На текущий момент поддерживается обработка времяпролетных малоугловых данных. Обработка заключается в возможности выбора карты МУРН нужной длины волны и усреднении по нескольким длинам волн и азимутального усреднения повыбранному сектору и направлению. Тем самым получая кривые малоуглового рассеяния. В данный момент программа апробируется на экспериментальных данных, полученных с научного центра CSNS (Китай, Дунгуане).

Авторы выражают благодарность за предоставленные экспериментальные данные Наталье Анатольевне Григорьевой (Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия).

1. Официальный сайт фреймворка Tango-controls.
URL: https://www.tango-controls.org (Дата обращения 9.05.2025)
2. Официальный сайт системы управления эксперементом ”Nicos”.
URL: https://nicos-controls.org (Дата обращения 9.05.2025)
3. Mark Könnecke, Frederick A. Akeroyd, Herbert J. Bernstein, et al. J. Appl. Cryst. (2015). **48**, 301–305

Стендовый доклад

МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СИСТЕМЫ Li(Ni,Co)PO_4

П. Е. Ромашко[1], *Н. В. Урусова*[1,2], *Н. В. Проскурнина*[1], *А. Н. Пирогов*[1,2], *М. А. Сёмкин*[1,2,3]*

[1]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия
[3]НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

*E-mail: semkin@imp.uran.ru

В настоящей работе выполнены рентгено-, нейтронографические и магнитные измерения макроскопических свойств системы $LiNi_{1-x}Co_xPO_4$ в широком диапазоне температур от 4 K до 300 K. Показано, что соединения Li(Ni,Co)PO_4 обладают структурой типа $CaMgSiO_4$ (пространственная группа *Pnma*), в которой ионы Li^+ занимают позиции 4*a* с координатами (0; 0; 0), атомы двухвалентных 3*d*-переходных металлов расположены в октаэдрическом окружении 4*c* (*x*; 0.25; *z*), ионы P^{5+} занимают позиции 4*c* (*x*; 0.25; *z*), ионы O^{2-} заселены в трех неэквивалентных позициях, две частного типа – 4*c* и одна общего – 8*d*.

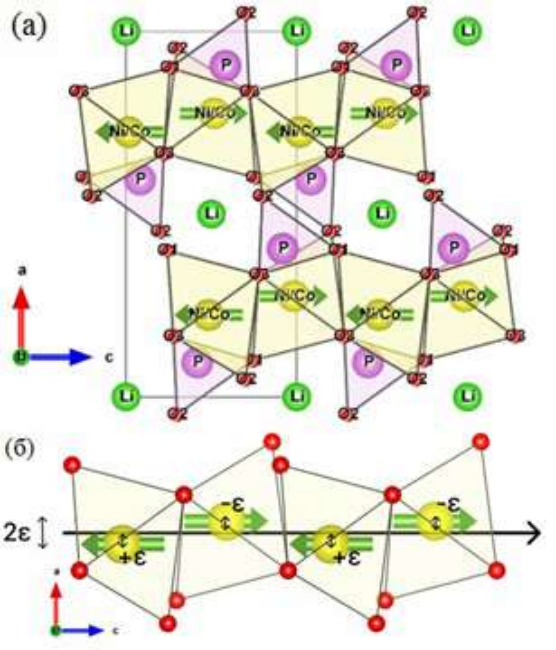

Рис. 1. Проекция в плоскости ac кристаллической структуры соединений на основе Li(Ni,Co)PO_4 с антиферромагнитным упорядочением спинов Ni/Co в плоскости *bc* при температуре ниже 15 K (*а*), слой магнитоактивных атомов в плоскости (*б*).

При температурах ниже 15 K в системе Li(Ni,Co)PO_4 в плоскости *bc* оливин-структуры формируется дальнее упорядочение спинов Ni/Co (M^{2+}) с сильными косвенными антиферромагнитными взаимодействиями между ближайшими соседями первой координационной сферы M1(4)-O(8*d*)-M2(4) и M3(4)-O(8*d*)-M4(4) внутри двух слоев (рис. 1). Последние разнесены на удвоенную величину 2ε с координатами $x/a = 1/4 \pm \varepsilon$ и $x/a =$

3/4 ±ε в каждом слое, и координатами магнитоактивных ионов M1: (1/4+ε; 1/4; 1-δ); M2: (3/4+ε; 1/4; 1/2+δ); M3: (3/4−ε; 3/4; δ); и M4: (1/4−ε; 3/4; 1/2−δ), где ε ∼ 0.025 и δ ∼ 0.015.

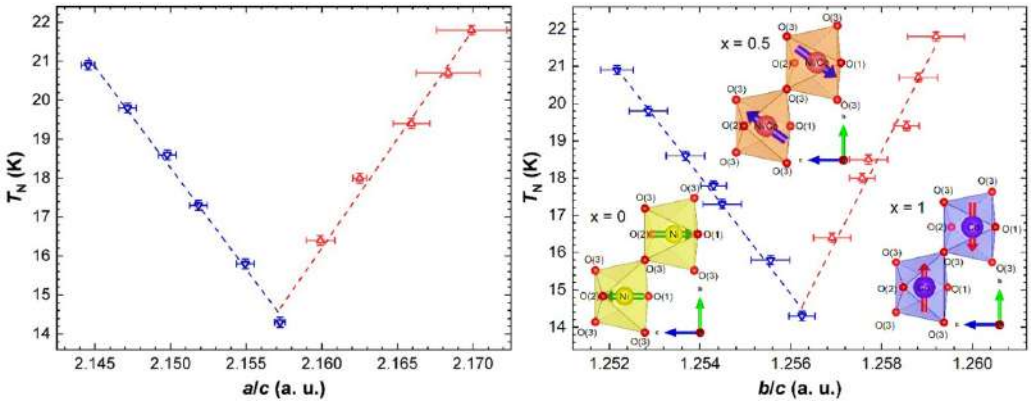

Рис. 2. Зависимости температуры Нееля соединений Li(Ni,Co)PO_4, как функции отношения параметров кристаллохимической ячейки a/c (слева) и b/c (справа).

С ростом содержания кобальта в системе $LiNi_{1-x}Co_xPO_4$ наблюдается анизотропное увеличение параметров $\Delta a > \Delta b > \Delta c$ кристаллохимической ячейки. Показано, что сохраняется прямая связь координат магнитоактивных ионов $y/b = 1/4 \pm 1/2$ и изменений параметра решетки b с долей кобальта в системе Li(Ni,Co)PO_4. Положения ионов Ni/Co, участвующих в обменных взаимодействиях, не зависят от величины δ, определяющую сдвиг координат магнитоактивных ионов вдоль оси . Установлено, что во всём интервале замещений никеля на кобальт в системе Li(Ni,Co)PO_4 косвенные обменные взаимодействия магнитоактивных атомов между слоями bc осуществляются через тетраэдрические комплексы $[PO_4]^{3-}$ и носят слабый характер. При этом наблюдаются сильные антиферромагнитные взаимодействия между соседними октаэдрическими (Ni/Co)O_6 элементами системы в плоскостях bc, причем существует конкуренция вкладов в обменное взаимодействие (рис. 2):

(1) за счет увеличения размеров кристаллохимической ячейки при замещении никеля кобальтом ($x < 0.5$) наблюдается уменьшение величины обменного взаимодействия ближайших соседей, что приводит к минимуму температуры Нееля;

(2) при $x \geq 0.5$ начинает превалировать вклад, связанный с увеличением величины среднего магнитного момента на узлах магнитоактивных атомов, что вызывает обратный рост T_N на фоне увеличения объема элементарной ячейки и спиновой переориентации в плоскости bc.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

Стендовый доклад

ТЕКУЩИЙ СТАТУС РАЗРАБОТКИ НЕЙТРОННОГО ПОРОШКОВОГО ДИФРАКТОМЕТРА НА КАНАЛЕ ГЭК-8 РЕАКТОРА ИРТ-Т

М.С. Сыртанов[1]*, *А. М. Лидер*[1], *А. С. Гоголев*[1], *А. В. Пирожков*[1], *М. Н. Аникин*[1], *К. В. Бескончин*[2], *К. И. Дульцев*[2], *Е. В. Москвин*[3], *Н. А. Коваленко*[3]

[1]Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
[2]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия
[3]Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Россия

*E-mail: mss12@tpu.ru

На сегодняшний день российское научное сообщество, академические организации и промышленный сектор остро нуждаются в исследовательском оборудовании использующих нейтронное излучение (НИ) для решения ряда актуальных задач (использование специфики взаимодействия нейтронов с материалами). Работающих источников НИ, использующих исследовательские установки, в данный момент недостаточно для реализации даже половины имеющихся задач, что обуславливает актуальность развития нейтронных методов.

Настоящая работа направлена на развитие нейтронных методов анализа широкого класса материалов, включая водородосодержащие и магнитные системы, а также разработку научного оборудования на горизонтальных каналах уникальной установки «Исследовательский реактор ИРТ-Т». В рамках работы проведена ревизия горизонтальных каналов ГЭК-7, ГЭК-8 и ГЭК-9. На канале ГЭК-7 смонтирован и отюстирован тестовый нейтронный рефлектометр (ТНР), предназначенный для прецизионного определения шероховатости (до единиц ангстрем) и плотности суперзеркал и других материалов [1].

Одним из важнейших результатов работы является разработка нейтронного порошкового дифрактометра (НПД), который будет размещен на канале ГЭК-8. Нейтронный порошковый дифрактометр необходим для анализа фазового состава и уточнения структуры материалов, в состав которых входят легкие элементы, такие как водород и литий [2]. Их чувствительность может быть изменена путем изотопного замещения, оставляя физические и химические свойства образца (почти) нетронутыми [3]. В докладе отражен текущий статус разработки порошкового нейтронного дифрактометра. На сегодняшний день сотрудниками ТПУ и ИСЭ СО РАН полностью закончена разработка конструкторской документации ПНД. Сотрудниками ПИЯФ разработан и изготовлен нейтроновод, а также проведены расчеты радиационного фона в реакторном зале вблизи каналов ГЭК-7, ГЭК-8 и ГЭК-9. На основе указанных расчетов спроектирована биологическая защита ПНД. Для разработки и изготовления ключевых элементов прибора организована коллаборация ТПУ, ИСЭ, ПИЯФ, ОИЯИ, ИФМ и других российских и зарубежных организаций. В 2025 году планируется разработать монохроматор, ПО для детекторной системы, а также провести закупку части биологической защиты с последующим монтажом в реакторном зале. Оснащение каналов реактора ТПУ исследовательской приборной базой позволит создать центр нейтронных методов анализа, что станет существенным дополнением к рентгеновским методам, которые будут реализованы на строящемся в г. Кольцово синхротроне поколения 4+ ЦКП «СКИФ».

Данное исследование было проведено при поддержке программы развития ТПУ «Приоритет 2030».

1. В. И. Боднарчук, А. П. Булкин, Е. А. Кравцов, и др., Кристаллография **67**, 1 (2022).
2. M. Hoelzel, A. Senyshyn, N. Juenke, et al., NIM A **667**, 32 (2012).
3. M. Avdeev and J. Hester, J. Appl. Cryst. **51**, 1597 (2018).

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$

Н. В. Урусова[1,2,3]*, *Н. В. Проскурнина*[2], *Е. А. Степанова*[3], *М. А. Сёмкин*[2,3]

[1]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Институт естественных наук и математики УрФУ, Екатеринбург, Россия
*E-mail: natali.urusova@mail.ru

Целью настоящих исследований является изучение макроскопических свойств сложных перовскитоподобных соединений в системе $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$. Данные соединения проявляют ферромагнитные свойства [1, 2] и наиболее интересны тем, что могут являться потенциальными кандидатами на роль материалов, обладающим колоссальным магнитосопротивлением [3]. Ещё одна особенность данных материалов – зависимость их макроскопических свойств от дефицита кислорода (δ), который увеличивается с ростом концентрации кобальта (x) [4].

По литературным данным для соединений $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ в зависимости от концентрации Co могут наблюдаться разные магнитные состояния. В частности в работе [5] было показано, что в интервале $0 \leq x \leq 0.05$ наблюдаются гелимагнитные упорядочения спинов, для $0.05 < x < 0.2$ – состояния кластерного стекла, а при $x \geq 0.2$ данные соединения ферромагнитные. В работе [2] показано, что соединения

$SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ с $\delta \leq 0.06$ проявляют ферромагнитные свойства в интервале концентраций кобальта $0.4 \leq x \leq 0.9$ и температурой Кюри выше 300 K. В работе [3] показано, что эти соединения проявляют ферромагнетизм при $0 \leq x \leq 0.7$. Поэтому вопрос о типе магнитного упорядочения в $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ остаётся открытым.

На первом этапе исследования нами получены образцы с x = 0.15, 0.5, 0.75 и выполнена аттестация их магнитных характеристик. Поликристаллические соединения $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ были синтезированы методом горения из растворов с глицерином в качестве топлива-восстановителя [6] с последующей серией гомогенизирующих отжигов при температурах от 800 до 1100 °C.

Кристаллическая структура и фазовый состав были исследованы при комнатной температуре методом порошковой рентгеновской дифракции на дифрактометре высокого разрешения Shimadzu XRD-7000 (Cu K_α, λ = 1.5406 Å) в интервале углов рассеяния от 5 до 80°. Рентгеноструктурный анализ образцов $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ (x = 0.15, 0.5, 0.75) показал, что соединения обладают кубическим типом симметрии с пространственной группой $Pm-3m$.

Магнитные измерения выполнены на установке для измерения магнитных свойств MPMS XL-7 (Quantum Design) в диапазоне температур от 2 до 300 K в режиме FC измерений на охлаждения во внешнем магнитном поле 10 кЭ и ZFC – на нагрев во внешнем магнитном поле 10 кЭ после охлаждения в нулевом поле. Также были проведены дополнительные измерения полевых зависимостей в диапазоне внешних полей от минус 7 кЭ до плюс 7 кЭ при температурах 2, 50, 100, 150, 200 и 300 K. Температурные зависимости магнитной восприимчивости для всех исследуемых соединений в режиме ZFC представлены на рис. 1*а*. На вставке к рис. 1*а* представлен пример кривых ZFC-FC для образца $SrFe_{0.5}Co_{0.5}O_{3-\delta}$.

Исходя из вида кривых магнитной восприимчивости для всех исследуемых составов с x = 0.15, 0.5, 0.75 наблюдается антиферромагнитное поведение с температурой

Нееля T_N = 38, 70, 80 K, соответственно. Однако, в работах [1, 3, 5] было показано, что для x $\geq$ 0.2 наблюдается ферромагнитное поведение $M(T)$. Вероятно, такое различие для исследованных образцов, проявляющих антиферромагнитное поведение, вызвано разницей в концентрации кислорода. Одновременное описание магнитного состояния системы и контроль кислородной нестехиометрии возможен с применением прямых нейтронных методов исследования структур, что является нашей следующий задачей научной работы.

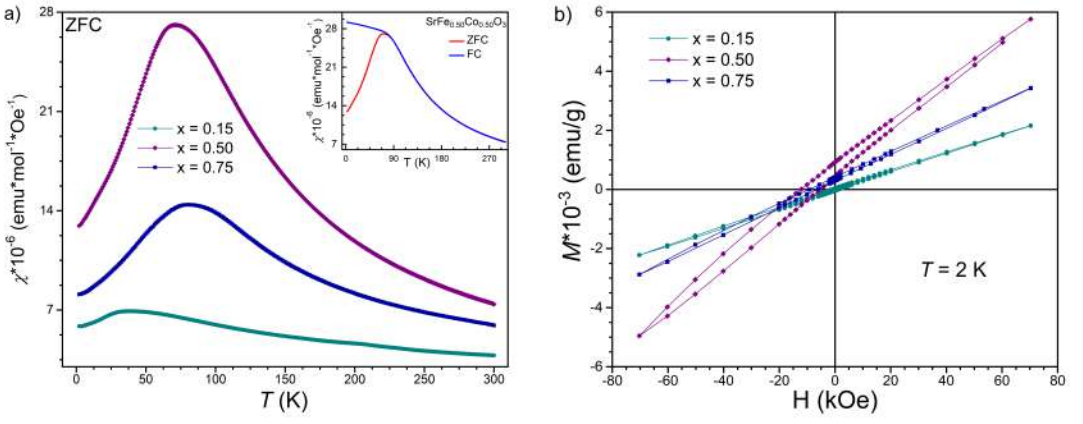

Рис. 1. Температурные молярной восприимчивости $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ (x = 0.15, 0.5, 0.75) во внешнем магнитном поле 10 кЭ (*a*). На вставке – кривых ZFC-FC для образца с x = 0.5. Полевые зависимости намагниченности образцов x = 0.15, 0.5, 0.75 при T = 2 K.

Полевые зависимости намагниченности для соединений $SrFe_{1-x}Co_xO_{3-\delta}$ (x = 0.15, 0.5, 0.75), измеренные при температуре T = 2 K, представлены на рис. 1*b*. Зависимость $M(H)$ для всех составов имеют линейный вид с небольшим гистерезисом. Наибольший гистерезис наблюдается для состава x = 0.5 (коэрцитивная сила H_c = 8.9 Э и остаточная намагниченность M_r = 0.7 Гс·см^3/г), что указывает на наличие слабого ферромагнитного обменного взаимодействия в материалах. При повышении температуры ферромагнитный вклад пропадает.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

1. T. Takeda, H. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn. **33**(4), 973 (1972).
2. S. Kawasaki, M. Takano, Y. Takeda, J. Solid State Chem. **121**(1), 174 (1996).
3. A. Maignan et al., Solid State Sci. **3**(1–2), 57 (2001).
4. Y. Takeda et al., Z. Anorg. Allg. Chem. **540**(9–10), 259 (1986).
5. Y. W. Long et al., Phys. Rev. B: Condens. Matter. **86**(6), 064436 (2012).
6. К. В. Нефедова, В. Д. Журавлев, Перспективные материалы **12**, 380 (2011).

СРЕДНЕЭНТРОПИЙНЫЕ ХРОМИТЫ $(Nd/La)_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}CrO_3$ (Ln = Pr, Er, Sm, Dy, Nd): СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И ПОДВИЖНОСТЬ КИСЛОРОДА

Е. А. Шерстобитова[1,2]*, *Н. А. Кабанова*[3], *М. И. Пантюхина*[1,4]

[1]Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[3]Самарский государственный технический университет, Самара, Россия
[4]4Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*E-mail: sherl@imp.uran.ru

Редкоземельные хромиты обладают высокой термической стабильностью в окислительной и восстановительной атмосферах в сочетании с хорошей электронно-ионной проводимостью при высоких температурах, что делает их перспективными для использования в качестве рабочих материалов в твердооксидных топливных элементах [1].

Исследования электрической проводимости хромитов редкоземельных металлов ($ACrO_3$) активно проводились в последние десятилетия [2]. В данной работе были синтезированы и охарактеризованы новые четырехкомпонентные оксиды на основе хромитов $ACrO_3$ с различными редкоземельными элементами в -подрешетке, относящиеся к классу «среднеэнтропийных» систем: $A = Nd_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}$ и $La_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}$ (в эквиатомных соотношениях), где Ln = Pr, Er, Sm, Dy, Nd. Все образцы были получены методом горения растворов (Solution Combustion Synthesis, SCS) с использованием лимонной кислоты в качестве топлива.

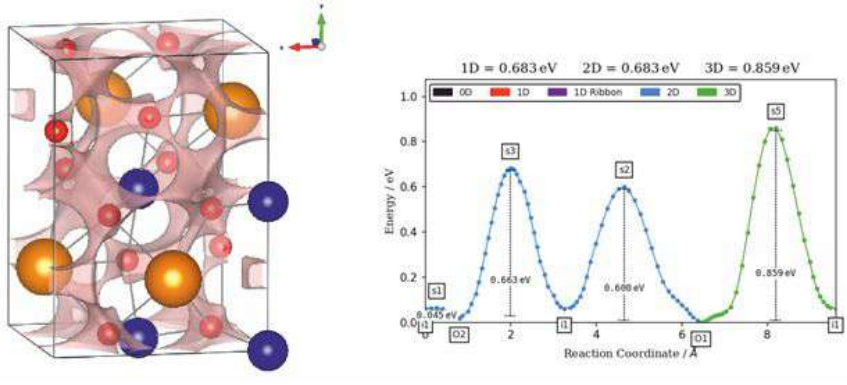

Рис. 1. (*a*) Изоповерхности путей миграции кислорода и (*b*) соответствующий энергетический профиль миграции O^{2-} в $Nd_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}$, рассчитанные с использованием подхода BVSE.

Уточнение кристаллической структуры синтезированных образцов по методу Ритвельда подтвердило формирование в них орторомбической структуры перовскитного типа с пространственной группой *Pnma*. Было установлено, что соединения на основе Nd однофазные, тогда как соединения на основе La являются многофазными и демонстрируют слегка отличающиеся параметры решетки. Для однофазных соединений с Nd были рассчитаны критерии формирования фаз с перовскитной структурой, включая

фактор толерантности (*t*), степень метрического искажения (ε, %) и эффективные координационные числа катионов в - и -подрешетках структуры $ACrO_3$. Проведенная оценка структурных параметров монофазных образцов $Nd_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}CrO_3$ показала, что уменьшение среднего ионного радиуса катиона A-позиции приводит к увеличению структурных искажений каркаса перовскита, отклоняющихся от идеальной кубической симметрии. Были выполнены энергетические расчеты по методу валентных сумм (Bond-Valence Site Energy, BVSE) для соединений $Nd_{0.25}Ln_{0.25}Gd_{0.25}Y_{0.25}CrO_3$. Получена трёхмерная карта миграции ионов O^{2-} и определен низкий энергетический барьер (значения сопоставимы с энергетическими барьерами для известных ионных проводников на основе перовскитов [3]), что указывает на высокую подвижность ионов кислорода (см. рис. 1).

1. Y. Shen, M. Liu, T. He, S. P. Jiang, J. Am. Ceram. Soc. **92**, 2259 (2009).
2. S. Tiwari, A. Mishra, J. Supercond. Novel Magn. **37**, 623 (2024).
3. N. A. Kabanova, Y. A. Morkhova et al., Solid State Ionics. **391**, 116142 (2023).
4. H. Chen, L. L. Wong, S. Adams, Acta Crystallogr., Sect. B **75**, 18 (2019).

Авторский указатель

КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В ИССЛЕДОВАНИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД (РНИКС-2025)

Томск, 29 сентября — 3 октября 2025 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Тексты тезисов приведены в авторской редакции.

Обложка и верстка — *П. А. Заяц*

Ответственные за выпуск — *М. С. Сыртанов*, *А. Ф. Губкин*