

Оглавление

Секция	15
Функциональные материалы, катализаторы, магнитные материалы	15
КАРКАСНЫЕ МЕТАЛЛОСИЛ- И ГЕРМСЕСКВИОКСАНЫ: ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРИРОВАНИЯ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ	16
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ И ПЛАТИНЫ.....	17
КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ИЗ ДИФфуЗНОГО РАССЕЯНИЯ	18
МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И КАТИОННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В СТРУКТУРЕ ЛЕГИРОВАННЫХ ФЕРРИТОВ (Zn, Cr, Co, Fe) ₃ O ₄ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В БИОМЕДИЦИНЕ	19
СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА Co _{2.19} Mn _{0.81} VO ₅	20
ИССЛЕДОВАНИЯ БИОГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ Dps КЛЕТОК E.coli МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МИКРОСКОПИИ, В ТОМ ЧИСЛЕ СИНХРОТРОННЫМИ	21
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ПОДТВЕРЖДЕНИЕ ГИПОТЕЗЫ СУЩЕСТВОВАНИЯ КВАЗИ-ОЦК НА ПРИМЕРЕ СПЛАВА Ti-Nb-Zr С ЕСТЕСТВЕННЫМ ЭЛИНВАРНЫМ ЭФФЕКТОМ: ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ	22
ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ОБРАЗЦОВ ТРУБ ИЗ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ	23
ПРИМЕНЕНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	24
Секция	25
Теория, моделирование, вычислительные методы.....	25
МЕТОД ГРАНИЧНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СТРОГОГО АНАЛИЗА ИНТЕНСИВНОСТИ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ НА ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТКАХ, МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛАХ И ЗОННЫХ ПЛАСТИНКАХ	26
О РЕШЕНИИ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ КВАДРАТИЧНЫХ ЗАДАЧ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ РАССЕЯНИЯ МОНОХРОМАТИЧЕСКИХ ВОЛН.....	27
ДИФфуЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ШЕРОХОВАТОСТИ СТЕНОК ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР	28
БАЗОВЫЕ АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ: МЕТОДЫ ПРОСТРАНСТВЕННОГО НАЛОЖЕНИЯ.....	29

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИИ НА РЕШЕТКАХ	30
ПРИМЕНЕНИЕ БАЙЕСОВСКОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ	31
ИИ АГЕНТЫ И ВАЛИДИРОВАННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ БИБЛИОТЕКИ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ.....	32
ИЗУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕХАНИЗМА ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ	33
Секция	34
Эксперименты In-situ, in-operando, накачка-зондирование.....	34
СИНХРОТРОННЫЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ <i>in operando</i> НА ПРОТОТИПАХ ПЕРСПЕКТИВНЫХ УСТРОЙСТВ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И СПИНТРОНИКИ.....	35
<i>OPERANDO</i> ДИФРАКЦИОННЫЕ И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ ..	36
ИНСТРУМЕНТЫ ДЛЯ СКРИНИНГА И ОПТИМИЗАЦИИ ПАРАМЕТРОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ: ПЕРЕХОД К САМОУПРАВЛЯЕМЫМ ЛАБОРАТОРИЯМ	37
СОВРЕМЕННЫЕ IN-SITU МЕТОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРО- И НАНО- ФОКУСНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ.....	38
ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННАЯ СТРУКТУРНАЯ ДИНАМИКА В КРИСТАЛЛАХ: ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛАССА МЕТОДОВ «ОПТИЧЕСКАЯ НАКАЧКА – ЗОНДИРОВАНИЕ СИНХРОТРОННЫМ ПУЧКОМ».....	39
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ Н-АЛКАНА ПРИ НАГРЕВАНИИ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	41
Секция	42
Аппаратурно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов	42
МНОГОСЛОЙНЫЕ ЗЕРКАЛА ДЛЯ СИНХРОТРОННЫХ И НЕЙТРОННЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ.....	43
ВОПРОСЫ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ ПРИБОРНОГО КОМПЛЕКСА РЕАКТОРА ПИК	44
ПРЕЦИЗИОННЫЙ ДАТЧИК ПОЛОЖЕНИЯ И ИНТЕНСИВНОСТИ ПУЧКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТОНКОЙ ПЛАСТИНЫ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АЛМАЗА	45
НАУЧНАЯ ПРОГРАММА И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СТАНЦИЙ ПЕРВОЙ ОЧЕРЕДИ ЦКП «СКИФ»	46
СТАТУС И ПРЕСПЕКТИВЫ УСКОРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП «СКИФ»	47
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ КОНТРОЛЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОНДУЛЯТОРОВ НА ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ ДЛЯ НАКОПИТЕЛЯ «СИЛА»	48

ВНЕДРЕНИЕ СИСТЕМЫ TANGO CONTROLS ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ СТАНЦИЯМИ СИНХРОТРОНА «СИБИРЬ-2» И ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА ИР-8	50
ПОТЕНЦИАЛ ЦКП СКИФ В ОБЛАСТИ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ.....	51
ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С СЕНСОРАМИ НА ОСНОВЕ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ, КОМПЕНСИРОВАННОГО ХРОМОМ	52
ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОСКОПИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРЕМНИЕВЫХ НАНОФОКУСИРУЮЩИХ ЛИНЗ НА «КИСИ-КУРЧАТОВ».....	53
СИСТЕМЫ БЫСТРОГО ПРЕРЫВАНИЯ ПУЧКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	54
Секция	56
Биологические системы, полимеры, вещество в мягком конденсированном состоянии.....	56
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ОСОБЕННОСТИ АППАРАТУРЫ МЕТОДА МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРОЕНИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ.....	57
ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА ATSAS ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ В РАСТВОРАХ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ	58
СТРУКТУРА ХИМЕРНОГО РЕКОМБИНАНТНОГО БЕЛКА С ПЕРОКСИДАЗНОЙ И СУПЕРОКСИДИСМУТАЗНОЙ АКТИВНОСТЬЮ	59
КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ В КРИСТАЛЛИЗАЦИОННЫХ РАСТВОРАХ БЕЛКОВ: СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	60
ИССЛЕДОВАНИЕ ОТКРУЧИВАНИЯ ДНК ОТ НУКЛЕОСОМЫ НА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ WIDOM 603 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРИО-ЭМ И МУРР.....	61
КОНТРОЛЬ СБОРКИ БЕЛКОВЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ.....	62
РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДВУМЕРНЫХ НАНОСИСТЕМ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОСТИ. ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «ЛЕНГМЮР» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	64
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ СЛОЯХ: ОТ МОНОСЛОЕВ, К МЕЗОМОРФНЫМ ПОЛИСЛОЯМ И 3D КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.....	65
НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ФТАЛОЦИАНИНА В ПЛАВАЮЩИХ СЛОЯХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ	66

САМОСБОРКА КООРДИНАЦИОННОГО ПОЛИМЕРА НА ОСНОВЕ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) И РУТЕНИЯ(II) НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ.....	67
МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НОВЫХ ТИПОВ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ ДЛЯ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ.....	68
СТРУКТУРА ПОЛИМЕРНЫХ АЭРОГЕЛЕЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ РАСТВОРЕНИЕМ ПОЛИАМИДА 6,6.....	69
КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КАРБОСИЛАНОВЫХ ДЕНДРИМЕРОВ ВЫСОКИХ ГЕНЕРАЦИЙ: ОТ ЗАПОЛНЕНИЯ ПРОСТРАНСТВА К ПЛОТНОЙ УПАКОВКЕ	70
Секция	71
Электронная, ионная и конфокальная микроскопия	71
РАЗВИТИЕ УЛЬТРАБЫСТРОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ	72
IN SITU ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СУБЛИМАЦИИ, ТРАВЛЕНИЯ, ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ, АДсорбЦИИ МЕТАЛЛОВ И ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА НА ПОВЕРХНОСТЯХ КРЕМНИЯ И КАРБИДА КРЕМНИЯ.....	73
РАСПЫЛЕНИЕ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ БИНАРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР В КРАЕВОМ РЕЖИМЕ.....	74
СТРУКТУРНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В ПЛЕНКАХ NiO ПОСЛЕ ОТЖИГА	75
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В ОКРЕСТНОСТИ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ МЕЖДУ ПОДЛОЖКОЙ КРЕМНИЯ И ЭПИТАКСИАЛЬНЫМ СЛОЕМ Ge-Sb-Te.....	76
ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА РЕЛЬЕФНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЭМС-КНИМТ ЧИПА ТЕНЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ДАВЛЕНИЯ МЕТОДОМ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	77
АНАЛИЗ ВКЛАДА РАЗЛИЧНЫХ ЧАСТЕЙ АМИЛОИДНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКА Sup35 В ПОДДЕРЖАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ФИБРИЛЛ И ФЕНОТИПИЧЕСКОЕ ПРОЯВЛЕНИЕ «СИЛЬНОГО» И «СЛАБОГО» ВАРИАНТОВ ПРИОНА [PSI+]	78
СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК PZT С РАЗЛИЧНЫМИ ЭЛЕКТРОДНЫМИ СЛОЯМИ	79
ИССЛЕДОВАНИЕ ФРАГМЕНТА ЗОЛОТНОГО ВИТОГО ШНУРА ИЗ ПОГРЕБЕНИЯ 18 СПАСО-ПРЕОБРАЖЕННОГО СОБОРА (ПЕРЕСЛАВЛЬ ЗАЛЕССКИЙ) С ПОМОЩЬЮ МУЛЬТИДИСЦИПЛИНАРНЫХ МЕТОДОВ	80
СРЕДНЕВЕКОВАЯ НОВГОРОДСКАЯ БЕРЕСТЯНАЯ ГРАМОТА №13: МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ АНАЛИЗ	81
ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА МИКРОСТРУКТУРУ ОБРАЗЦОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПУТЕМ ГОРЯЧЕГО ПРЕССОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА КРЕМНИЯ В ПОРОШКЕ КОБАЛЬТА	82
ИССЛЕДОВАНИЕ ТАНТАЛОВЫХ КАТОДОВ, РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ, МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ	83

Секция	84
Материаловедение и промышленные задачи	84
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АКТИВНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ.....	85
ИССЛЕДОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ АЛЮМОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ СПЛАВА МАРКИ ВАС1 С ДОБАВЛЕНИЕМ ЧАСТИЦ WС, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ	86
АНАЛИЗ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ АДДИТИВНЫМ СПОСОБОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ	87
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ	88
ЦИФРОВОЙ «ПОСТДОК» НА СИНХРОТРОНЕ: ТЕХНОЛОГИИ ИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ OPERANDO РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЙ МЕТРОЛОГИИ	89
ЭКСПРЕСС-МЕТОД ОЦЕНКИ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ АДДИТИВНЫМ СПОСОБОМ .	90
ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА СВЕРХМНОГОЦИКЛОВУЮ УСТАЛОСТЬ ОБРАЗЦОВ КОРРОЗИОННОСТОЙКОЙ СТАЛИ 316L ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ.....	91
НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИН, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ.....	92
Секция	93
Синхротронная и нейтронная визуализация.....	93
КОГЕРЕНТНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ <i>IN-LINE</i> ОПТИКА: 30 ЛЕТ ПУТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ.....	94
РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОСКОПИЯ В СПЕКТРАЛЬНОМ ДИАПАЗОНЕ «УГЛЕРОДНОГО ОКНА» (ДЛИНА ВОЛНЫ 4.5 - 5 нм)	95
ИССЛЕДОВАНИЕ И РЕКОНСТРУКЦИЯ ОРНАМЕНТИРОВАННОЙ ЖЕЛЕЗНОЙ НАКЛАДКИ ИЗ МОСКОВСКОГО КРЕМЛЯ	96
СОВМЕЩЕНИЕ МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ 3D ИЗОБРАЖЕНИЙ	97
МЕТОДЫ НЕЙТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ В ИССЛЕДОВАНИИ АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ АРТЕФАКТОВ ИЗ НЕКРОПОЛЯ ВОЛНА 1.....	98
АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ КОРНЕВЫХ СИСТЕМ РАСТЕНИЙ ПО ДАНЫМ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ.....	99
Секция	100
Поверхность, интерфейсы, тонкие пленки.....	100

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХ-МНОГОПЕРИОДНЫХ GaAs/AlGaAs СВЕРХРЕШЕТОК	101
РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА И ХИМИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖСЛОЕВЫХ ОБЛАСТЕЙ	102
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АДсорбированного слоя КИСЛОРОДА НА НАНОПЛЕНКЕ ИТТЕРБИЯ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА NEXAFS	103
РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ С УЧЕТОМ РАССЕЯНИЯ И ДИФРАКЦИИ В СКОЛЬЗЯЩЕЙ ГЕОМЕТРИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ТВЕРДЫХ И ЖИДКИХ СЛОИСТЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	104
МАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ БЛИЗОСТИ В СВЕРХРЕШЕТКАХ Fe/GdN_x	105
ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЁНОК СЛОЖНЫХ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ОКСИДОВ	106
ИССЛЕДОВАНИЯ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ 2D МАГНИТНЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ	107
Секция	108
Современные задачи экологии, структурной химии, радиохимии	108
ОТ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ К ПРИРОДНЫМ ОБЪЕКТАМ: СИНХРОТРОННЫЕ МЕТОДЫ КАК ИНСТРУМЕНТ ИЗУЧЕНИЯ ФОРМ И МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ	109
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ТРУДНО КРИСТАЛЛИЗУЮЩИХСЯ ВЕЩЕСТВ С ПОМОЩЬЮ КОРОТКОИМПУЛЬСНОГО КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	110
Постерные доклады	111
ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ НАНОЧАСТИЦ SiO₂ В ПРИСУТСТВИИ ЧЕРВЕОБРАЗНЫХ МИЦЕЛЛ ДИМЕРНОГО ПАВ (C18-4-C18) МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	112
ЭПИТАКСИАЛЬНАЯ ИНТЕГРАЦИЯ EuO С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ ПЛАТФОРМАМИ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ СПИНТРОНИКИ	113
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ В СПЕКТРАХ ЗАПРЕЩЕННЫХ ОТРАЖЕНИЙ В ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ	114
КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ	115
ДИАГНОСТИКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОТКЛОНЕНИЙ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРЕМНИЕВЫХ ПЛАНАРНЫХ СОСТАВНЫХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ НА «КИСИ-КУРЧАТОВ»	117
ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СТРУКТУРЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА СОСТАВА AgInS/ZnS	118
РОСТ И РЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ДОПИРОВАННЫХ ИОНАМИ Co²⁺ И Y³⁺ КРИСТАЛЛОВ α-NiSO₄·6H₂O	119

ДЕФЕКТЫ, ИНИЦИИРУЮЩИХ УСТАЛОСТНЫЕ РАЗРУШЕНИЯ В ГРАНУЛИРОВАННОМ СПЛАВЕ ЭП741НП (ЧАСТЬ II)	120
ЭЛЕКТРОННАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ТОНКИХ ПЛЕНОК НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ФТОРИДОВ С РЗЭ.....	121
IN SITU EXAFS ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО СИНТЕЗА ТИТАНОСИЛИКАТОВ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ ЦЕЗИЯ	122
МИКРОАНАЛИЗ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК SmS, ПОЛУЧЕННЫХ МАГНЕТРОННЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ.....	123
СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛАНАРНЫХ НАНОСТРУКТУР SiC/Au/Si...124	
ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОРТОФЕРРИТА ИТТРИЯ	125
МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА μ -ОКСОМОСТИКОВОГО ДИМЕРА ЖЕЛЕЗА (III) НА ОСНОВЕ ЛИГАНДА N,N'-ЭТИЛЕНБИС(3-МЕТОКСИ-САЛИЦИЛИМИНА)	126
АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ НОВЫХ УГЛЕАЛЮМИНИЕВЫХ КОМПОЗИТОВ ПРИ МЕХАНИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ	127
ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Ti-Zr В ЭКСПЕРИМЕНТЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ ...128	
СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИЕ КОМПОЗИТЫ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ХИТОЗАНОМ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРА	129
КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЧЕТЫРЁХКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ ТИПА MIL-78 С ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ.....	130
ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ ТОЧЕК В ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛАХ.....	131
РЕЗОНАНСНО-АНОМАЛЬНАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗОЛЯ, ОБОГАЩЁННОГО РУБИДИЕМ	132
ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕН-ХИТОЗАНОВОГО КОМПОЗИТА, МОДИФИЦИРОВАННОГО КОНЬЮГАТАМИ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ.....	133
АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Au-Fe НАНОЧАСТИЦ И ИХ КОНЬЮГАТОВ С МЕТОТРЕКСАТОМ	134
ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ НОРМИРОВКИ СПЕКТРОВ РФЛА-СИ НА ТОК И НА КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ НА ПРИМЕРЕ СТАНДАРТНОГО ОБРАЗЦА ЗОЛОТОСОДЕРЖАЩЕЙ РУДЫ	135
КОРРЕЛЯЦИЯ УРОВНЯ ДОПИРОВАНИЯ И ТЕМПЕРАТУРНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КЕРАМИКАХ YBCO.....	136
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КАТИОНОВ Ca НА СТРУКТУРУ ОЛИГОПЕПТИДАЗЫ В МЕТОДАМИ МУРР И МД	137

МОДЕРНИЗАЦИЯ СТАНЦИИ РТ-МТ (КАНАЛ 1.6 СИНХРОТРОНА КИСИ-КУРЧАТОВ).....	138
ПРОБЛЕМА УЧЕТА ДИХРОИЗМА И ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ ПРИ ОБРАБОТКЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ДИФРАКЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ.....	139
ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ НОВЫХ ГИПСОВЫХ КОМПОЗИТОВ	140
DSSNA: АЛГОРИТМ АНАЛИЗА ВТОРИЧНОЙ И ТРЕТИЧНОЙ СТРУКТУРЫ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В ТРАЕКТОРИЯХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	141
ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИТИТАНАТОВ КАЛИЯ И МАКСЕНОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ИОНАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ	143
ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР ДЛЯ КОМПАКТНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ DARIA: МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ	144
НЕЙТРОННАЯ СТРЕСС-ДИФРАКТОМЕТРИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЦИРКОНИЕВЫХ КАНАЛАХ СУЗ РБМК	145
ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ ГЕКСАФЕРРИТА БАРИЯ $BaFe_8Al_4O_{19}$	147
ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ТОНКОЙ ПЛЁНКИ Tb С ГЕЛИКОИДАЛЬНЫМ МАГНИТНЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ.....	149
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «СЕРИЙНАЯ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ» НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 4-ГО ПОКОЛЕНИЯ «СИЛА»	150
<i>IN SITU</i> ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ $6H-SiC(0001)$ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ РЕЗИСТИВНОМ ОТЖИГЕ	151
О СИСТЕМЕ КОРРЕКЦИИ ЗАМКНУТОЙ ОРБИТЫ ДЛЯ ПРОЕКТА СИЛА	152
ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ РЕШЁТКИ «а» И «с» В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЁНКАХ $FeRh$ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ AFM-FM....	153
СТРУКТУРНЫЕ И ЯМР-ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ СПЛАВА КОБАЛЬТ-МЕДЬ.....	154
МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОПРОВОЛОКИ ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ: СИНТЕЗ И МИКРОСКОПИЯ.....	155
ЭФФЕКТИВНАЯ ИММОБИЛИЗАЦИЯ ^{137}Cs С ПОМОЩЬЮ ДВУХКАТИОННЫХ ТИТАНОСИЛИКАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МИКРОВОЛНОВЫМ СИНТЕЗОМ	156
РЕНТГЕНООПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	158
НАНОЧАСТИЦЫ ОКСИДА ЦИНКА ДОПИРОВАННЫЕ Sm и Eu : ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА.....	159
ШИРОКОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ В ГЕОМЕТРИИ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ: ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЛОЕВ МЕЛЬДОНИЯ В ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ.....	161

РАЗРАБОТКА ПРОТОТИПА РАДИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИД-СО-ГЛИКОЛИДА С ЗАГРУЖЕННЫМ НЕРАДИОАКТИВНЫМ ИЗОТОПОМ ЭРБИЯ (III).....	163
ВЛИЯНИЕ ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ НА ТЕПЛОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ	164
ФОРМУЛЫ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ПО ТОЛЩИНЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ	165
УЧЕТ ФОНА В НЕЙТРОННОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ С 2D ПОЗИЦИОННОЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ ДЕТЕКТОРОМ	166
ВОЗМОЖНОСТИ СИНХРОТРОННЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ МАКРОМАСШТАБА ДО КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ.....	167
ВЛИЯНИЕ БУФЕРНОЙ Si-ВСТАВКИ НА СТРУКТУРУ МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛ Ti/Ni РАЗНОЙ КОНФИГУРАЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН	168
ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАЛЬНЫХ ПЛАСТИНАХ ПОСЛЕ ДРОБЕУДАРНОЙ ОБРАБОТКИ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ	169
РОЛЬ МЕТОДОЛОГИИ В ОПРЕДЕЛЕНИИ МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ДОПАНТОВ В КРУПНОМАСШТАБНЫХ КРИСТАЛЛАХ $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}:\text{Co}$	170
ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ КСЕНОНА, ОБРАЗОВАННЫХ В КРЕМНИИ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПУЧКАМИ С ЭНЕРГИЯМИ 5 и 8 кэВ.....	171
ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДНОЙ ФАЗЫ ШЕВРЕЛЯ $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$	172
ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА 2D ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДА NbSe_2I_2	173
ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА ТРЕХМЕРНОГО ПОЛЯ ОНДУЛЯТОРА НА ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ.....	174
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МИКРОСКОПИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ (РЭМ, АСМ) В ИССЛЕДОВАНИЯХ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ГОРНЫХ ПОРОД ПРИ ДИНАМИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ	175
ПОЛИМОРФИЗМ ТОНКИХ ПЛЕНОК SrTe НА РАЗЛИЧНЫХ ПОДЛОЖКАХ....	176
СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ НЕПТУНИЯ В ВОДНЫХ И ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРАХ ИЗ ДАННЫХ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ.....	177
РОЛЬ ПОВЕРХНОСТНОГО ОКСИДА ПРИ ДИФФУЗИИ ЦИНКА В ПОДЛОЖКУ GaSb	178
СЛОИСТЫЕ ФОСФАТЫ КАЛЬЦИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ БИОАКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ	179
DEERFIT: ФИЗИЧЕСКИ И ХИМИЧЕСКИ ОБУСЛОВЛЕННЫЙ АНАЛИЗ XAS- СПЕКТРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ	180

ПОРОШКОВАЯ ДИФРАКЦИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СКАНИРУЮЩЕГО 2D-ДЕТЕКТОРА НА СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» СИНХРОТРОНА «КИСИ-КУРЧАТОВ».....	181
КЛЕТКИ БАКТЕРИЙ КИШЕЧНОЙ ПАЛОЧКИ <i>E.coli</i> КАК ИСТОЧНИК БИОНАНОГИБРИДНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ БЕЛКА Dps: СИНХРОТРОННЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	182
ТЕКУЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ОБЗОР ЯРКИХ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫЕ В 2024/2025 ГОДАХ.....	183
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОГО СОСТАВА ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ ЛЕГИРОВАННЫХ ИТТРИЕМ И ЛАНТАНОМ МЕТОДОМ NEXAFS И ИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОНДЕНСАТОРАХ	184
ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА СОЕДИНИТЕЛЬНЫХ СЛОЕВ ФУНКЦИОНАЛ-ГРАДИЕНТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ И ВЫСОКОЛЕГИРОВАННОЙ СТАЛИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРОДИФРАКЦИИ НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	185
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕРНИЗАЦИИ СПЕКТРОМЕТРА ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ МИФИ	186
СТРУКТУРА ДЕЙТЕРИДОВ НА ОСНОВЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СО СТРУКТУРОЙ ФАЗЫ ЛАВЕСА C14	187
БЕТА-ЯМР СПЕКТРОМЕТР НА РЕАКТОРЕ НИЯУ МИФИ.....	188
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ АГРЕГАТОВ НАНОЧАСТИЦ SiO_2 И ЦЕТИЛТРИМЕТИЛАММОНИЯ БРОМИДА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ.....	189
ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛУЧЕННЫХ И АДДИТИВНО ОКРАШЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ CaF_2 МЕТОДАМИ РФЭС И КР-СПЕКТРОСКОПИИ	190
ГИДРИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ГАДОЛИНИЯ С ФУНКЦИОНАЛЬНЫМ СЛОЕМ ИЗ НИОБИЯ И КАТАЛИТИЧЕСКИМ СЛОЕМ ИЗ ПЛАТИНЫ.....	191
КОНЬЮГАТЫ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ AgCu С КВЕРЦЕТИНОМ В КОЛЛАГЕНОВОЙ МАТРИЦЕ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРА.....	192
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ЯДРА ЗЕМЛИ МЕТОДАМИ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....	193
НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИН, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ.....	194
ОТ КАПЛИ ДО ПУЧКА: ИИ-ОТБОР КРИСТАЛЛОВ.....	195
АВТОМАТИЧЕСКИЙ ВЫБОР МОДЕЛИ И БЫСТРЫЙ ПЕРВИЧНЫЙ АНАЛИЗ МУРР-ДАНЫХ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....	196
ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛСВЯЗЫВАЮЩИХ БЕЛКОВ СЕМЕЙСТВА S100 С ИЗОЛИРОВАННЫМИ МОДЕЛЯМИ КЛЕТОЧНЫХ МЕМБРАН	197

ЭВОЛЮЦИЯ СОСТАВА, СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С $M = Co, Ni$ ТИПА МВТС(C2) В ПРОЦЕССЕ «ДЕГИДРАТАЦИЯ – ГИДРАТАЦИЯ»	198
АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ МИКРОРЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗРУШЕНИЯ ОДНОНАПРАВЛЕННЫХ КОМПОЗИТОВ ПО СОПРЯЖЕННЫМ ДАННЫМ СЭМ И КОНФОКАЛЬНОЙ ЛАЗЕРНОЙ МИКРОСКОПИИ	199
ВАЛЕНТНОЕ СОСТОЯНИЕ КАТИОНОВ MN/CR/CO/CU В МНОГОЭЛЕМЕНТНЫХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ПИРОХЛОРАХ	200
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ОПОРНОГО СЛОЯ ГАДОЛИНИЯ В РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА ПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ Q- ДИАПАЗОНАХ	201
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ ЛИТИЙ-ИОННОГО АККУМУЛЯТОРА ДЛЯ СИНТЕЗА МАХ-ФАЗЫ НА ОСНОВЕ МАРГАНЦА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ	202
НОВЫЕ МОРФОМЕТРИЧЕСКИЕ И РЕНТГЕНОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ТКАНЕЙ СУСТАВОВ ПРИ ПОМОЩИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	203
СИНТЕЗ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ $Pt(II)$ И $Pd(II)$ С ГОМОЛОГАМИ ПИРИДИНА — ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ	205
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕГРАДАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ НЕТКАНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИКСОВ НА ИХ МОРФОЛОГИЮ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА С ПОМОЩЬЮ IN SITU РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ.....	206
МОНОКРИСТАЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В РАСШИФРОВКЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ $Te(IV)$ С ТЕТРАЭТИЛАММОНИЕМ	207
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ, ОБЛУЧЁННОГО ИОНАМИ КСЕНОНА НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ.....	208
МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ КАРБОКСИПЕПТИДАЗЫ Т С АНАЛОГАМИ ПРИРОДНЫХ СУБСТРАТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ QM/MM-МЕТАДИНАМИКИ..	209
IN SITU ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА АТОМАРНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ В УСЛОВИЯХ ТРАВЛЕНИЯ, СУБЛИМАЦИИ И ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА СЛОИСТЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕТАЛЛОВ	210
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $ErFe_2Mn_x$ ($x = 0; 0,2$) МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.....	211
МОНОКРИСТАЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В РАСШИФРОВКЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ХЛОРИДОВ И БРОМИДОВ $Te(IV)$ С ПИРИДИНОМ.	212
ВЫСОКОПРЕЦИЗИОННАЯ СИНХРОТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОСИСТЕМЫ Fe-Pt, СИНТЕЗИРОВАННОЙ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ.....	213

БЫСТРЫЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ЗАТВОР НА ОСНОВЕ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО МОНОХРОМАТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДАПТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ	214
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СВИНЦА ПОСЛЕ АДСОРБЦИИ НА СЛОИСТОМ ДВОЙНОМ ГИДРОКСИДЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА EXAFS	215
ВЫЯВЛЕНИЕ МОДУЛЯЦИЙ МЕЖПЛОСКОСТНЫХ РАССТОЯНИЙ КОРОТКОПЕРИОДНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ GaP_{1-y}As_y/GaP_{1-x}N_x МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ	216
МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ Si И SiO₂ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ В КРАЕВОМ РЕЖИМЕ	217
ОПТИЧЕСКАЯ СХЕМА СТАНЦИИ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОБЛАСТИ И ЕЕ РЕАЛИЗАЦИЯ В ТНК ЗЕЛЕНОГРАД	218
ФРАГМЕНТАЦИЯ ЛОКАЛЬНОГО АТОМАРНОГО ОКРУЖЕНИЯ С ЦЕЛЬЮ ЯВНОГО УЧЕТА ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ	219
ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ИСХОДНЫХ И ОБЛУЧЕННЫХ В РАСПЛАВЕ ПОЛИМЕР- ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ ПТФЭ/ПОБ И ПТФЭ/ПЭЭК	220
СИНТЕЗ И МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ.....	221
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЫСУШИВАНИЯ НА СОСТАВ НАНОЧАСТИЦ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ XPS И XANES.....	222
РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В СМЕКТИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙКАХ: ПЕРЕХОД ОТ КИНЕМАТИЧЕСКОГО К ДИНАМИЧЕСКОМУ РЕЖИМУ РАССЕЯНИЯ	223
ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ RFe₁₁Ti (R = Y, Gd) МЕТОДАМИ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ И МАГНИТНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ.....	224
КОРРЕКЦИЯ НЕЛИНЕЙНОСТИ СЧЁТА ЕДИНИЧНЫХ ФОТОНОВ ДЕТЕКТОРА НА БАЗЕ ПЗС-КАМЕРЫ ДЛЯ ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ.....	225
ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК ИЗ РАБОЧИХ ПЛАЗМЕННЫХ РАЗРЯДОВ ТОКАМАКА Т-15 МД	226
СТРУКТУРА ОЛИГОПЕПТИДАЗЫ В В КРИСТАЛЛИЗАЦИОННЫХ РАСТВОРАХ	227
МАГНИТНАЯ ВЯЗКОСТЬ И ЭФФЕКТ ТЕРМИЧЕСКОГО НАМАГНИЧИВАНИЯ В СПЛАВАХ Gd_{1-x}Sm_xCo₃Cu₂.....	228
РАСЧЕТ СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ ФОКУСИРУЮЩЕГО РЕНТГЕНОВСКОГО ЗЕРКАЛА ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ	229
РАЗВИТИЕ АППАРАТНОЙ БАЗЫ СТЕНДА РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ ИР-8.....	230
РЕНТГЕНОВСКИЕ И СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАФИТИЗИРОВАННЫХ БИОМАТЕРИАЛОВ.....	231

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВОДОРОДНОГО НАСОСА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ	232
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ОБЪЕМНЫХ ОБРАЗЦОВ ВЫСОКО- И НИЗКОАНИЗОТРОПНЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ МАГНИТНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ.....	233
ФОКУСИРОВКА ЭЛЕКТРОНОВ В ОНДУЛЯТОРЕ С ПЕРИОДОМ 27 ММ.....	234
СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА μ -ОКСОМОСТИКОВОГО ДИМЕРА ЖЕЛЕЗА (III) НА ОСНОВЕ ЛИГАНДА N,N'-ЭТИЛЕНБИС(3-МЕТОКСИ- САЛИЦИЛИМИНА).....	235
СТРУКТУРНАЯ ГОМОЛОГИЯ В РЯДУ RF_3 ($R = La-Lu$) ПО ПАРАМЕТРУ ГОМОЛОГИЧНОСТИ «КАТИОННЫЕ ПОЛИЭДРЫ».....	236
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОННОГО РАДИУСА t - И β -«псевдо $^{61}Pm^{3+}$ » С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОЛНОЙ ЭМПИРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИОННЫХ РАДИУСОВ ДЛЯ ТУГОПЛАВКИХ ФТОРИДОВ MF_m ($m=1, 2$) И RF_3 ($R = Sc, Y, La-Lu$)	237
ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПОЛИМОРФНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В «ПСЕВДО $^{61}PmF_3$ » С АНОМАЛИЕЙ ПЛОТНОСТИ	238
ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	239
ОСОБЕННОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ОБОГАЩЕННЫХ ГЕРМАНИЕМ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ge_{1-x}Si_x$ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА	240
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ МОНОХРОМАТОРА С ПЛОСКИМИ ДИФРАКЦИОННЫМИ РЕШЕТКАМИ ДЛЯ МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА	241
ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА, УПРАВЛЯЕМОГО АДАПТИВНЫМ ЭЛЕМЕНТОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ	242
РЕАЛИЗАЦИЯ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ С ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ ЧАСТИЧНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ВЫХОДА	243
GPU УСКОРЕНИЕ ПОДГОНКИ EXAFS СПЕКТРА ЭВОЛЮЦИОННЫМ АЛГОРИТМОМ.....	244
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЙ В Te-СОДЕРЖАЩЕМ РАСПЛАВЕ СОЛИ	245
ВЫСОКОУНИВЕРСАЛЬНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ ДИФРАКТОМЕТР ДЛЯ РЕАКТОРА ИРТ НИЯУ МИФИ	246
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СВОЙСТВ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ НАНОПРОВОЛОК, ПОЛУЧЕННЫХ МАТРИЧНЫМ СИНТЕЗОМ, ОТ СООТНОШЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ	247
СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $Co_{0.2}Mn_{1.8}VO_5$	248

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ И СТРУКТУРА НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА ОЛОВА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНО-ЭЛЕКТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	249
ДИФРАКЦИОННЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЪЕМНЫХ, ПОВЕРХНОСТНЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ОБЪЕКТОВ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ (EELFS)	250
РАЗРАБОТКА ПЕРВЫХ В РОССИИ КРЕМНИЕВЫХ КАСКАДНЫХ АДИАБАТИЧЕСКИХ ЛИНЗ ДЛЯ НАНОФОКУСИРОВКИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФРАСТРУКТУРЫ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»	251
КОМПЛЕКСЫ ПЛАТИНЫ (II) С НИТРО- И АРОМАТИЧЕСКИМИ N-ДОНОРНЫМИ ЛИГАНДАМИ И ИХ СТРУКТУРА.....	252
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ВЕЗИКУЛЯРНЫХ НАНОЛЕКАРСТВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ.....	253
XANESCONV: ПРОГРАММА ДЛЯ УЧЁТА УШИРЕНИЯ XANES-СПЕКТРОВ	254
РАСЧЁТ СПЕКТРОВ НЕЙТРОННОГО СПИНОВОГО ЭХА ПО ТРАЕКТОРИЯМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В GROMACS.....	255
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ ЯЧЕЙКА ДЛЯ СИНХРОТРОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ TDC SR 600	256
IN SITU СОЗДАНИЕ И АНАЛИЗ ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ МЕТОДОМ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.....	257
СТРУКТУРА ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	259
ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛЮМИНОФОРЫ ЛАНТАНОИДОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ.....	260
КОРРЕЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ СИСТЕМЫ Ti-Al.....	261
GISAXS НА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНКАХ (CoFeZr)_x(MgF₂)_{100-x}	262
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОСЕТИ CHGNet ДЛЯ РАСЧЕТА ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ Rh-СОДЕРЖАЩЕГО ЦЕОЛИТА ZSM-5	263

Секция

Функциональные материалы, катализаторы,
магнитные материалы

КАРКАСНЫЕ МЕТАЛЛОСИЛ- И ГЕРМСЕСКВИОКСАНЫ: ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРИРОВАНИЯ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ

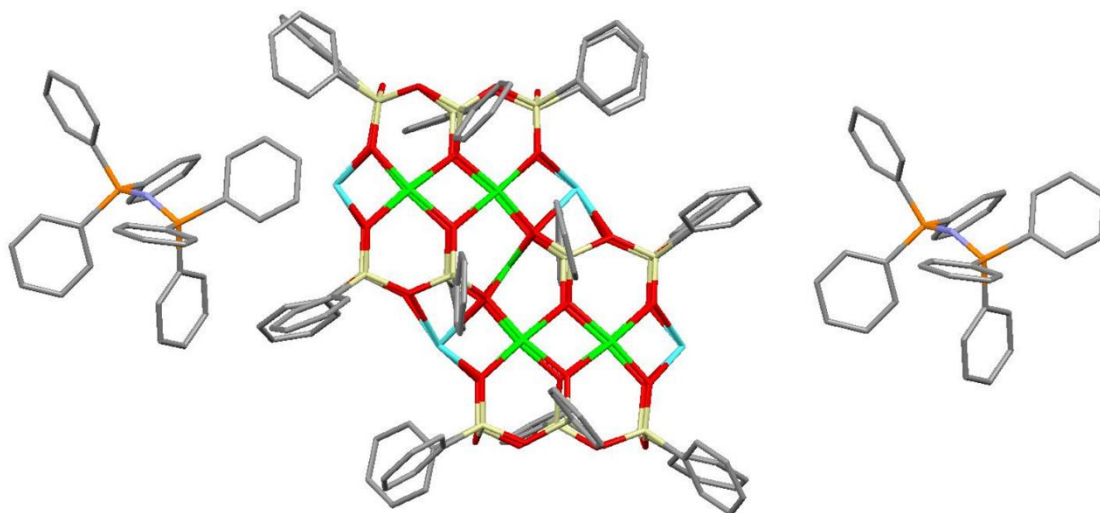
А.Н. Биляченко^{1,2}

¹ *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва*

² *Российский Университет дружбы народов*

Каркасные металлосил- [1] и гермсесквиоксаны [2] – металлокомплексы с уникальным разнообразием (супра)молекулярных архитектур и применений [3]. Структурное разнообразие этих соединений определяется удобством получения гибридных систем с дополнительными органическими лигандами и/или применения альтернативных синтетических методов, например, сольватотермальных [4]. В докладе будут представлены актуальные работы нашей группы по исследованию синтеза и строения металлосесквиоксановых комплексов, а также функциональных свойств – каталитических, люминесцентных и фунгицидных.

Исследования поддержаны проектом РНФ № 25-73-20040



1. M.M. Levitsky et al, J. Clust. Sci. 30, 1283 (2019)
2. M. M. Levitsky, A. N. Bilyachenko, E. S. Shubina, Coord. Chem. Rev. 386, 209 (2019)
3. A.N. Bilyachenko et al, Synthesis and Applications in Chemistry and Materials, 2024, 11, 245 (2024) (book chapter)
4. Q. Shen, K. Sheng, Z.-Y. Gao, A. Bilyachenko et al, Inorg. Chem., 63, 13022 (2024)

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ И ПЛАТИНЫ

И.А. Якушев¹, М.В. Панина^{1,2}, Е.А. Сосунов^{1,2}

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

²Российский химико-технологический институт им. Д.И. Менделеева, Москва

Синтез новых каталитически активных материалов является важной задачей современной химии в связи с широким применением каталитических процессов в современной промышленности. Использование биметаллических катализаторов открывает новые возможности для управления процессами подготовки катализаторов [1], при этом одним из вариантов получения биметаллических систем является использование заранее полученных карбоксилатных координационных соединений металлов платиновой группы общей формулы $[M_1M_2(OOCMe)_x]$ со структурой «китайского фонарика», которые могут быть подвергнуты термолизу в мягких условиях [2], и не содержат каталитических ядов и трудноудаляемых элементов (S, P, галогенов).

В настоящей работе продемонстрированы возможности получения биметаллических и триметаллических карбоксилатных соединений Pd(II) (Рис. 1), Pt(II) (Рис. 2,3) с переходными, постпереходными, непереходными металлами [3], пригодными для использования в качестве предшественников нанесенных гетерогенных катализаторов парциального гидрирования тройных связей, и показана возможность их использования в гомогенно-каталитических реакциях.

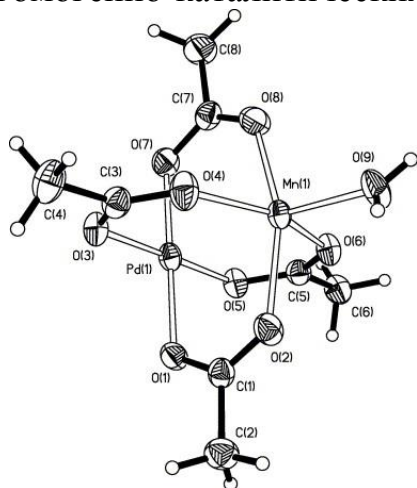


Рис. 1. $[PdMn(OOCMe)_4]$

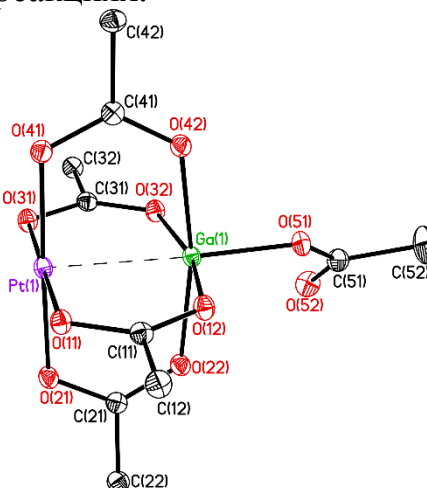


Рис. 2. $[PtGa(OOCMe)_5]$

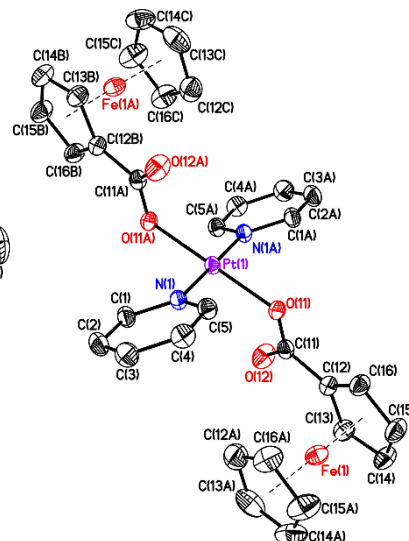


Рис. 3. $[PtPy_2(OOCFc)_2]$

1. O.G. Ellerta, M.V. Tsodikov, et al., Russ. Chem. Rev. 718, 83 (8), (2014).
2. N.S. Smirnova, E.V. Khranov, et al., Intermetallics, 132, (2021).
3. I.A. Yakushev, I.P. Stolarov, et al., Inorg. Chim. Acta, 508, (2020).

КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ИЗ ДИФфуЗНОГО РАССЕЯНИЯ

С. Вахрушев¹, Ю. Бронвальд¹, К. Петрухно¹, С. Реймерс²

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

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург

Во всех перовскитоподобных сегнетоэлектриках наблюдается взаимодействие между мягкой поперечной оптической и поперечной акустической модами. Это взаимодействие приводит к перенормировке частот этих мод и смешиванию их собственных векторов при значениях приведенного волнового вектора $q \neq 0$. При этом корректная интерпретация результатов неупругого рассеяния становится затруднительной, ввиду необходимости учета как действительной, так и мнимой части потенциала взаимодействия. Использование диффузного рассеяния нейтронов или рентгеновского излучения упрощает проблему, поскольку мнимая часть не влияет интегральное по энергии рассеяние. Кроме того, диффузное рассеяние может быть измерено в широкой области обратного пространства, что позволяет совместно анализировать данные, относящиеся к различным зонам Бриллюэна.

Нами исследовано диффузное рассеяние синхротронного излучения (СИ) твердых растворах $\text{PbZr}_{0.976}\text{Ti}_{0.024}\text{O}_3$ (PZT2.4) и $(\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3)_{1-x}(\text{Pb}(\text{Sc}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3)_x$ (PMN-PSN) в центре зоны Бриллюэна (ЗБ), где наблюдается мягкая поперечная оптическая (ТО) мода и в окрестности М-точки ЗБ, где наблюдается мягкая антиферродисторсионная (АФД) [1] мода, связанная с разворотами кислородных октаэдров. Проведенные ранее измерения неупругого рассеяния СИ в соединениях группы PbZrO_3 позволили построить дисперсионные кривые поперечной акустической (ТА) моды, взаимодействующей с оптической, однако проследить за поведением ТО моды не удалось. На основании измерений диффузного рассеяния нами в PZT2.4 и были получены дисперсионные кривые для ТО и ТА мод в PMN-PSN, прослежена их температурная эволюция, определены критические температуры.

Измерения рассеяния в окрестности М-точки, также позволило построить дисперсионные кривые для ТА и АФД мод. Удалось показать, что межмодовое взаимодействие может приводить к возникновению несоразмерной неустойчивости.

1. S.B. Vakhrushev, A.V. Filimonov, K.A. Petroukhno et al., *Materials*, v.15, 1 ArtNo: #79 (1-9) (2022).
2. A. K. Tagantsev, K. Vaideeswaran, S. B. Vakhrushev et al., *Nature Communications* 4(1) 2229(1-8) (2013)

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И КАТИОННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В СТРУКТУРЕ ЛЕГИРОВАННЫХ ФЕРРИТОВ (Zn, Cr, Co, Fe)₃O₄ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В БИМЕДИЦИНЕ

А.Д. Ковалев¹, М.А. Сёмкин^{2,3}, П.А. Борисова², И.В. Щетинин¹

¹ Университет науки и технологии МИСИС, Москва

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

³ Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

В последние годы ферриты со структурой шпинели привлекают всё большее внимание исследователей благодаря своему потенциалу в области биомедицинских применений. Их высокая биосовместимость, возможность варьировать состав за счёт катионного замещения, а также широкий выбор методов получения делают такие материалы особенно перспективными для использования в качестве агентов доставки лекарств, в магнитной гипертермии и в роли контрастных веществ для магнитно-резонансной томографии.

В настоящей работе исследованы оксидные материалы составов $\text{Zn}_x\text{Cr}_x\text{Co}_{0,5-x}\text{Fe}_{2,5-x}\text{O}_4$, где $x = 0,1; 0,2; 0,4$, полученные в результате механической активации и последующего отжига при температуре 1400 °С. По данным рентгеноструктурного анализа замещение цинком и хромом кобальтового феррита сопровождается изменением параметра решетки. Добавление диамагнитного иона цинка приводит к росту удельной намагниченности насыщения с максимумом при $x = 0,2$. Благодаря проведенной нейтронной дифракции, удалось объяснить катионное распределение по окта- и тетра-подрешеткам: цинк преимущественно занимает тетраэдрические позиции, тем самым увеличивает магнитный момент на формульную единицу в структуре с ферритмагнитным упорядочением. Хром преимущественно заселяет окта-позиции, его функция заключается в компенсации коэрцитивной силы, снижение которой вызвано добавкой диамагнитного цинка.

Наночастицы шпинелей были синтезированы в ходе высокоэнергетического измельчения в присутствии олеиновой кислоты и октадецена. Средний размер частиц определен по микрофотографиям просвечивающей электронной микроскопии и составил от 10 до 20 нм. Наблюдается уменьшение удельной намагниченности насыщения для всех образцов, обусловленное поверхностными эффектами. Испытания в переменном магнитном поле частотой 393,1 кГц и амплитудой 19,9 кА/м показали генерацию тепла во всех образцах, покрытых полимером Pluronic F127. Добавка цинка приводит к росту выделения тепла. Значения удельной мощности поглощения коррелируют с магнитными характеристиками наночастиц.

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{Co}_{2.19}\text{Mn}_{0.81}\text{VO}_5$

Р.М. Еремина¹, Д.И. Фазлижанова^{1,2}, Е.М. Мошкина,³

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН

² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

³ Институт физики им Л.В. Киренского

Оксибораты с общей формулой $\text{M}_2^{3+}\text{M}^{2+}\text{VO}_5$, где M^{3+} и M^{2+} – трех- и двухвалентные переходные металлы, в основном кристаллизуются в структуре людвигита (Pbam (55)). В этой структуре металлы занимают четыре неэквивалентные кристаллографические позиции, что создаёт возможность для появления разнообразных магнитных упорядочений.

В работе [1] магнитная структура $\text{Co}_{2.25}\text{Mn}_{0.75}\text{VO}_5$, была подробно изучена, и было установлено, что его основное магнитное состояние представляет собой спиновое стекло. Для более детального изучения магнитной структуры мы синтезировали $\text{Co}_{2.19}\text{Mn}_{0.81}^{11}\text{VO}_5$ с изотопом бора ^{11}B для проведения экспериментов по нейтронной дифракции. Соотношение переходных элементов было установлено с помощью рентген флуоресцентного анализа.

Нейтронная дифракция дает возможность установить как магнитную, так и кристаллическую структуру соединения, что и было сделано в данной работе. Кристаллическая структура, представленная на рисунке 1, показывает интересное неравномерное заполнение кристаллографических позиций ионами Co и Mn. Несмотря на то, что для $\text{Co}_{2.25}\text{Mn}_{0.75}\text{VO}_5$, спиновое стекло является основным магнитным состоянием, на низкотемпературной нейтронграмме можно увидеть пики, соответствующие магнитному рассеянию (рисунок 1).

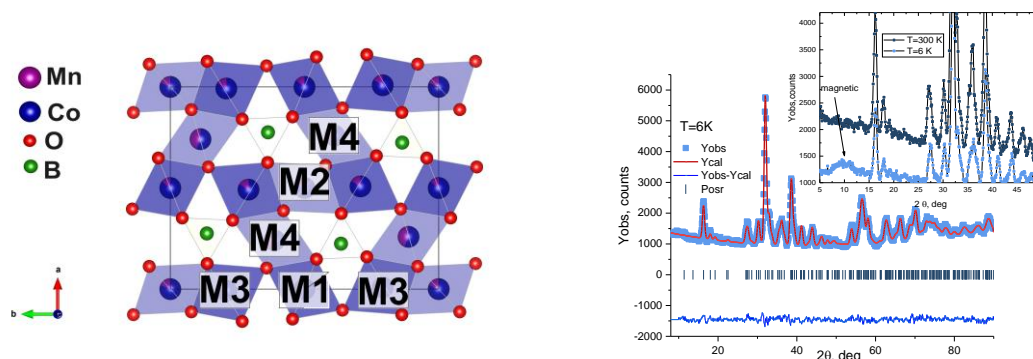


Рисунок 1 слева: кристаллическая структура людвигита $\text{Co}_{2.19}\text{Mn}_{0.81}\text{VO}_5$. Справа: экспериментальные данные и теоретическая обработка нейтронной порошковой дифракции

ИССЛЕДОВАНИЯ БИОГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ Dps КЛЕТОК E.coli МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МИКРОСКОПИИ, В ТОМ ЧИСЛЕ СИНХРОТРОННЫМИ

*С.Ю. Турищев¹, Е.А. Беликов¹, Е.В. Парина¹, О.А. Чувенкова¹,
Ю.С. Какулия¹, Р.Г. Чумаков², А.М. Лебедев², Е.Б. Пичкур², С.Ю. Требунских¹,
Е.В. Преображенская¹, В. Сиваков³, С.С. Антипов¹*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

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

³ Институт фотонных технологий, Йена, Германия

Комплексом методов рентгеновской и электронной спектроскопии и микроскопии, в том числе с использованием синхротронного излучения, были проведены исследования морфологии и физико-химического состояния клеток E.coli (BL21*(DE3), K12 MG1665), полученных из них молекул белка Dps, биогибридных структур на их основе. Установлены размеры и особенности морфологии биологических контейнеров – молекул белка бактериоферритина Dps, неорганических наночастиц в этих молекулах, содержащих атомы Fe, а также клеток E.coli – источника молекул. Показана специфика выделения молекулярной культуры Dps клетками E.coli в состоянии суперпродукции белка, специфика совмещения молекулярной культуры с 3D-развитой поверхностью массивов нитевидного кремния с целью ее адресной функционализации. Продемонстрирована применимость сверхвысоковакуумных методов XPS и XANES, спектромикроскопии PEEM для изучения биогибридных материалов на основе молекул белка Dps и клеток E.coli в комбинации с ионным удалением нанослоев. Показано наличие в наночастицах биогибридного материала атомов железа в различном зарядовом состоянии Fe^{3+} и Fe^{2+} и различной координации, а также возможность изменения состава наночастиц вплоть до восстановления железа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-00413 и поддержано Министерством науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ПОДТВЕРЖДЕНИЕ ГИПОТЕЗЫ СУЩЕСТВОВАНИЯ КВАЗИ-ОЦК НА ПРИМЕРЕ СПЛАВА Ti-Nb-Zr С ЕСТЕСТВЕННЫМ ЭЛИНВАРНЫМ ЭФФЕКТОМ: ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

*С.М. Дубинский¹, О.В. Страхов¹, Р.В. Сундеев¹, А.А. Скрипичникова¹,
А.А. Велигжанин², Е.В. Храмов², Н.А. Колышкин²*

¹ НИТУ «МИСИС»

² НИЦ «Курчатовский институт»

В 70-х годах XX века, было обнаружено, что ряд ОЦК металлов: титан, цирконий, гафний и уран - имеют аномально высокую скорость диффузии. Тогда же они были названы «необычными»-ОЦК металлами, однако понимание механизма, стоящего за таким диффузионным поведением, на тот момент отсутствовало. Позднее в начале XXI века в ходе создания потенциалов межатомного взаимодействия сплавов систем Zr-Nb и U-Mo, была выдвинута гипотеза о существовании квази-ОЦК решетки, в которой геометрическое среднее положение атомов совпадает с узлами ОЦК решетки, тогда как наиболее вероятное нахождение каждого атома в каждый момент времени находится вне узла этой кристаллической решетки. Данная гипотеза позволяет объяснить существование аномально высокой скорости диффузии в титане, цирконии, гафнии, уране и сплавах на их основе, а также экспериментально обнаруженное нетипичное естественное элинварное поведение в титановых сплавах, заключающееся в аномально низкой зависимости модуля упругости от температуры и не объясняющееся каким-либо ранее известным механизмом. Однако данная теоретически обоснованная гипотеза о существовании квази-ОЦК не имеет прямого экспериментального подтверждения. Для ее проверки было проведен прямой сравнительный EXAFS эксперимент на синхротроне в условиях сосуществования одновременного теоретически предсказанной квази-ОЦК решетки и ее физического проявления – естественного элинварного поведения на сплаве Ti-22Nb-6Zr (ат.%) и на чистом ниобии в качестве элемента сравнения. Предварительные результаты показали, что в отличие от чистого ниобия, локальная атомная структура сплава Ti-22Nb-6Zr не может быть описана моделью ОЦК решетки.

Эксперимент EXAFS выполнен на станции «Структурное материаловедение» уникальной научной установки Курчатовский специализированный источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов».

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-10041, <https://rscf.ru/project/25-73-10041/>

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ ОБРАЗЦОВ ТРУБ ИЗ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

*О.А. Крымская¹, М.Г. Исаенкова¹, М.И. Петров¹, П.А. Борисова²,
Н.Н. Исакова², А.И. Калюканов²*

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва*

² *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

Кристаллографическая текстура поликристаллических материалов представляет собой преимущественную ориентацию кристаллической решетки зёрен (кристаллитов) относительно внешней системы координат изделия. Параметры текстуры полностью определяют анизотропию различных физико-механических свойств, в т.ч. модулей упругости, коэффициентов линейного термического расширения, пределов текучести и др. [1, 2]. Использование дифракции нейтронов для исследования текстуры по сравнению с традиционными рентгеновскими или микроскопическими *EBSD*-методами позволяет увеличить исследуемый объем материала и повысить точность расчетов при прогнозировании свойств [3].

Основной фазой циркониевых сплавов, широко использующихся в качестве конструкционных материалов реакторов на тепловых нейтронах, является твердый раствор на основе α -Zr, обладающий анизотропной ГПУ структурой, поэтому исследование текстуры для таких изделий является особенно актуальными. На нейтронографической станции МОНД реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт» с помощью 2D-детектора проведены измерения дебаевских колец при различных углах наклона и поворота образцов размером 5×5×20 мм, вырезанных из канальной трубы реактора (сплав Zr-2.5%Nb). Для анализа результатов разработан скрипт в среде *MATLAB*, позволяющий конвертировать данные в серию фрагментов дифрактограммы, рассчитывать параметры их аппроксимации гауссианами, а положения образца пересчитывать в углы на прямых полюсных фигурах (ППФ). Проведено сравнение построенных ППФ с измеренными рентгеновским методом, методика [4] восстановления функции распределения зерен по ориентациям адаптирована к данным 2D-детектора.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-79-10289, <https://rscf.ru/project/24-79-10289/>)

1. H.J. Bunge. Texture Analysis in Materials Science (1982) 593 p.
2. U.F. Kocks, C.N. Tome, H.R. Wenk Texture and anisotropy. (1998) 675 p.
3. M.G. Isaenkova, O. A. Krymskaya, et al. Letters on Materials 13-4, 341-346 (2023).
4. M. Isaenkova, Yu. Perlovich, et al. IOP Conf. Series: Mat Sci Eng 130, 012056 (2016).

ПРИМЕНЕНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*Т.В. Кузнецова^{1,2}, В.И. Гребенников¹, Е.А. Пономарева¹, Р.Г. Чумаков³,
И.Э. Кантур¹, Д.В. Беляев¹, С.А. Маслова¹, Ю.М. Ярмошенко¹*

¹ ИФМ УрО РАН, Екатеринбург

² Уральский федеральный университет, Екатеринбург

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

В докладе рассматриваются несколько фундаментальных вопросов физики материалов. Один из них – наличие межатомного оже-перехода в рентгеновском диапазоне энергий. Теоретические оценки показывают, что вероятность такого процесса будет резонансно возрастать в соединениях с атомами с близкими по энергии уровнями. Электроны с узкого уровня с малой энергией связи (типа In 4d 17 эВ) сильно возбуждаются динамическим полем остовных дырок, возникающим в процессе фотовозбуждения атома и последующего безызлучательного распада, что увеличивает вероятность наблюдения межатомного оже-перехода. Исследованы эффекты встряхивания электронов под действием динамического поля фотодырки, измерены внутриатомные и межатомные оже-полосы большой протяженности ~ 150 эВ в халькогенидных материалах, измерены эффекты квантовой интерференции (типа Фано) процессов прямой и резонансной фотоэмиссии из валентной полосы на редкоземельных и переходных атомах в интерметаллических соединениях, гексаферритах, многокомпонентных халькогенидах с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Установлено, что магнитные моменты (спин) атомов определяют величину и ширину резонансных спектров. Эффекты определяются спином отдельного атома, а не средней намагниченностью. Особенно высокий коэффициент усиления и узкий резонанс наблюдается в атомах с наполовину заполненной f-оболочкой. В процессе резонансной фотоэмиссии может добавляться конкурирующий канал с возбуждением электрон-дырочной пары в валентной полосе с увеличением числа электронов. Это приводит к уширению спектра и ослаблению амплитуды резонанса.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №23-72-00067).

Секция

Теория, моделирование, вычислительные методы

МЕТОД ГРАНИЧНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СТРОГОГО АНАЛИЗА ИНТЕНСИВНОСТИ РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ НА ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТКАХ, МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛАХ И ЗОННЫХ ПЛАСТИНКАХ

Л.И. Горай^{1, 2, 3, 4, 5}

¹ СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 19702, Санкт-Петербург

² Академический университет им. Ж.И. Алферова РАН, 194021, Санкт-Петербург

³ Институт аналитического приборостроения РАН, 190103, Санкт-Петербург

⁴ Институт космических исследований РАН, 117997, Москва

⁵ ООО «НК-Метка», 195252, Санкт-Петербург

Метод граничных интегральных уравнений (в нашем случае модифицированный— МИМ) является, пожалуй, единственным строгим методом, который позволяет довольно легко определить дифракционную эффективность решеток с реальными профилями канавок (границами слоев) в любом спектральном диапазоне, благодаря характеру самого метода: за счет совпадения контура интегрирования для плотности поверхностного тока с физической поверхностью решетки [1]. В МИМ профиль канавки представляется не с помощью разложения в ряд, а с помощью точек дискретизации (коллокации), взятых на самой поверхности решетки. В таком подходе можно аккуратно учесть скачки функции граничного профиля и ее производной и точно вычислить функции Грина и их производные. Зная показатели преломления слоев, вместе это позволяет рассчитать дифракционную эффективность с точностью не хуже, чем данные измерений, полученные на источнике синхротронного излучения [2]. С помощью метода Монте Карло и линейных аппроксимаций было предложено обобщение МИМ для анализа интенсивности рассеяния дифракционных структур со случайной шероховатостью: многослойных решеток и зеркал; зонных пластинок; квантово-размерных систем типа сверхрешеток и квантовых точек; а также для неплоских падающих пучков и форм поверхности [3]. Среди недостатков разработанного подхода следует отметить математическую сложность метода, трудности алгоритмизации и программирования и большую ресурсоемкость.

В работе представлены теоретические основы МИМ, имплементированного в компьютерную программу PCGrateTM. На актуальных примерах продемонстрировано решение сложных задач коротковолнового рассеяния на решетках: (1) многослойных с реалистичной структурой интерфейсов в экстремальном УФ; (2) эшелле в высоких порядках в мягком рентгене; (3) в скользящей конической дифракции в жестком рентгене.

1. L.I. Goray, G. Schmidt, in *Gratings: Theory and Numerical Applications*, ed. E. Popov. 2nd rev. ed. (Institut Fresnel, AMU, 2014), Ch. 12.

2. D.L. Voronov, L.I. Goray, et al., *Opt. Express* 23(4), 4771–4790 (2015).

3. L.I. Goray, E.V. Pirogov, et al., *Mater. Sci. Semicond.*, 169, 107875 (2024).

О РЕШЕНИИ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ КВАДРАТИЧНЫХ ЗАДАЧ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ РАССЕЯНИЯ МОНОХРОМАТИЧЕСКИХ ВОЛН

М.А. Бочев

Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН

Рассмотрен класс параметрических квадратичных задач на собственные значения (СЗ), возникающих в моделировании рассеяния монохроматических волн. Этот класс задач необходимо решать в рамках недавно предложенного полигонального подхода [1] расчёта дифракции наноразмерных ламеллярных решёток произвольного профиля. Поскольку возникающая квадратичная задача на СЗ должна рассчитываться многократно для различных значений параметра (угла луча падения), стоит задача ускорения таких вычислений. Предлагаемый нами метод использует решения, рассчитанные при одном определённом значении параметра, для получения приближённых решений для соседних значений параметра. Представлены предварительные результаты тестовых расчётов, показывающие эффективность нового метода. Доклад основан на совместной работе автора с К.В. Николаевым, С.Н. Якуниным (НИЦ «Курчатовский институт») и Е.Е. Тыртышниковым (ИВМ им. Г.И. Марчука РАН).

1. Nikolaev, K. V., V., Soltwisch, M. A., Botchev, A. Fernández, Herrero, P., Hönicke, F., Scholze, S. N., Yakunin. "Polygon-based unified Fourier-modal approach for diffractive-optics simulations". *Phys. Rev. A*. (2025)

ДИФфуЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ШЕРОХОВАТОСТИ СТЕНОК ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР

К.В. Николаев

*НИИ «Курчатовский институт», Москва
Московский физико-технический институт, Долгопрудный*

Одним из важных аспектов разработки методов синтеза наноструктуры является контроль морфологии шероховатости структуры. Вместе с усложнением архитектуры наноприбора, усложняется и метрологическая задача анализа шероховатости. Эта задача решена сполна для планарных наноструктур. Для исследования морфологии шероховатости в этом случае подходит метод малоуглового рентгеновского рассеяния в геометрии скользящего падения (GISAXS - grazing-incidence small-angle X-ray scattering). Метод чувствителен к амплитуде шероховатости, к фрактальной размерности и к длине корреляции (вертикальной и латеральной) как для внутренних переходных слоёв так и для поверхности. Причём, в случае поверхности результаты метода валидируются данными сканирующей зондовой микроскопии [1]. Если, однако, рассматривать наноструктуры со сложной двухмерной и трёхмерной архитектурой задача усложняется. Согласно программе развития микроэлектроники международного института IEEE [2], метрологическая проблема для шероховатости стенок сложных наноструктур может быть решена также в рамках метода GISAXS, единственное препятствие это отсутствие адекватной теории. Тем не менее, чувствительность GISAXS в случае периодических наноструктур продемонстрирована на эксперименте [3] и проблема сводится к разработке теории.

В докладе мы рассмотрим некоторые начальные соображения к моделированию диффузного рассеяния на шероховатости стенок сложных периодических наноструктур. Наши разработки основываются на применении теории возмущения и фурье модального метода для прямого моделирования рентгеновской дифракции. Теоретические соображения и первые экспериментальные данные будут представлены в докладе.

1. N. I. Chkhalo, S. A. Churin, A. E. Pestov, N. Salashchenko, Y. A. Vainer, and M. V. Zorina, "Roughness measurement and ion-beam polishing of super-smooth optical surfaces of fused quartz and optical ceramics," *Opt. Express*, vol. 22, pp. 20094–20106, Aug 2014.
2. IEEE International Roadmap for Devices and Systems, [online] Available: <https://irds.ieee.org/editions/2023> (2023)
3. Fernández Herrero, A., Pflüger, M., Probst, J., Scholze, F., & Soltwisch, V. (2017). Characteristic diffuse scattering from distinct line roughnesses. *Journal of Applied Crystallography*, 50(6), 1766–1772.

БАЗОВЫЕ АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ: МЕТОДЫ ПРОСТРАНСТВЕННОГО НАЛОЖЕНИЯ

А.И. Титов¹, А.Л. Коневега^{1,2,3}, А.В. Швецов^{1,2,3}

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина*

²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург*

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

Молекулярное моделирование (ММ), расчёт молекулярной динамики (МД) и анализ полученных данных — это относительно новые научные направления, которые ещё не получили широкого распространения в научном сообществе. Эти области находятся на стыке физики, математики, биологии и информационных технологий, то есть являются в широком смысле междисциплинарными. За последние 20 лет в этих направлениях был достигнут значительный прогресс, были разработаны и апробированы множество методов и подходов.

Большинство современных программных пакетов (ПП), работающих с данными ММ, предлагают функцию пространственного наложения[1], а также рассчитывают стандартные характеристики, такие как RMSD, RHO, RHOSC[2] и другие, при этом первый этап анализа — непосредственное наложение структур — часто реализуется субъективно, без подробного описания используемых методов. В ряде случаев применяются устаревшие алгоритмы, что приводит к несогласованности результатов. Например, вычислительные результаты одних и тех же метрик могут различаться в зависимости от выбранного ПО.

В связи с этим нами предложен новый алгоритм пространственного наложения, реализованный в программном обеспечении с открытым кодом GROMACS[3]. Эта реализация включает актуализированную версию ранее известного алгоритма из GROMACS, а также два новых метода. Пользователь получает возможность выбора метрики оптимальности наложения, при этом все алгоритмы гарантируют неухудшение преобразованных данных.

Работа была выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500033-1-1.6.7;1.6.4;1.6.8 Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика.)

1. W. Kabsch. A discussion of the solution for the best rotation to relate two sets of vectors. Acta Cryst. 1978 A34, 827-828
2. Maiorov VN, Crippen GM. Size-independent comparison of protein three-dimensional structures. Proteins. 1995
3. M.J. Abraham et al. SoftwareX, 1–2 (2015), pp. 19-25

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФРАКЦИИ НА РЕШЕТКАХ

А.А. Щербаков¹

¹ Университет ИТМО, Физико-технический мегафакультет

Дифракционные решетки для различных областей электромагнитного спектра играют огромную роль во множестве приложений. Одной из основных сложностей при моделировании дифракции является выполнение высокоточных и эффективных расчетов дифракционных эффективностей в случаях, когда требуется получать строгие решения уравнений Максвелла с учетом свойств материалов решетки. В докладе будет дан обзор результатов по решению интегральных уравнений для электромагнитного поля проекционным методом Фурье в криволинейных системах координат, адаптированных под профиль решеток, с применением малоранговых тензорных аппроксимаций, а также будет представлена новая формулировка Фурье-модального метода [1-3].

Работа над развитием численных методов выполняется при поддержке гранта Российского научного фонда 22-11-00153-П.

1. A. A. Shcherbakov, and A. V. Tishchenko, Opt. Express. 21, 25236 (2013).
2. S. Spiridonov, and A. A. Shcherbakov, J. Comput. Sci. 67, 101936 (2022).
3. E. Lecdik, and A. A. Shcherbakov, Comp. Phys. Commun. 310, 109530 (2025).

ПРИМЕНЕНИЕ БАЙЕСОВСКОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

*П.С. Савченков¹, К.В. Николаев¹, В. И. Боднарчук^{1,2}, А.В. Белушкин^{1,2},
С.Н. Якунин¹*

¹*НИИЦ «Курчатовский институт», Москва*

²*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

savch92@gmail.com

Нейтронная рефлектометрия (НР) зарекомендовала себя как уникальный метод исследования поверхностей и слоистых наноструктур. Особую ценность представляет рефлектометрия поляризованных нейтронов, предоставляющая расширенные возможности для изучения магнитных свойств материалов. Несмотря на достижения в области НР, восстановления профиля плотности рассеяния (ПДР) из экспериментальных данных остается сложной задачей. Традиционные методы, основанные на прямой модели и оптимизации, часто сталкиваются с проблемой неоднозначности решения, особенно при анализе данных с невысоким отношением сигнал/шум, что типично для экспериментов РПН. В связи с этим, разработка и применение новых подходов к анализу данных РПН, способных учитывать мультимодальность решений и эффективно работать в условиях ограниченной статистики, представляется весьма актуальной задачей.

Для решения проблемы восстановления структуры тонкой пленки TbCo в условиях потенциальной мультимодальности применен Байесовский подход с использованием алгоритма Монте-Карло Марковских цепей (МСМС). В отличие от традиционных детерминистических методов, МСМС позволяет исследовать пространство параметров модели и оценить вероятность различных структурных решений, что особенно важно для данных РПН, характеризующихся невысоким отношением сигнал/шум. Байесовский анализ, в сочетании с МСМС, дает возможность получить не только наиболее вероятную модель структуры, но и оценить ее неопределенность, а также выявить возможные альтернативные решения, описывающие экспериментальные данные с сопоставимой вероятностью.

Анализ данных экспериментов по рефлектометрии поляризованных нейтронов с использованием Байесовского подхода и алгоритма МСМС выявил два статистически значимых решения, указывающих на несколько вариантов восстановленной структуры тонкой пленки Tb_{0.03}Co_{0.97}. Таким образом развиваемый подход продемонстрировал преимущества точного анализа данных нейтронной рефлектометрии при низкой статистической обоснованности эксперимента и будет использован в дальнейшем для анализа экспериментов с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8.

ИИ АГЕНТЫ И ВАЛИДИРОВАННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ БИБЛИОТЕКИ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

*Б.О. Проценко¹, М.С. Лифарь¹, Г.О. Асатуров¹, Д.И. Куприяненко¹,
Н.С. Чубков¹, К.Д. Кулаев¹, Г.Д. Кочиев¹, А.А. Гуда¹, С.А. Гуда^{1,2},
А.А. Алпатов², А.В. Солдатов¹*

¹ *Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов
Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/242*

² *Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича
Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Мильчакова, 8-А*

Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS) — ключевой метод исследования локальной атомной и электронной структуры материалов в условиях *in situ* и *operando*. Однако её количественный анализ остаётся сложной обратной задачей, требующей привлечения эталонных спектров и экспертных знаний. Мы представляем новый подход к автоматизированному анализу XAS-данных на основе агентов с большими языковыми моделями (LLM), объединяющий валидированные экспериментальные и теоретические базы спектров с инструментами машинного обучения.

Разработанный ИИ-агент интегрирует накопленные знания из научной литературы (в том числе посредством RAG по сотням статей и учебников по тематике), несколько тысяч экспериментальных эталонных спектров (включая расширенную базу MDR и собственные данные) и 67 тысяч теоретических спектров, а также программные инструменты для работы со спектроскопией рентгеновского поглощения с акцентом на машинное обучение (PyFitIt). Агент реализован в виде Telegram-бота. Это позволяет автоматизировать обработку спектров (нормализация, EXAFS, анализ предкрая и тд.), их количественный анализ и интерпретацию результатов. Особое внимание уделено валидации экспериментальных данных для структур из баз CSD/ICSD. Созданные базы данных содержат спектры с аннотацией ключевых дескрипторов структуры (координационное число, заряд металла, тип окружения). Представлены результаты тестирования агента на реальных задачах, а также бенчмарк для этих целей. Это позволяет сделать первые шаги по стандартизации и автоматизации анализа данных спектроскопии рентгеновского поглощения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2025-509 от 30.05.2025 г.

1. Martini, A.; Guda, S.A.; Guda, A.A.; Smolentsev, G.; Algasov, A.; Usoltsev, O.; Soldatov, M.A.; Bugaev, A.; Rusalev, Yu.; Lamberti, C.; et al. PyFitit: The Software for Quantitative Analysis of XANES Spectra Using Machine-Learning Algorithms. *Computer Physics Communications* 2020, 250, 107064, doi:10.1016/j.cpc.2019.107064.

ИЗУЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕХАНИЗМА ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ

А.А. Корлюков

*ФБГУН Институт элементоорганических соединений
им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия
119334, Россия, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1*

Кристаллическая структура органических соединений независимо от размера и сложности молекул подчиняется одним и тем же общим закономерностям. Вместе с этим, детальный анализ строения кристаллов активных фармацевтических субстанций и их комплексов с белковыми макромолекулами, основанный на рентгеноструктурных данных, требует привлечения дополнительных экспериментальных и теоретических подходов. Доклад посвящен анализу результатов комбинированных рентгенодифракционных и теоретических исследований, выполненных автором для выявления особенностей строения кристаллов, содержащих молекулы активных фармацевтических субстанций (включая многокомпонентные структуры) и сопоставления их с кристаллографическими данными для комплексов типа «лиганд-рецептор».

Основная методология работы заключается в получении экспериментальной или расчетной функции распределения электронной плотности и ее изучении при использовании квантово-топологической теории «Атомы в молекулах» Р. Бейдера (QTAIM) и связанных с ней теоретических подходов (метод NCI). Это позволило выявить и охарактеризовать межмолекулярные взаимодействия в кристаллах активных фармацевтических субстанций и их комплексов с биомacroмолекулами. Особое внимание уделено оценке прочности отдельных межатомных взаимодействий, получение на основе этой информации данных об энергии кристаллической решетки или о прочности комплекса «лиганд-рецептор» и сравнении с имеющимися экспериментальными величинами (энергия комплексообразования, свободная энергия растворения, энтальпия сублимации). Рассмотрено применение ряда подходов к уточнению рентгенодифракционных данных (мультипольное разложение функции электронной плотности, асферические структурные факторы, квантовохимическое моделирование кристаллов) для улучшения качества структурных моделей. Показано, что использование топологических методов (QTAIM, разбиений Вороного и Хиршфельда) позволяет дать как качественное, так и полуколичественное описание таких характеристик молекул как гидрофобность (гидрофильность) и комплиментарность.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (гранты 20-13-00241 и 25-73-20072).

Секция

Эксперименты In-situ, in-operando, накачка-
зондирование

СИНХРОТРОННЫЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ *in operando* НА ПРОТОТИПАХ ПЕРСПЕКТИВНЫХ УСТРОЙСТВ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И СПИНТРОНИКИ

А.В. Зенкевич

Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)

В докладе будет рассмотрена разработанная методология и результаты исследований *in operando* спектроскопическими методами (НАXPES, MCDAD, XMCD, Мёссбауэровская спектроскопия) взаимосвязи между физическими и функциональными свойствами в прототипах перспективных устройств микроэлектроники и спинтроники, в том числе, устройств резистивной [1] и сегнетоэлектрической [2-4,8] памяти на основе (легированного) HfO_2 , а также композитных мультиферроиков на основе бислойных структур ФМ\СЭ (ФМ= Ni , ^{57}Fe , EuS , СЭ= $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$) [5-7].

1. Yu. Matveyev et al. Effect of biasing at elevated temperature on the electronic structure of Pt/ HfO_2 /Si stacks. *Microelectronic Engineering*. 88, 1353 (2011).
2. Yu. Matveyev et al. Effect of Polarization Reversal in Ferroelectric $\text{TiN}/\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2/\text{TiN}$ Devices on Electronic Conditions at Interfaces Studied *in Operando* by Hard X-ray Photoemission Spectroscopy. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 9, 43370 (2017).
3. V. Mikheev et al. Ferroelectric Second-Order Memristor. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 11, 32108 (2019).
4. Yu. Matveyev et al. Polarization-dependent electric potential distribution across nanoscale ferroelectric $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ in functional memory capacitors. *Nanoscale*. 11, 19814 (2019).
5. Khanas et al. $\text{EuS}/\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Bilayers as a Prospective Multiferroic System. *Adv. Materials Inter.* 7, 2000411 (2020).
6. Dmitriyeva et al. Magnetoelectric Coupling at the $\text{Ni}/\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Interface. *ACS Nano*. 15, 14891 (2021).
7. V. Mikheev et al. Search for Magnetoelectric Coupling at the $^{57}\text{Fe}/\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Interface Using Operando Synchrotron Mössbauer Spectroscopy. *Adv. Materials Inter.* 9, 2201341 (2022).
8. Chouprik et al. Effect of Domain Structure and Dielectric Interlayer on Switching Speed of Ferroelectric $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Film. *Nanomaterials*. 13, 3063 (2023).

OPERANDO ДИФРАКЦИОННЫЕ И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕТАЛЛ- ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

С.С. Федотов¹

¹ Сколковский институт науки и технологий (Сколтех), Москва

s.fedotov@skoltech.ru

Металл-ионные аккумуляторы играют ключевую роль в современном энергопереходе, обеспечивая работу портативной электроники, электромобилей и систем накопления энергии. Их эффективность в первую очередь определяется свойствами активных компонентов, электродных материалов, в которых происходят процессы де/интеркаляции ионов. Понимание структурных превращений и механизмов компенсации заряда в этих материалах является основой для повышения ёмкости, стабильности и долговечности аккумуляторов. Современные синхротронные и нейтронные методы позволяют напрямую наблюдать эти процессы и устанавливать связь между структурой и электрохимическим поведением.

В настоящей работе с использованием *operando* и *ex situ* рентгеновской дифракции и спектроскопии, а также нейтронной дифракции проведено прецизионное исследование кристаллической структуры, механизмов структурной эволюции и компенсации заряда в ряде перспективных материалов. Рассмотрены оксоанионные материалы: литий-обогащенные $\text{Li}_{1+x}(\text{Fe}, \text{Mn})_{1-x}\text{PO}_4$ (LFMP) [1] и фосфаты KTiOPO_4 (КТР) с общей формулой AMPO_4X ($\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$; $\text{M} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Mn}$; $\text{X} = \text{O}, \text{F}$) [2-4], а также гексацианометаллаты $\text{K}_{2-\delta}\text{M}^{\text{I}}[\text{M}^{\text{II}}(\text{CN})_6]_{1-\gamma}$ ($\text{M}^{\text{I}}, \text{M}^{\text{II}} = \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Co}$) [5], известные как аналоги берлинской лазури (АБЛ). Совокупный анализ данных позволил установить связь между составом, механизмом де/интеркаляции и электрохимическими свойствами, что открывает возможности для направленной модификации электродных материалов нового поколения.

В докладе будут представлены результаты комплексных исследований новых и модифицированных электродных материалов для металл-ионных аккумуляторов, рассмотрены особенности кристаллической и электронной структуры и обсуждены перспективы использования синхротронных и нейтронных методов в разработке материалов для систем хранения энергии.

Работа поддержана РНФ (грант 23-73-10125).

1. E. E. Nazarov, A. D. Dembitskiy, I. A. Trussov, et al. *Energy Adv.*, 328, 2 (2023).
2. S. S. Fedotov, N. D. Luchinin, et al. *Nat. Commun.* 1484, 11 (2020).
3. S. D. Shraer, N. D. Luchinin, et al. *Nat. Commun.* 4097, 13 (2022).
4. S. D. Shraer, A. D. Dembitskiy, et al. *Energy Storage Mater.*, 103358, 68 (2024).
5. P. A. Morozova, S. V. Ryazantsev, et al. *Chem. Mater.* 3570, 35 (2023).

ИНСТРУМЕНТЫ ДЛЯ СКРИНИНГА И ОПТИМИЗАЦИИ ПАРАМЕТРОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ: ПЕРЕХОД К САМОУПРАВЛЯЕМЫМ ЛАБОРАТОРИЯМ

*А.А. Гуда¹, А.Д. Загребаев¹, И.А. Панкин, Д.Ю. Молодцов, А.А. Терещенко,
А.П. Баглий, А. Маннаа, М.С. Лифарь, БО. Проценко, М.А. Марченкова,
С.А. Гуда, А.В. Солдатов*

¹Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов ЮФУ

²НИЦ «Курчатовский институт»

Развитие инструментов компьютерного моделирования и анализа больших данных ускорило цикл цифрового дизайна материалов с вычислением механических, электронных, магнитных и других свойств для известной атомной структуры с часов или дней до секунд. Это позволяет быстро решать обратную задачу поиска структуры материалов, обладающих целевыми свойствами. Однако скорость получения самих материалов на практике существенно ниже, что объясняется отставанием в развитии инструментов высокопроизводительного синтеза и *in situ* диагностики атомной структуры и свойств получаемых материалов. В настоящем докладе рассмотрен подход для подбора параметров химических реакций на источниках СИ.

Первый класс рассматриваемых задач относится к задачам кристаллизации из раствора: рост наночастиц благородных металлов (Au, Ag, Pt), сборка твёрдых липидных наночастиц, кристаллизация белков, формирование металлоорганических каркасных структур – в микрофлюидных условиях. В качестве методов диагностики показаны УФ-видимая спектроскопия, динамическое рассеяние света, рентгеновское рассеяние в режимах малых и широких углов.

Второй класс задач – формирование активных центров катализаторов, структура которых определяет активность и селективность реакций получения целевых продуктов. На примере реакции гидроформилирования рассмотрены гомогенные катализаторы на основе комплексов родия. С помощью спектроскопии рентгеновского поглощения за К-краем родия определена геометрия локального атомного окружения металла в различных реакционных условиях под давлением синтез газа и повышенных температурах. Определена взаимосвязь структура-каталитическая активность.

Наработки коллектива авторов в настоящее время используются при вводе в эксплуатацию станции МУР на источнике КИСИ. В докладе освещается текущее состояние работ и планы по развитию инфраструктуры как для *in situ* диагностики, так и для количественного анализа данных на лету в ходе экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2025-509)

1. A.A. Tereshchenko et al., Chemical Engineering Journal 498, 15, 155016 (2024)
2. L. Lätsch, S.A. Guda, et al, J. Am. Chem. Soc., 146, 11, 7456–7466 (2024)
3. D.N. Gorbunov, M.V. Nenasheva et al., Journal of Catalysis Vol. 428, 115194 (2023)
4. V.V. Shapovalov, S.V. Chapek, et al., Micro and Nano Engineering, 20, 100224 (2023)

СОВРЕМЕННЫЕ IN-SITU МЕТОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРО- И НАНО-ФОКУСНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Д.А. Иванов^{1,2}

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

² *Федеральный исследовательский центр химической физики и медицинской химии РАН*

Развитие методов рентгеновского рассеяния, включающих рентгеновскую оптику и системы детектирования, позволяет достичь значительного прогресса в понимании микроструктуры и термодинамических свойств материалов. Полимерные материалы характеризуются сложностью как своей иерархической структуры, так и термического поведения; они часто формируют метастабильные наноразмерные фазы. Это обуславливает необходимость использования для их исследования установок класса мегасайенс, способных обеспечить высокое временное и пространственное разрешение эксперимента.

В работе рассмотрены возможности микро- и нанофокусного рентгеновского рассеяния в приложении к исследованию самой распространенной надмолекулярной организации частично кристаллических полимеров- сферолитов. Показано как для случая кольцевых сферолитов нанофокусная дифракция позволяет определить 3D форму кристаллических ламелей (геликоиды), их хиральность, а также полярность оси роста [1]. Метод позволяет измерить не только набор стандартных микроструктурных параметров, но также и угол наклона кристаллических цепей относительно нормали к базальной плоскости ламелей [1], что является недостижимым для классических методов рассеяния.

Сочетание микрофокусного рассеяния с in-situ быстрой сканирующей калориметрией на чипе позволяет детально исследовать термически индуцированные процессы структурной перестройки [2]. При этом интенсивность рентгеновского пучка позволяет использовать экспозицию примерно в 1 мс, что делает возможным использование высоких скоростей нагрева (1000-2500 К/с) с сохранением адекватного разрешения по температуре. Такое сочетание структурного и термического метода может найти применение для решения широкого круга вопросов в науках о материалах [3].

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда (проект № 23-73-30005).

1. D. A. Ivanov, et al., *Macromolecules*. 45, 7454 (2012); D. A. Ivanov, et al., *Macromolecules*. 47, 8295 (2014); D. A. Ivanov, M. Rosenthal, *Advances in Polymer Science* 277, 95 (2017).
2. D. A. Ivanov, et al., *European Polymer Journal* 81, 598 (2016); A. P. Melnikov, M. Rosenthal, D.A. Ivanov, *ACS Macro Letters* 7, 1426 (2018).
3. A. F. Akhkiamova, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 27, 12652 (2025).

ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННАЯ СТРУКТУРНАЯ ДИНАМИКА В КРИСТАЛЛАХ: ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛАССА МЕТОДОВ «ОПТИЧЕСКАЯ НАКАЧКА – ЗОНДИРОВАНИЕ СИНХРОТРОННЫМ ПУЧКОМ»

*Е.И. Мареев^{1,2}, Ф.В. Потёмкин^{1,2}, А.Г. Куликов¹, В.Ф. Ефременко¹,
Ф.С. Пиляк¹, Н.Н. Обыденнов^{1,2}, Ю.В. Писаревский¹, А.В. Таргонский¹,
А.Е. Благоев¹, М.В. Ковальчук¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Изучение быстропротекающих процессов в веществе является основой для создания новых материалов с заданными свойствами для природоподобных технологий и развития современных подходов в материаловедении в целом [1]. В данной работе для активации таких процессов использовалось импульсное лазерное излучение с гибко настраиваемыми параметрами, а для прямого наблюдения за их динамикой – синхротронное излучение. Сочетание этих двух каналов – оптического и рентгеновского – на УНУ КИСИ-Курчатов в НИЦ «Курчатовский институт» дало возможность реализовать новый комплекс методов типа «накачка-зондирование» для наблюдения процессов в веществе в широком временном диапазоне от микро- до субнаносекунд.

Объектами исследования выступили функциональные монокристаллы кремния и ниобата лития. Ранее было продемонстрировано, что релаксация фотоиндуцированного возбуждения кристаллической решетки кремния является многостадийным процессом [2]. В случае непerturbативного лазерного воздействия на кремний наблюдается падение интенсивности рентгеновского излучения для рефлекса 111, что связано с разупорядочением решетки в приповерхностном слое с глубиной ~1.5 мкм. Одновременно рост интенсивности рефлексов 333 и 555 обусловлен формированием градиента деформаций кристаллической решетки, вызванным неравномерным распределением температуры [3].

Для ниобата лития впервые зарегистрирована динамика пьезофотовольтаических деформаций, свидетельствующая о формировании и распаде двойного электрического слоя за счет направленной миграции фотоэлектронов [4, 5]. Использование кратных отражений (006, 0012, 0018) позволило наблюдать этот эффект с пространственно-временным разрешением по глубине кристалла и установить зависимость параметров слоя от собственной поляризации материала.

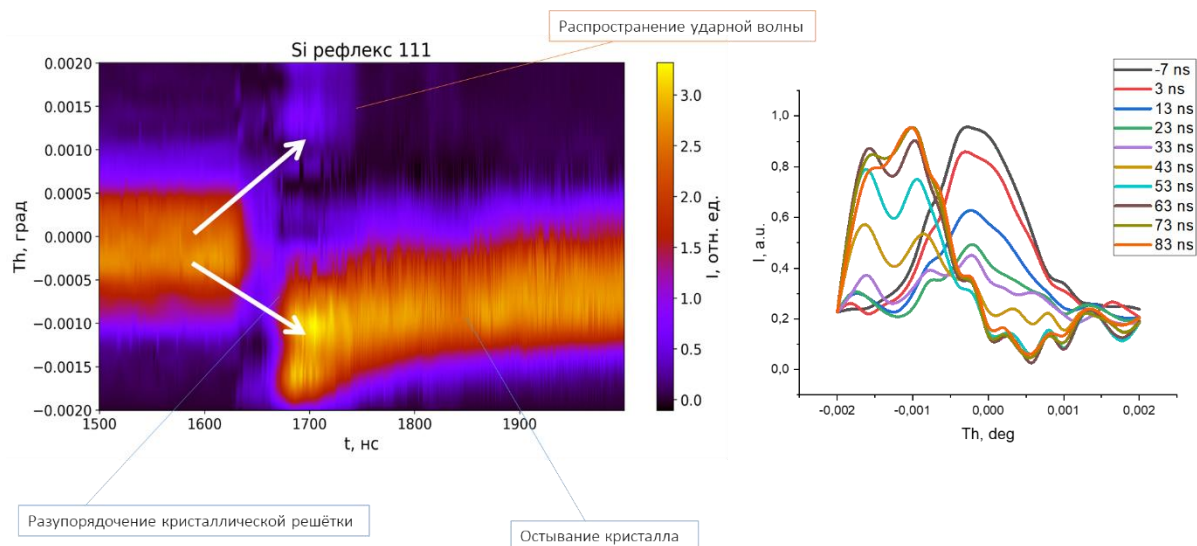


Рис. 1. Тепловая карта интенсивности в увеличенном масштабе и динамика КДО в момент воздействия лазерным импульсом.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-73-00039).

1. М. В. Ковальчук, Вестник РАН. Т. 89, с. 455 (2019)
2. М. В. Ковальчук, и др., Кристаллография. Т. 67(5), с. 771 (2022)
3. P. Seiler, J. D. Dunitz, Acta Crystallogr. 36(10), 2255 (1980)
4. F. S. Pilyak, E. I. Mareev, A. G. Kulikov, et al., Phys. Rev. B. 110, L100302 (2024)
5. М. В. Ковальчук, Е. И. Мареев, А.Г. Куликов, и др., Кристаллография. Т. 69(2), с. 221 (2024)

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ Н-АЛКАНА ПРИ НАГРЕВАНИИ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.А. Гурьева¹, А.К. Борисов¹, В.А. Марихин¹, М.В. Байдакова¹,
Е.С. Куликова², П.В. Дороватовский²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

² НИЦ «Курчатовский институт»

На станции Белок/РСА Курчатовского источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» получены 2D-дифрактограммы фазовых превращений монодисперсного длинноцепочечного н-алкана трикозана $C_{23}H_{48}$ при нагревании.

На основании анализа рентгеновских данных в больших и малых углах установлены возникающие полиморфные модификации трикозана при нагревании и кинетика их превращений друг в друга. Обнаружено, что исходная орторомбическая модификация трикозана с пространственной группой $Pbcm$ (57) трансформируется в новую фазу $Pnma$ (62) вблизи $T = 38^\circ\text{C}$. Дальнейшее повышение температуры $\Delta T = 40 - 42^\circ\text{C}$ приводит к метастабильному развитию моноклинной ротационной фазы R_V (Aa (9)). При $T = 42^\circ\text{C}$ возникает орторомбическая ротационная фаза R_I ($Fmmm$ (69)), которая с повышением температуры постепенно трансформируется так, что соотношение параметров элементарной ячейки b/a резко увеличивается, стремясь к значению $\sqrt{3}$, характеризующему гексагональную суб-ячейку. Вблизи $T = 45^\circ\text{C}$ наблюдается финальная ротационно-кристаллическая модификация трикозана – гексагональная (ромбоэдрическая) ротационная фаза R_{II} с пространственной группой $R\bar{3}m$ (166), из которой образец переходит в расплав. Таким образом, установлена кинетика полиморфных превращений трикозана при нагревании, а также определены параметры элементарных ячеек, в том числе, и для ротационных фаз [1].

1. С. А. Гурьева, А. К. Борисов, В. А. Марихин, М. В. Байдакова, Е. С. Куликова, П. В. Дороватовский. ФТТ 67, 4, 711 (2025).

Секция

Аппаратурно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов

МНОГОСЛОЙНЫЕ ЗЕРКАЛА ДЛЯ СИНХРОТРОННЫХ И НЕЙТРОННЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

В.Н. Полковников

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород

В докладе будет рассказано об особенностях взаимодействия рентгеновского излучения с веществом и на основе этого рассмотрения представлены основные физические принципы, положенные в основу работы многослойных рентгеновских зеркал, которые покрывают собой диапазон длин волн от $\lambda=60$ нм до $\lambda<0.01$ нм (от вакуумной ультрафиолетовой до жесткой рентгеновской области спектра). Будет сказано о влиянии разного рода дефектов пленок на коэффициенты отражения многослойных зеркал. Будут приведены соответствующие примеры.

Следующая часть доклада будет посвящена методам синтеза многослойных зеркал и приемам, которые используются для получения требуемого распределения периода по поверхности зеркала. Затем будет рассказано об основных методах диагностики микроструктуры пленок и интерфейсов, используемых в физике и технологии многослойных рентгеновских зеркал. Значительное внимание будет уделено технологии “инженерии слоев интерфейсов”.

Будут представлены последние разработки ИФМ РАН в области изготовления оптических поверхностей дифракционного качества (с шероховатостью на уровне 0,2 нм и нанометровой точностью формы).

Заключительная часть доклада будет посвящена применениям многослойных зеркал в науке, технике и технологии. Особое место в данной части доклада будет уделено обсуждению достоинств и перспектив применения изготавливаемой в ИФМ РАН оптики в синхротронных и нейтронных приложениях.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-72-30029-П

ВОПРОСЫ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ ПРИБОРНОГО КОМПЛЕКСА РЕАКТОРА ПИК

В.В. Тарнавич

НИИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина

Работы по оснащению реактора ПИК нейтронными установками ведутся в рамках инвестиционного проекта «Создание приборного комплекса для реактора ПИК». В рамках проекта, в том числе, создаются тринадцать современных нейтронных установок для решения задач физики конденсированных сред. Включают направления дифрактометрия, спектроскопия, радиография и комплексы для исследования крупномасштабных структур.

Основной акцент как при проектировании, так и при строительстве станций, поставлен на решение вопросов импортозамещения. За счет использования оригинальных разработок, а также применения реверс-инжиниринга нейтронные станции комплектуются оборудованием отечественных производств. Комплектация станций выполняется с учетом возможности их дальнейшей модернизации.

ПРЕЦИЗИОННЫЙ ДАТЧИК ПОЛОЖЕНИЯ И ИНТЕНСИВНОСТИ ПУЧКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ТОНКОЙ ПЛАСТИНЫ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АЛМАЗА

Н.О. Шамплетов¹, А.И. Сафонов², С.А. Запуниди³

¹ *Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова*

² *НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

³ *Центр инженерной физики при МГУ имени М.В. Ломоносова*

Современные эксперименты на синхротронных станциях предъявляют высокие требования к стабильности пространственного положения и интенсивности рентгеновского пучка, особенно при переходе к источникам с малым эмиттансом пучка (например, источники 4+ поколения «СИЛА» и «СКИФ»). Незначительные дрейфы пучка, вызванные тепловыми нагрузками, механическими вибрациями или колебаниями в работе накопительного кольца, могут приводить к существенным искажениям получаемых данных, снижению разрешения и, как следствие, к потере экспериментального времени.

Целью данной работы являлась разработка и реализация прототипа монитора положения и интенсивности рентгеновского пучка, обеспечивающего одновременный контроль ключевых параметров пучка в режиме реального времени с минимальным воздействием на его характеристики.

Квадрантный сенсор на основе монокристаллического алмаза позволяет измерять положение пучка сечением от 1 мкм до 1 мм в спектральном диапазоне от 5 кэВ. Реализованный анализатор сигналов сенсора способен обрабатывать фототоки в диапазоне от единиц пикоампер до сотен микроампер.

В работе представлено модельное описание работы датчика, показана технологическая цепочка, позволившая создать первый такой прибор в РФ, обсуждены технологические сложности, приведены итоговые характеристики.

До текущего момента технология производства таких приборов была освоена только за границей [1, 2, 3] и не доступна в России.

1. Houghton, C., Bloomer, C. & Bobb, L., J. Synchrotron Rad. 30, 876-884 (2023).

2. J. Melbinger, et al., J. Phys.: Conf. Ser., 3010, 012075 (2025) DOI:10.1088/1742-6596/3010/1/012075

3. Keister, Jeff et al. Journal of Synchrotron Rad. 25, 407-412 (2018).

НАУЧНАЯ ПРОГРАММА И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СТАНЦИЙ ПЕРВОЙ ОЧЕРЕДИ ЦКП «СКИФ»

А.А. Сараяев¹, А.В. Бухтияров¹, Е.Б. Левичев¹, В.И. Бухтияров²

¹ЦКП «СКИФ», Институт катализа СО РАН, Кольцово

²Институт катализа СО РАН, Новосибирск

asaraev@catalysis.ru

ЦКП «СКИФ» – источник СИ поколения 4+, создаваемый в наукограде Кольцово под Новосибирском. Его основной задачей является инфраструктурное обеспечение фундаментальных и прикладных исследований мирового уровня, проводимых научными, образовательными организациями и предприятиями реального сектора экономики Российской Федерации. СКИФ призван стать ключевым инструментом для достижения лидерства в приоритетных областях научно-технологического развития страны. Экспериментальными станциями «СКИФ» первой очереди являются станции 1-1 «Микрофокус», 1-2 «Структурная диагностика», 1-3 «Быстропротекающие процессы», 1-4 «XAFS-спектроскопия и магнитный дихроизм», 1-5 «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне», 1-6 «Электронная структура» и 1-7 «Базовые методы синхротронной диагностики для образовательной и инновационной деятельности студентов». Инфраструктура ЦКП «СКИФ» будет использована для выполнения исследований мирового уровня в различных областях физики, химии, материаловедения, молекулярной биологии, медицины и других дисциплин с акцентом на наиболее прорывные, экономически и социально-значимые мультидисциплинарные задачи. В области фундаментальных наук приоритетными направлениями деятельности ЦКП «СКИФ» являются: развитие научных основ создания новых материалов с заданными свойствами на основе знания их структуры; исследование механизмов функционирования живых систем, в том числе развитие бионических подходов к дизайну технических систем; развитие методологии синхротронной диагностики для эффективной реализации инновационных технологических цепочек «от идеи к коммерческому продукту»; развитие экспериментальной аппаратуры и методик обработки больших данных; структурный дизайн новых лекарственных средств для борьбы с социально значимыми заболеваниями; развитие методов медицинской диагностики и терапии; моделирование геологических и геофизических процессов в недрах Земли и планет; поиск решений глобальных экологических проблем, включая исследования материалов для альтернативной энергетики.

В докладе будет представлен обзор научной программы ЦКП «СКИФ» и подробно раскрыты экспериментальные возможности станций первой очереди, демонстрирующие их потенциал для решения актуальных задач фундаментальной науки и реального сектора экономики.

Работа была выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН (FWUR-2024-0042).

СТАТУС И ПРЕСПЕКТИВЫ УСКОРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП «СКИФ»

П.А. Пиминов

ЦКП СКИФ ИК СО РАН, Новосибирск

В наукограде Кольцово Новосибирской области завершается создание нового источника синхротронного излучения четвертого поколения – Центр коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» (ЦКП «СКИФ»). Ускорительный комплекс источника состоит из накопительного кольца с энергией электронов 3 ГэВ с эмиттансом 75 пм и инжекционного комплекса на полную энергию. 16-кратная симметрия накопителя позволяет использовать 14 бездисперсионных прямолинейных промежутков для постановки вигглеров или ондуляторов. Для пользователей доступно излучение из поворотных магнитов с полем 0.5 и 1.9 Тл. Основной режим генерации СИ происходит на токе пучка 400 мА. Для исследования быстро протекающих процессов возможны специальные режимы с неравномерным заполнения пучка. В докладе рассказывается статусе ускорительного комплекса, его возможностях, планах по запуску и получению проектных параметров, а также его дальнейших перспективах.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ КОНТРОЛЯ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОНДУЛЯТОРОВ НА ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ ДЛЯ НАКОПИТЕЛЯ «СИЛА»

*А.С. Комлев, Д.О. Самсонов, Г.Р. Соколов, Д.Д. Бекетов, Н.С. Ключков,
С.В. Гончаров, И.А. Ветюгов, А.С. Ромашов, Н.М. Мухамедов,
Я.М. Абакумов, А.А. Амиров*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Одной из ключевых подсистем ускорительно-накопительного комплекса «СИЛА» является его магнитная структура, включающая электромагниты, диполи на постоянных магнитах и ондуляторы на постоянных магнитах. Эти элементы выполняют несколько критически важных функций: поворот пучка заряженных частиц, его фокусировку, а также генерацию ондуляторного и синхротронного излучения. Наиболее требовательными по параметрам юстировки являются ондуляторные системы на постоянных магнитах синхротрона «СИЛА». Для ускорителя четвертого поколения требуются высокие точности изготовления магнитной системы, необходимы комплексные экспериментальные методики как для входного контроля магнитных свойств материалов, так и для выходного контроля готовых изделий [1,2,3].

К реализованным методикам входного контроля магнитных материалов в лаборатории Магнитных исследований можно отнести: измерения остаточной величины магнитного момента постоянных магнитов методом вращения измеряемого объекта внутри катушек Гельмгольца и измерения полевых зависимостей намагниченности магнитномягких материалов методом индукционной магнитометрии. Конструктивные особенности измерительного стенда на основе катушек Гельмгольца также позволяют проводить измерения под воздействием внешних механических напряжений, симулируя нагрузки на материалы, которые действуют на них со стороны крепежных элементов конструкций конечных устройств.

Экспериментальные методики выходного контроля изготовленных магнитных элементов включают в себя: Холловскую магнитометрию, измерение первого и второго интеграла магнитного поля методом натянутой нити (двигающейся в пространстве), измерение локального полупериода магнитной структуры ондулятора методом детектирования движения доменной стенки. Набор реализованных методик позволяет проводить локальные измерения распределения магнитной индукции в пространстве магнитного зазора изготовленных устройств, выявлять некомпенсированные дипольные компоненты в магнитных структурах различных типов ондуляторов. Стоит отметить, что методика измерения локального полупериода магнитной структуры ондулятора методом детектирования движения доменной стенки была реализована впервые [4].

Практическая реализация описанных методик входного и выходного контроля подтверждает техническую возможность достижения настройки требуемых параметров магнитных систем накопителя «СИЛА» в соответствии с проектными требованиями.

1. Kovalchuk M. V. et al. Fourth-Generation Synchrotron Radiation Source with X-ray Free-Electron Laser SILVA: Concept of Accelerator–Storage Complex //Crystallography Reports. – 2022. – Т. 67. – №. 5. – С. 676-683.
2. Levichev E., Vinokurov N. Undulators and other insertion devices //Reviews of Accelerator Science and Technology. – 2010. – Т. 3. – №. 01. – С. 203-220.
3. Elleaume P., Chavanne J., Faatz B. Design considerations for a 1 Å SASE undulator //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2000. – Т. 455. – №. 3. – С. 503-523.
4. D. O. Samsonov, N. S. Klochkov, S. V. Goncharov et al. A novel method for local undulator period measurement via magnetic domain wall motion detection // Sensors and Actuators, A: Physical. — 2025. — Vol. 395. — P. 117057.

ВНЕДРЕНИЕ СИСТЕМЫ TANGO CONTROLS ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ СТАНЦИЯМИ СИНХРОТРОНА «СИБИРЬ-2» И ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА ИР-

8

Г.В. Пруцков¹, А.Д. Печников¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Tango Controls [1] – система диспетчерского управления и сбора данных (SCADA). Основанная на стандарте написания распределенных приложений CORBA [2], система предназначена для централизованного управления различным оборудованием и интегрирования его в единую сеть.

Ключевым понятием в системе Tango Controls выступает т. н. «девайс-сервер» - программная единица, которая может представлять в системе как реальные экземпляры оборудования, так и виртуальные, либо инкапсулировать целые подсистемы из множества устройств, оперируя ими как единым объектом.

При интеграции системы на экспериментальных станциях «Микрофокус», «Ленгмюр», «РТ-МТ» синхротрона «Сибирь-2» и канала ГЭК-6 реактора ИР-8 были реализованы девайс-сервера контроллеров управления движением Phytron PhyMotion, ACS Motion Control, SmarAct, детекторов рентгеновского излучения Радикон SCSD-4, Dectris Mythen2, XSpectrum Lambda, Hitachi Vortex 90EX, детектора нейтронов DeliDAQ-1, пикоамперметров Keithley 684X, ионизационных камер FMB Oxford.

Управление экспериментом осуществляется при помощи пакета Sardana Controls [3], который реализован в качестве девайс-сервера виртуального устройства. Пакет предоставляет интерфейс командной строки со СПЕС-подобным набором команд и возможностью расширения пользовательскими макросами на языке Python.

1. <https://www.tango-controls.org>
2. <https://www.omg.org/corba>
3. <https://www.sardana-controls.org>

ПОТЕНЦИАЛ ЦКП СКИФ В ОБЛАСТИ СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

*С.Г. Архипов¹, З.С. Винокуров¹, Я.В. Зубавичус¹, А.Н. Шмаков¹,
Д.Д. Мищенко¹, А.Г. Селютин¹, М.С. Сыртанов², А.С. Гоголев², В.В. Денисов³,
А.Д. Тересов³, Ю.Н. Панченко³, С.С. Ковальский³, К.В. Бескончин³,
В.Н. Киселев³, А.А. Евдокимов³, М.В. Андреев³*

¹ ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Новосибирск

² ТПУ, Томск

³ ИСЭ СО РАН, Томск

Основное внимание доклада будет сосредоточено на станции 1-2 «Структурная диагностика» и ее экспериментальных возможностей для реализации ряда техник метода рентгеноструктурного анализа с целью исследования кристаллов белков и других макромолекулярных соединений, органических, неорганических и металлоорганических веществ. Наряду с этим будут коротко обозначены возможности этой исследовательской установки для решения и других экспериментальных задач.

На станции будут реализованы методики рентгеновской дифракции в диапазоне энергий излучения от 6 до 27 кэВ (длина волны от 1.907 Å до 0.459 Å) на следующих секциях:

Секция 1-2-1 «Дифрактометрия высокого разрешения» ориентирована на получение рентгенограмм поликристаллических материалов с высоким угловым разрешением и низким соотношением «сигнал-шум». Эксперименты возможны в режимах *in situ* и *operando* в широком интервале углов Брэгга за времена порядка нескольких минут при комнатной температуре с использованием позиционно-чувствительного однокоординатного детектора.

Секция 1-2-2 «РСА монокристаллов» предназначена для определения кристаллических структур различных соединений. Дифрактометр оснащен 5-осевым гониометром с возможностью сканирования по φ и ω , потоковым азотным криостатом, гибридным детектором ADVACAM WidePIX 5x5 MPX3 и беспараллаксным осевым микроскопом. На секции 1-2-2 также будет реализована возможность автоматизированной смены образцов, находящихся при температуре жидкого азота.

Помимо этого, в докладе будут представлены возможности станции 1-7 «Базовые методы синхротронной диагностики» оборудование которой адаптировано для проведения образовательной деятельности и позволяет проводить рентгеноструктурный анализ соединений различной природы в том числе и при охлаждении, а также инфраструктура лабораторного корпуса для работы с растворами биополимеров и их кристаллизации.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040).

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С СЕНСОРАМИ НА ОСНОВЕ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ, КОМПЕНСИРОВАННОГО ХРОМОМ

М.С. Трофимов

Национальный исследовательский Томский государственный университет

В настоящее время учеными из НИ ТГУ и ИЯФ СО РАН ведётся совместная разработка полупроводниковых детекторов на основе арсенида галлия, компенсированного хромом (HR-GaAs:Cr), для российских синхротронных источников: СКИФ, СИЛА, КИСИ-Курчатов и РИФ. Разрабатываемые в ТГУ многоэлементные сенсоры на основе HR-GaAs:Cr ранее показали высокую радиационную стойкость и пространственное разрешение по результатам тестирования на зарубежных синхротронных источниках. Одним из основных требований к полупроводниковым детекторам для синхротронных экспериментов является временная стабильность амплитуды сигналов (импульсов фототока) в процессе облучения потоком СИ. Данная характеристика детектора определяет результативность проводимых экспериментов и, в частности, может зависеть от электрофизических характеристик материала сенсора. На станции «Субмикросекундная диагностика» ускорительно-накопительного комплекса ВЭПП-3 были выполнены исследования временной стабильности амплитуды импульсов фототока сенсоров на основе арсенида галлия, компенсированного хромом (HR-GaAs:Cr). Для этого сенсоры располагались напротив щели быстрого затвора, через которую происходило их облучение потоком СИ. На сенсоры подавалось напряжение отрицательной полярности в диапазоне (40 – 700) В, что создавало в их активной области напряженность электрического поля в диапазоне (0,8 – 14) кВ/см. За время открытия быстрого затвора на сенсоры поступало 800 единичных всплесков СИ, каждая из которых создавала единичный токовый импульс в цепи, регистрируемый осциллографом. Установлено, что в процессе облучения HR-GaAs:Cr сенсоров наблюдается экспоненциальный спад амплитуды импульсов фототока, связанный с возникновением поляризации активной области сенсора. Установлены закономерности динамики изменения амплитуды импульсов фототока HR-GaAs:Cr сенсоров от напряженности электрического поля при облучении пакетами квантов синхротронного излучения. Показано, что с ростом напряженности электрического поля спад амплитуды импульсов фототока начинает замедляться, что свидетельствует о деполяризации активной области сенсора.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России, проект № FSWM-2025-0021.

ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОСКОПИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРЕМНИЕВЫХ НАНОФОКУСИРУЮЩИХ ЛИНЗ НА «КИСИ-КУРЧАТОВ»

*М.С. Фоломешкин¹, В.Г. Кон¹, А.Ю. Серёгин¹, Ю.А. Волковский¹,
П.А. Просеков¹, В.А. Юнкин², А.А. Снигирёв³, Ю.В. Писаревский¹,
А.Е. Благов¹, М.В. Ковальчук¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН

³ Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Сегодня на современных источниках синхротронного излучения (СИ) и лазерах на свободных электронах (ЛСЭ) всё большее распространение приобретают методы когерентной рентгеновской микроскопии. Когерентные свойства пучков рентгеновского излучения, генерируемых такими источниками, наряду с применением нанофокусирующей оптики, открывают возможности исследования внутренней структуры слабо поглощающих объектов микроскопического размера, изучение которых с помощью микроскопии поглощения затруднено или невозможно.

Реализация в России проектов строительства новых источников СИ 4-го поколения и ЛСЭ [1] ставит задачу развития подобных методов для проведения структурных исследований с нанометровым пространственным разрешением. Одним из распространённых и перспективных методов когерентной визуализации является рентгеновская фазово-контрастная микроскопия (ФКМ) [2]. Применение данного метода в сочетании с использованием кремниевых нанофокусирующих составных преломляющих линз (СПЛ) [3] позволяет достичь увеличения регистрируемых ФКМ-изображений в десятки раз [4], что решает проблему относительно невысокого разрешения современных двумерных детекторов.

В докладе представлены результаты успешной реализации [4, 5] на станции РКФМ источника «КИСИ-Курчатов» метода ФКМ на основе кремниевых нанофокусирующих СПЛ [6]. На примере визуализации модельных амплитудных и фазовых микрообъектов продемонстрировано субмикронное пространственное разрешение. Показано, что основным фактором, ограничивающим разрешение полученных изображений, является механическая нестабильность элементов оптической схемы, а не конечная пространственная когерентность пучка СИ.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. // Кристаллография. 67, 5 (2022).
2. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al. // Rev. Sci. Instrum. 66, 12 (1995).
3. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al. // Phys. Rev. Lett. 103 (2009).
4. В.Г. Кон // Кристаллография. 67, 2 (2022).
5. М.С. Фоломешкин, В.Г. Кон, А.Ю. Серёгин и др. // Кристаллография. 69, 6 (2024).
6. М.С. Фоломешкин, В.Г. Кон, А.Ю. Серёгин и др. // Кристаллография. 70, 5 (2025).

СИСТЕМЫ БЫСТРОГО ПРЕРЫВАНИЯ ПУЧКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.А.Студенников¹, Е.И. Пальчиков¹, Э.Р. Прууэл¹, С.В. Станкевич¹

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

aleksei.studennikov@mail.ru

Эксперименты с использованием синхротронного излучения (СИ) является непрерывно развивающийся областью исследований. В последние 10 лет вектор тенденции развития сфокусирован на современных уникальных методах, где преимущества СИ, такие как яркость, когерентность, монохроматичность и пр. играет ключевую роль в получении экспериментальных данных. Многие развивающиеся области исследований требуют высокую яркость, энергию или временное разрешение. А для ряда современных методик эти требования объединяются. Такие условия экспериментов несут высокую энергетическую и радиационную нагрузку на оборудование станции. В этой связи отдельным пластом развития аппаратно-методического комплекса синхротронной инфраструктуры выступает область прерывателей и затворов синхротронного излучения.

Современные экспериментальные станции синхротронного излучения зачастую предполагают на них использование прерывателей или затворов рентгеновского излучения, для обеспечения безопасности эксплуатации и защиты персонала и оборудования от дозы и термических воздействий [1]. Но отдельные экспериментальные станции указывают на то, что прерыватели и затворы пучка СИ используются для управления тепловыми нагрузками при проведении исследований с высоким временным разрешением, в частности это актуально для источников с высокой плотностью яркости, где мощность может достигать до 500 кВт/мрад². [2,3].

Прерыватели пучка СИ играют ключевую роль для изоляции отдельных банчевых структур в экспериментах, требующих наносекундное разрешение, в накопительных кольцах ESRF и MAX IV, такие системы зачастую дублируют с помощью механической и электронной селекции. [4-6]. В то время как затворы пучка являются стандартным элементом фронтендов синхротронных станций с высокой мощностью выводимого пучка, модулируя излучения для потребителей. Так в BESSY II для станции фотоэлектронной спектроскопии используются вращающиеся механические системы, обрабатывающие поток в 3×10^{13} фотонов/с. [7]

В докладе приводится обзор, сравнение и классификация прерывателей пучка высокоэнергетического излучения на основе использования их в высокоэнергетических каналах вывода современного источника синхротронного излучения ЦКП «СКИФ». [8,9].

Работа выполнена за счет средств федерального бюджета в лице Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2025-459.

1. Asuru et al., J. Synch. Rad. 2019, 26, 1388-1399. DOI: 10.1107/S1600577519003576.
2. Marco Cammarata, et al., Chopper system for time resolved experiments with synchrotron radiation. Rev. Sci. Instrum. 1 January 2009; 80 (1): 015101. <https://doi.org/10.1063/1.3036983>.
3. Osawa H, Ohkochi T, Fujisawa M, Kimura S, Kinoshita T. Development of optical choppers for time-resolved measurements at soft X-ray synchrotron radiation beamlines. J Synchrotron Radiat. 2017 May 1;24(Pt 3):560-565. doi: 10.1107/S1600577517002399.
4. J Adachi et al 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1412 152092. DOI 10.1088/1742-6596/1412/15/152092,
5. Daniel F. Förster, et al., "Phase-locked MHz pulse selector for x-ray sources," Opt. Lett. 40, 2265-2268 (2015)
6. Vadilonga S, Zizak I, Roshchupkin D, Petsiuk A, Dolbnya I, Sawhney K, Erko A. Pulse picker for synchrotron radiation driven by a surface acoustic wave, Optics Letters 42 (10), 1915-1918, doi:10.1364/OL.42.001915 (2017)
7. Daniel F. Förster, Bernd Lindenau, Marko Leyendecker, Franz Janssen, Carsten Winkler, Frank O. Schumann, Jürgen Kirschner, Karsten Holldack, and Alexander Föhlisch, "Phase-locked MHz pulse selector for x-ray sources," Opt. Lett. 40, 2265-2268 (2015) <https://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?URI=ol-40-10-2265>
8. I.A. Rubtsov, et al., Conceptual Design of a Synchrotron Beamline Dedicated to Ultrafast Time-Resolved Small-Angle X-Ray Scattering Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2023. V.87. N5. P.600-603. DOI: 10.3103/s1062873822701751
9. Технологическая инфраструктура Сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ». Том 1. Экспериментальные станции первой очереди и Лабораторный комплекс Т.1 Сборник, ИК СО РАН. 2022. 310 с. ISBN 9785906376411.]

Секция

Биологические системы, полимеры, вещество в
мягком конденсированном состоянии

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ОСОБЕННОСТИ АППАРАТУРЫ МЕТОДА МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО И НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРОЕНИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ

В.В.Волков¹, П.В.Конарев¹, М.В. Петухов²

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН

Методы малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния (МУРР/МУРН) получили в последние два десятилетия широкое развитие, как в плане лабораторной аппаратуры, так и на синхротронных источниках. Значительная доля исследований наносистем различной природы, включает результаты анализа данных МУР, которые соответствуют строению образцов в нативном состоянии. В докладе рассматриваются особенности синхротронных станций рассеяния и современных лабораторных установок, которые по своим параметрам приблизились к синхротронным станциям второго поколения.

Краткое введение в теоретические основы метода сопровождается в докладе практическим примерами. Рассматриваются методы расчета структурных инвариантов наночастиц в монодисперсных образцах (радиус инерции, максимальный размер, объем) и несколько методов расчета распределений частиц (пор, кластеров в полимерах и т.п.) по размерам в полидисперсных системах. Обсуждаются вопросы устойчивости и неоднозначности получаемых решений. Последнее особенно важно при поиске формы и структуры наночастиц низкого разрешения. Рассмотрение всех вопросов сопровождается демонстрацией модельных и практических примеров.

Работа выполнена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и ИФХЭ РАН.

1. Д. И. Свергун, Л. А. Фейгин. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. – М.: Наука. (1986). – 280с.
2. O. Glatter, O. Kratky. Small-Angle X-ray Scattering. – London: Academic Press Inc. (1982) – 515 p. – ISBN 0–12–286280–5.
3. K. Manalastas-Kantos, P. V. Konarev, et al., J. Appl. Cryst. **54**, 343 (2021).

ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГРАММНОГО ПАКЕТА ATSAS ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ В РАСТВОРАХ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

П.В.Конарев¹, М.В. Петухов², В.В.Волков¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН

Методы малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния (МУРР/МУРН) позволяют изучать строение неупорядоченных и частично упорядоченных веществ в диапазоне 1-100 нанометров. Эти методы дают ценную информацию о структуре и динамике исследуемых объектов в условиях, близких к естественным.

Программный пакет ATSAS предназначен для обработки и анализа данных МУРР/МУРН от изотропных систем в растворах [1-3]. Основным приложением пакета ATSAS является определение формы частиц макромолекул и биологических комплексов, анализ распределения по размерам наночастиц в органических и композитных материалах. Набор программ, входящих в пакет ATSAS, позволяет проводить как первичную обработку данных, так и построение трехмерных моделей низкого разрешения наночастиц в монодисперсных образцах, используя метод разложения по сферическим гармоникам. Кроме того, имеется возможность количественного описания подвижных частей макромолекул в разбавленных растворах.

Методы МУРР/МУРН часто сочетаются со структурными методами высокого разрешения, такими как белковая кристаллография, ЯМР и электронная микроскопия. Это позволяет проводить быструю проверку атомных моделей частиц высокого разрешения, идентифицировать олигомерные формы и добавлять отсутствующие фрагменты в модели высокого разрешения. Четвертичная структура макромолекулярных комплексов может быть смоделирована за счет движений и вращений их отдельных субъединиц. Также методы МУРР/МУРН эффективны при количественном анализе олигомерных состояний равновесных смесей и при изучении временной кинетики процессов.

Результаты анализа формы белковых макромолекул и комплексов с помощью программного пакета ATSAS представлены на ряде примеров. Новые возможности ATSAS (версии 3.0 и выше) будут обсуждены.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и ИФХЭ РАН.

1. P. V. Konarev, M. V. Petoukhov, et al., J. Appl. Cryst. 39, 277 (2006).
2. M. V. Petoukhov, D. Franke, et al., J. Appl. Cryst., 45, 342 (2012).
3. K. Manalastas-Kantos, P. V. Konarev, et al., J. Appl. Cryst. 54, 343 (2021).

СТРУКТУРА ХИМЕРНОГО РЕКОМБИНАНТНОГО БЕЛКА С ПЕРОКСИДАЗНОЙ И СУПЕРОКСИДДИСМУТАЗНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

В.Р. Самыгина¹, П.В. Конарев¹, М.Г. Шаранов^{2,3}, С.В. Гудков⁴

¹НИЦ «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт

³Институт биофизики клетки Российской академии наук

⁴Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук

В работе исследовалась структура химерного рекомбинантного белка PSH. Белок PSH состоит из двух антиоксидантных ферментов: пероксиредоксина 6 человека (Prx6) и супероксиддисмутазы (MnSOD) из *Escherichia coli*. Анализ физико-химических свойств белка PSH продемонстрировал его высокую антиоксидантную активность. PSH защищает животных от летальных и сублетальных доз ионизирующего излучения, наиболее эффективен при внутривенном введении незадолго до ионизирующего облучения. Коэффициент снижения дозы для PSH составил 1,33. PSH эффективно уменьшает степень радиационно-индуцированной лейкопении и тромбоцитопении у животных. Кроме того, введение PSH снижало повреждение ДНК в клетках красного костного мозга. Химерный рекомбинантный PSH может рассматриваться как эффективный радиопротектор для минимизации рисков повреждения организма животных ионизирующим излучением и может быть перспективной терапевтической молекулой для предотвращения/подавления патологических состояний, сопровождающихся или вызванных окислительным стрессом. Структура PSH была установлена методом малоуглового рентгеновского рассеяния в растворе для объяснения свойств химерного белка и его дальнейшего рационального дизайна. Определено взаимное расположение супероксиддисмутазного и пероксиредоксинового доменов в белке. Определено расстояние между активными центрами ферментов, которое оптимально для последовательного превращения радикалов ферментами. Таким образом, структура PSH способствует реализации синергетического антиоксидантного действия химеры и является основой для улучшения свойств молекулы.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

КЛАСТЕРЫ-ПРЕКУРСОРЫ В КРИСТАЛЛИЗАЦИОННЫХ РАСТВОРАХ БЕЛКОВ: СОВМЕСТНЫЙ АНАЛИЗ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

М.А. Марченкова^{1,2}, Ю.В. Писаревский¹, Ю.А. Дьякова¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Южный федеральный университет

Наименее изученной при кристаллизации остается начальная стадия, предшествующая зародышеобразованию. Недостаточность знаний в этой области особенно критична для кристаллизации белков.

Нами предложена модель перехода от разупорядоченного жидкого состояния к твердой фазе через образование структурированных кластеров-прекурсоров – элементов будущих кристаллов.

Справедливость модели проверена в вычислительных молекулярно-динамических (МД) расчетах и в экспериментах по малоугловому рентгеновскому рассеянию (МУРР). Для целого ряда систем показано существование упорядоченных олигомеров, изоморфных фрагментам кристалла: для лизоцима – димеры и октамеры [1], для термолизина – гексамеры [2], для протеиназы К – димеры [3], для трансаминазы – додекамеры [4].

Путем параллельного исследования олигомерной структуры растворов белка лизоцима и особенностей образования твердой фазы из этих растворов показана количественная связь доли кластеров-прекурсоров с переходом к твердой фазе и с исходом кристаллизации [1].

Комбинация МУРР и МД снимает неоднозначности интерпретации данных [5]: лучшие аппроксимации кривых МУРР достигаются для олигомеров без катионов или с минимальным числом встроенных ионов, преимущественно Cl^- ; МД указывает, что именно анионы на ранних стадиях стабилизируют димеры/октамеры лизоцима, тогда как катионы «встраиваются» позже по мере кристаллизации. Синергия методов объясняется различной чувствительностью: МУРР «лучше видит» тяжёлые центры рассеяния, МД — лёгкие анионы.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. M. A. Marchenkova, et al., Acta Naturae. 15, 1 (2023).
2. M. V. Kovalchuk, et al., J. Biomol. Struct. Dyn., 37 (2019).
3. A. S. Boikova, et al., Crystallogr. Rep., 63 (2018).
4. M. A. Marchenkova, et al., J. Biomol. Struct. Dyn., 38 (2020).
5. M. A. Marchenkova, et al., Crystals. 12 (2022).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТКРУЧИВАНИЯ ДНК ОТ НУКЛЕОСОМЫ НА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ WIDOM 603 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРИО-ЭМ И МУРР

*Г.А. Армеев¹, А.В. Моимеенко¹, Н.А. Моторин¹, Д.А. Афонин¹, Zhao Lei²,
В.А. Васильев¹, П.Д. Олейников¹, Г.С. Глухов^{1,2}, Г.С. Петерс¹,
В.М. Студитский¹, А.В. Феофанов^{1,2}, А.К. Шайтан¹, Shi Xiangyan²,
О.С. Соколова³*

¹ МГУ имени М.В. Ломоносова

² Shenzhen MSU-BIT University (Kumai, Shenzhen)

Нуклеосомы являются фундаментальными элементами организации хроматина, участвуют в уплотнении геномной ДНК и служат мишенями для связывания многочисленных регуляторных белков. В настоящее время известно более 500 различных структур нуклеосом. Несмотря на большое количество структур нуклеосом, репертуар последовательностей нуклеосомных ДНК в них весьма ограничен. С помощью криоэлектронной микроскопии мы определили структуру нуклеосомы, сформированную на последовательности ДНК Widom 603, с разрешением 4 Å и реконструировали атомную модель. Мы разработали интегративный подход к моделированию для изучения разворачивания нуклеосомной ДНК на основе данных Крио-ЭМ и верифицировали его с помощью МУРР и измерений Фёрстеровского резонансного переноса энергии. Мы визуализировали пошаговое откручивание ДНК от нуклеосомы и продемонстрировали сцепленную с откручиванием потерю димера гистонов H2A-H2B. Сравнительный анализ симметрии карт электронной плотности свидетельствует о зависимости стороны откручивания ДНК от последовательности нуклеотидов, что согласуется с асимметрией прохождения РНК полимеразы сквозь нуклеосомы. Работа поддержана грантами Российского научного фонда №19-74-30003 (крио-ЭМ и обработка изображений, FRET измерения) и № 23-74-10012 (молекулярное и интегративное моделирование).

КОНТРОЛЬ СБОРКИ БЕЛКОВЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

*В.В. Сударев¹, М.С. Гетте¹, Т.С. Куркин¹, А.Д. Власова¹, С.В. Баженов^{1,3},
Ю.Л. Рижиков^{1,2}, Н.А. Бондарев¹, И.В. Манухов^{1,3}, А.И. Куклин^{1,2},
А.В. Власов^{1,2*}*

¹Центр исследований молекулярных механизмов старения и возрастных заболеваний,
Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия, 141701

²Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия, 141980

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва,
Россия, 101000

aleksei.vlasov@phystech.edu

Ферритин — один из наиболее распространённых железосодержащих белковых комплексов. Он состоит из 24 субъединиц, образующих полую глобулярную оболочку. Процесс его самосборки отличается высокой стабильностью, что делает ферритин перспективным инструментом для множества биотехнологических приложений (1). Так, например, дизайн новых рекомбинантных вакцин на основе бактериального ферритина — многообещающий подход, активно развивающийся на протяжении последнего десятилетия (2, 3), а контроль процесса самосборки глобулярной структуры является важным этапом при создании вакцин на основе ферритина.

В настоящей работе мы исследовали самосборку химерных белковых конструкций на основе ферритина методами малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и просвечивающей электронной микроскопии (негативное контрастирование). Мы разработали несколько химерных белковых конструкций на основе бактериального ферритина, и провели структурные исследования конструкций с добавлением белкового тэга и рецептор-связывающего домена (RBD) S-белка SARS-CoV-2.

Получены условия для оптимальной регистрации данных электронной микроскопии для частиц ферритина. Микрофотографии записывали при увеличении 10 000 – 40 000 на просвечивающем электронном микроскопе Tecnai Polara G2 (FEI) с катодом на основе полевого эмиттера (FEG), работавшем при ускоряющем напряжении 300 кВ, с использованием цифровой камеры Gatan Orius 4k×2,67k.

Эксперименты методом МУРР проведены на установке Rigaku, оснащённой источником рентгеновского излучения MicroMax-007HF (4), длина волны излучения $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Рассеянное излучение регистрировали позиционно-чувствительным детектором ASM DTR Triton 200.

Полученные данные использованы для характеристики олигомерного состояния белковых комплексов. В работе мы демонстрируем полную самосборку в 24-мер для апоферритина из *H. pylori*, слитого с белком SUMO (Fer-SUMO), а также, апоферритина из *E. coli*, слитого с RBD доменом S-белка

SARS-CoV-2 и белком SUMO (Fer-RBD-SUMO). Полученные результаты могут найти применение в доклинических и клинических исследованиях новых рекомбинантных вакцин на основе ферритина.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение от 30.05.2025 № 075-15-2025-512) в рамках реализации отдельных мероприятий Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры.

1. Sudarev, Vsevolod V., et al. "Ferritin self-assembly, structure, function, and biotechnological applications." *International Journal of Biological Macromolecules* (2022).
2. Kanekiyo, Masaru, et al. "Self-assembling influenza nanoparticle vaccines elicit broadly neutralizing H1N1 antibodies." *Nature* 499.7456 (2013): 102-106.
3. Weidenbacher, Payton A-B., et al. "A ferritin-based COVID-19 nanoparticle vaccine that elicits robust, durable, broad-spectrum neutralizing antisera in non-human primates." *Nature Communications* 14.1 (2023): 2149.
4. Murugova, T. N., et al. "Low resolution structural studies of apoferritin via SANS and SAXS: The effect of concentration." *J. Optoelectron. Adv. Mater* 17.9-10 (2015): 1397-1402.

РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДВУМЕРНЫХ НАНОСИСТЕМ НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОСТИ. ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «ЛЕНГМЮР» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*Н.Н. Новикова¹, А.Л. Тригуб¹, А.В. Рогачев¹, Л.Р. Муфтахова¹,
К.В. Николаев^{1,2}, С.Н. Якунин¹*

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

² *Московский физико-технический институт, Долгопрудный*

Представлен краткий обзор исследований в области биоорганического материаловедения, проводимых на экспериментальной станции “Ленгмюр” Курчатовского источника синхротронного излучения. Исследовательские возможности станции с использованием метода стоячих рентгеновских волн продемонстрированы на примере серии экспериментов, посвященных изучению механизмов повреждения молекулярной организации легочного сурфактанта под действием наноаэрозольных частиц. Еще одна рентгеновская методика, реализованная на станции “Ленгмюр” – метод двумерной дифракции в геометрии скользящего падения, обеспечивает возможность изучать кинетику структурообразования в двумерных системах на поверхности жидкости. Измерения с использованием метода двумерной дифракции позволили провести *in situ* исследования сложных процессов реорганизации монослоя жирной кислоты при взаимодействии с ионами редкоземельных металлов. Особое внимание уделяется экспериментальной постановке метода рентгеновской спектроскопии поглощения для измерений на поверхности жидкости. В докладе обсуждаются результаты исследований белковых монослоев на межфазной границе воздух–жидкость.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение от 30.05.2025 № 075-15-2025-512).

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ В ЛЕНГМЮРОВСКИХ СЛОЯХ: ОТ МОНОСЛОЕВ, К МЕЗОМОРФНЫМ ПОЛИСЛОЯМ И 3D КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Ю.Н. Малахова¹, А.И. Бузин², А.В. Бакиров^{1, 2}, С.Н. Чвалун^{1, 2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН

Макромолекулы зачастую способны не только формировать упорядоченный ленгмюровский слой на поверхности воды, но и претерпевать структурные изменения при изменении площади межфазной поверхности. Например, мезоморфный циклолинейный полиорганосилоксан (ЦЛПОС) формирует ленгмюровский монослой, состоящий по данным GIXD, из параллельных цепей в вытянутой конформации, который интерпретируется как плотный квазидвумерный нематический жидкий кристалл [1]. После коллапса монослоя происходит фазовый переход первого рода с образованием бислоя. Дальнейшее сжатие сопровождается последовательным формированием тройного и далее до шестикратного полислоя со значительной степенью структурного порядка по данным GIXD как в плоскости каждого слоя, так и между слоями, которому соответствует многоступенчатая форма изотерм поверхностного давления [1, 2]. Формирование полислоев также было зафиксировано и для мезоморфных частично фторированных полидиалкоксифосфазенов (ПДАФ) при сжатии на поверхности воды. При этом GIXD и ПДАФ, и ЦЛПОС показывает только один дифракционный пик как для моно-, так и для полислоевой структуры, а значения длины корреляции в плоскости слоя, достигающие нескольких сотен ангстрем, указывают на определенный мезомасштабный порядок [1, 3, 4]. Ступенчатые полислоевые изотермы поверхностного давления были обнаружены не только у мезоморфных элементоорганических полимеров с цепями в вытянутой конформации, но и для сферических макромолекул-частиц — карбосилановых дендримеров высоких генераций. Более высокая степень упорядочения, а именно образование 3D кристаллической фазы, может наблюдаться при дальнейшем сжатии мезоморфной полислоевой структуры, например, в случае ПДАФ [3]. Кристаллизация без образования мезофазы в ленгмюровских слоях была обнаружена, например, для поликапролактона и полианилина.

Работа частично проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» на оборудовании ресурсных центров и КИСИ-Курчатов.

1. Y. K. Godovsky, et al. *Macromolecules*. 37, 13 (2004).
2. T. R. Jensen, et al., *Macromolecules*. 36, 19 (2003).
3. A. I. Buzin, et al., *Macromolecules*. 48, 10 (2015).
4. A. I. Buzin, et al., *MATEC Web of Conferences*. 98 (2017).

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ФТАЛОЦИАНИНА В ПЛАВАЮЩИХ СЛОЯХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

А.В. Казак^{1,2,3}, М.А. Марченкова², И.В. Рыков⁴, А.В. Рогачев⁵, Т.В. Дубинина^{3,4},
Б.В. Набатов², А.Ю. Толбин³

¹Ивановский государственный университет, Иваново

²«Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники, Москва

³Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка

⁴Московский государственный университет им М.В. Ломоносова, Москва

⁵НИЦ «Курчатовский институт», Москва

alexkazak86@gmail.com

Актуальность представленного исследования заключается в том, что плёнки, полученные Ленгмюровскими методами, обладают высокой степенью упорядоченности и однородности. Это связано с тем, что молекулы в монослое ориентированы определённым образом, что позволяет создавать упорядоченные структуры на поверхности подложки. Морфология плёнок может быть контролирована путём изменения условий переноса. Самые точные методы изучения структуры плавающих слоев и пленок Ленгмюра-Шеффера – рентгеновские методы. С их помощью можно получить информацию о внешней и внутренней структуре наномасштабных объектов, их размерах, особенностях расположения и внутренней молекулярной архитектуре неоднородностей плотности и/или структуры. Плавающие (Ленгмюровские) слои формировали из растворов исследуемых соединения в хлороформе, на установках Nima 601A, KSV 5000 и KSV 2000 (Финляндия). Системы очистки воды: Millipore Elix 3, Millipore Simplicity 185. Для исследования структурной организации плавающих слоев был применен метод дифракции в скользящей геометрии (GID) и стоячих волн на станции «Ленгмюр» Курчатовского источника синхротронного излучения. Тонкие пленки получали последовательным переносом слоев исследуемого соединения с поверхности воды на кремниевые и стеклянные подложки. Перенос слоев с поверхности воды осуществлялся методом Ленгмюра-Шеффера (горизонтальный лифт). Топологию поверхности и толщину пленок, нанесенных на кремниевые подложки ($n=1$), оценивали с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) в полуконтактном режиме с помощью микроскопа Solver 47 Pro (НТ-МДТ, Россия).

Таким образом, в данной работе объектами исследования являлись производные фталоцианина различного строения. Для создания новых эффективных малодефектных тонкопленочных материалов на их основе определялась структура получаемых плавающих слоев и тонких пленок.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-20034

САМОСБОРКА КООРДИНАЦИОННОГО ПОЛИМЕРА НА ОСНОВЕ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) И РУТЕНИЯ(II) НА МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

*А.В. Аракчеев¹, А.П. Кройтор¹, А.А. Дмитриенко¹, А.Г. Мартынов¹,
С.Л. Селектор¹*

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, 119071, Москва, Ленинский проспект д. 31, корп. 4

pcss_lab@mail.ru

Планарные наноматериалы, как базовые элементы новейших электронных устройств привлекают внимание учёных несколько десятилетий. Однако, методы сборки двумерных координационных полимеров (КП) с управляемыми свойствами остаются недостаточно разработанными. Очевидно, что изучение таких систем, а также определение механизмов переключений в них невозможно без применения рентгеновских поверхностно-чувствительных методов анализа. В данной работе, с помощью реализуемой на станции «Ленгмюр» «КИСИ-Кручатов» новаторской методики одновременной регистрации рентгеновской флуоресценции поверхностного слоя при возбуждении в область края поглощения и UV-Vis спектров поглощения монослоя, были изучены характерные особенности формирования КП на основе смешанных монослоёв Ленгмюра тетрапиррольных комплексов никеля(II) и рутения(II).

С помощью *in situ* XANES спектроскопии во флуоресцентной моде монослоя на поверхности воды впервые был доказан факт индуцированного аксиальной координацией спин-кроссовера Ni(II), происходящего в процессе сборки КП на границе воздух/вода. Для смешанных Ленгмюровских монослоёв исследуемых комплексов с помощью метода поверхностной дилатационной реологии и микроскопии угла Брюстера определены характерные особенности структурообразования на межфазной границе. Определена зависимость силы образующейся координационной связи от донорно-акцепторных свойств аксиальных и периферических заместителей в исследуемых комплексах.

Благодаря использованию XANES спектроскопии в геометрии скользящего падения рентгеновского пучка для твердотельных образцов, получены доказательства возможности переноса координационного полимера на твёрдую подложку методом Ленгмюра-Блоджетт, что позволяет проводить дальнейшую работу по изучению планарных ансамблей в условиях, близких к реальным электронным устройствам.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 23-73-00037

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ И РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НОВЫХ ТИПОВ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ ДЛЯ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

*М. Балашою¹, С.Н. Лысенко², С.А. Астафьева², А.И. Иванов¹,
А.Х. Эльмекави¹, О.Н. Лис¹, Е.В. Лукин¹, О.Л. Орелович¹*

¹ ОИЯИ, Дубна, 141980, Россия

² ИТХ УрО РАН, Пермь, 614013, Россия

Феррожидкости (ФЖ) представляют собой коллоиды магнитных наночастиц в жидкой среде. Во всех применениях ФЖ состав, размер и форма частиц остаются важнейшими параметрами, поскольку от них сильно зависят многие химические и физические свойства наночастиц. В настоящей работе представлены исследования ряда наночастиц ферритов двухвалентных металлов в порошках или водных феррожидкостях, различающихся по составу, размеру и форме.

Благодарность. Авторы выражают благодарность О. Вышиванной за анализ методом просвечивающей электронной микроскопии.

1. S. Lysenko, A. Lebedev, S. Astaf'eva, D. Yakusheva, M. Balasoiu, A. Kuklin, Yu. Kovalev, V. Turchenko, *Physica Scripta* 95 044007 (2020)
2. M. Balasoiu, S. Astaf'eva, S. Lysenko, D. Yakusheva, E. Kornilitsina et al., *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 17(3), 730-737 (2023)
3. M. Balasoiu, S. Astaf'eva, S. Lysenko, D. Yakusheva, E. Kornilitsina et al., *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 18(3), 736-744 (2024)
4. M. Bălăsoiu, D. Buzatu, O. Ivankov, A.-M. Bălăsoiu–Găină, S. Lysenko, S. Astaf'eva and C. Stan, *U.P.B. Sci. Bull., Series A*, 82(4) 249-258 (2020)

СТРУКТУРА ПОЛИМЕРНЫХ АЭРОГЕЛЕЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ РАСТВОРЕНИЕМ ПОЛИАМИДА 6,6

*А.Е. Баранчиков¹, С.А. Лермонтов², С.Ю. Котцов¹, Г.С. Таран¹,
А.Н. Малкова², Э.А. Труфанова¹, А.С. Бадулина¹, Ю.Е. Горшкова³,
Г.П. Копица⁴*

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

²*Институт физиологически активных веществ ФИЦ Проблем химической физики и
медицинской химии*

³*Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М. Франка, Объединенный Институт
Ядерных Исследований, Дубна*

⁴*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова - НИЦ
«Курчатовский институт», Гатчина*

Аэрогели представляют собой перспективную платформу для создания ряда функциональных и теплоизоляционных материалов, сочетая в себе высокую удельную поверхность, пористость и низкую плотность. С точки зрения химического состава аэрогели можно условно разделить на два класса: неорганические и органические. За последнее десятилетие были синтезированы многие типы органических, в первую очередь полимерных, аэрогелей путем применения подходов золь-гель технологий к термопластичным синтетическим полимерам.

В настоящей работе методом растворения полиамида 6,6 в диметилацетамиде в присутствии хлорида лития получены полимерные гели, сверхкритическая сушка которых позволила получить монолитные высокопористые полимерные аэрогели с удельной поверхностью $20 \div 70 \text{ м}^2/\text{г}$, удельным объемом пор $0.1 \div 0.4 \text{ см}^3/\text{г}$ и удельной пористостью $60 \div 90\%$.

С использованием комплекса взаимодополняющих методов (ИК-спектроскопии, гелиевой пикнометрии, низкотемпературной адсорбции азота, СЭМ, РФА и МУРР) проведен детальный анализ структуры полученных материалов с учетом большого массива имеющихся литературных данных.

Установлено, что полученные аэрогели характеризуются значительно более высокой степенью кристалличности по сравнению с исходным полимером. Предложены структурные модели, описывающие характер МУРР на полиамиде 6,6, в том числе на соответствующих аэрогелях, с учетом различной степени кристалличности материалов. Они показывают, что наличие широкого пика в диапазоне переданных импульсов $0.05 \div 0.1 \text{ \AA}^{-1}$ может не отвечать упорядочению кристаллических ламеллярных доменов в аморфной фазе полиамида 6,6, а свидетельствовать о наличии ближнего порядка во взаимном расположении неоднородностей (частиц (пор)) в структуре аэрогеля.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ (грант №23-73-00028).

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КАРБОСИЛАНОВЫХ ДЕНДРИМЕРОВ ВЫСОКИХ ГЕНЕРАЦИЙ: ОТ ЗАПОЛНЕНИЯ ПРОСТРАНСТВА К ПЛОТНОЙ УПАКОВКЕ

А.В. Бакиров^{1,2}, М.А. Щербина^{1,3}, А.М. Музафаров^{1,4}, С.Н. Чвалун^{1,2}

*1Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, ул.
Профсоюзная, 70, Москва, 117393*

*2Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», пл. Академика
Курчатова, 1, Москва, 123098*

*3Московский физико-технический институт (национальный исследовательский
университет) Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская обл., 141701*

*4Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, ул. Вавилова, 28,
Москва, 119334*

Карбосилановые дендримеры высоких генераций проявляют свойства как макромолекул, так и наночастиц и позволяют моделировать сложную задачу упаковки мягких квазисферических объектов в хорошо организованную трехмерную структуру. В работе предложен оригинальный подход к кристаллизации дендримеров высоких генераций с использованием процедуры отжига в парах растворителя^{1,2}. Выявление общих особенностей мезофаз, образующихся в дендримерах нескольких генераций, включая образование плотноупакованной кубической FCC и переходов из примитивной кубической BCC в FCC, позволяет понять и выявить общие свойства процесса кристаллизации, происходящего в результате нарушения симметрии.

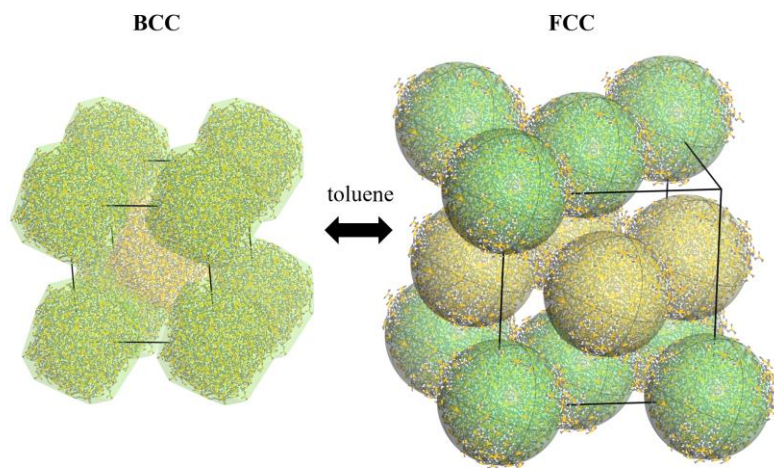


Рисунок 1. Схема фазового перехода при отжиге в парах толуола дендримера G6.

1. Bakirov A.V., Tatarinova E.A., Milenin S.A., Shcherbina M.A., Muzafarov A.M. and Chvalun S.N., *Soft Matter*, 2018, 14, 9755-9759.

2. Bakirov A.V., Shcherbina M.A., Milenin S.A., Tatarinova E.A., Buzin A.I., Muzafarov A.M., Chvalun S.N. *Macromolecules* 2024, 57, 4, 1625–1631.

Секция

Электронная, ионная и конфокальная микроскопия

РАЗВИТИЕ УЛЬТРАБЫСТРОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

А.А. Ищенко², С.А. Асеев¹, Д.Г. Пойдашев¹, Е.А. Рябов¹,

¹ *Институт спектроскопии РАН, ул. Физическая, 5, Троицк, 108840 Москва*

² *МИРЭА — Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М. В. Ломоносова, проспект Вернадского, 86, 119571 Москва*

Электронная микроскопия, начиная от работ Р. Руденберга, М. Кнолля и Э. Руски в 1931 году, являлась мощным инструментом исследования веществ, находящихся в равновесии или близких состояниях. Однако для получения более полного представления об изучаемом объекте необходимо использовать методы, позволяющие дать информацию о связи элементов триалы “структура-динамика-функция” во временных масштабах происходящих процессов.

Использование ультракоротких фотоэлектронных импульсов открыло возможность изучения структурной динамики с высоким пространственно-временным разрешением. В этой методологии импульсный электронный сгусток, сформированный за счет фотоэлектронного эффекта, обеспечивает когерентное зондирование динамики быстропротекающих фотоиндуцированных процессов в веществе, возбуждаемых тем же источником лазерного излучения. Интеграция фемтосекундной лазерной технологии и электронной оптики оказалась чрезвычайно эффективной для изучения структурной динамики в естественных масштабах пространственно-временного континуума. В режиме визуализации эта концепция привела к созданию 4D электронной микроскопии, а в режиме электронной дифракции появилась уникальная возможность регистрировать атомно-молекулярные фильмы.

Высокая чувствительность метода в сочетании с низким радиационным повреждением образца позволила исследовать структурную динамику фотохимических реакций, функциональные материалы на компактных установках в стандартных лабораториях.

В докладе рассматривается развитие этого научного направления - от изучения наносекундной структурной динамики до фемтосекундной квантовой томографии, основанной на ультрабыстрой электронной дифракции.

IN SITU ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СУБЛИМАЦИИ, ТРАВЛЕНИЯ, ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ, АДсорбЦИИ МЕТАЛЛОВ И ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА НА ПОВЕРХНОСТЯХ КРЕМНИЯ И КАРБИДА КРЕМНИЯ

А.С. Петров^{1,2}, Д.И. Рогило^{1,2}, Е.Е. Родякина^{1,2}, С.В. Ситников¹,
Д.Е. Дураков^{1,2}, Д.В. Щеглов¹, А.В. Латышев^{1,2}

¹ Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Обеспечение предельных характеристик гетероструктур пониженной размерности обуславливается умением прецизионно контролировать атомные процессы на поверхности кристаллических подложек в ходе эпитаксиального роста. Сверхвысоковакуумная отражательная электронная микроскопия (СВВ ОЭМ) является эффективным *in situ* методом для изучения атомарных процессов на поверхностях кристаллических подложек в реальном времени, обладающим достаточной чувствительностью для анализа структуры поверхности [1]. Метод позволяет получать картины дифракции быстрых электронов на отражение (100 кэВ) и электронно-микроскопические изображения в брэгговском контрасте, что обеспечивает визуализацию морфологии на уровне отдельных моноатомных ступеней и областей с разной сверхструктурной реконструкцией. В настоящей работе представлены результаты исследований методом *in situ* СВВ ОЭМ морфологических и структурных трансформаций на поверхностях Si(111), Si(100) и 6H-SiC(1000) при высокотемпературной сублимации (вплоть до температур плавления) [1–4], травлении кислородом [2] эпитаксиальном росте (Si, Ge) [5], осаждении металлов [5,6] (Sn, In, Bi, Sb, Pb). Были изучены физические закономерности формирования самоорганизованных структур за счет эффектов электромиграции и неравномерного движения ступеней, обусловленных нагревом подложки электрическим током, а также осаждением примесных материалов. Впервые визуализирована vicинальная поверхность 6H-SiC(1000) в процессе высокотемпературного отжига. Была получена новая информация об атомных процессах на поверхностях Si(111) и Si(100), позволившая развить способы управления структурой поверхности Si для последующего роста эпитаксиальных полупроводниковых и металлических покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-72-30023) на оборудовании ЦКП «Наноструктуры».

1. A. V. Latyshev, A. B. Krasilnikov, et al., Appl. Surf. Sci. 60–61, C (1992).
2. S. V. Sitnikov, A. V. Latyshev, et al., J. Cryst. Growth, 457, 1 (2017).
3. E. E. Rodyakina, S. V. Sitnikov, et al., Siberian Journal of Physics, 14, 1 (2019).
4. A. S. Petrov, S. V. Sitnikov, et al., Semiconductors. 53, 4 (2019).
5. A. S. Petrov, D. I. Rogilo, et al., Appl. Surf. Sci. 609, 1 (2023).
6. A. S. Petrov, D. I. Rogilo, et al., Surf. Sci. 741, 1 (2024).

РАСПЫЛЕНИЕ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ БИНАРНЫХ МАТЕРИАЛОВ И МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР В КРАЕВОМ РЕЖИМЕ

Н.И. Боргардт, А.В. Румянцев, Р.Л. Волков

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Использование краевого режима распыления, реализуемого при построчном сканировании фокусированного ионного пучка (ФИП), позволяет уменьшить концентрацию Ga в приповерхностной области формируемых в кремнии структур [1]. В работе изучается распыление в данном режиме практически важных бинарных материалов и многослойных подложек.

Тестовые структуры глубиной примерно 0.5 мкм формировались в приборе Helios NanoLab 650 с использованием ионов галлия с энергией 30 кэВ. Осесимметричные углубления изготавливались в SiO₂ с нанесенным тонким слоем Cr, а прямоугольные углубления – в подложке Si, покрытой пленкой Al толщиной около 200 нм (Al-Si). Тонкие фольги поперечного сечения структур исследовались в микроскопе Titan Themis 200 методами просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) и рентгеновского микроанализа.

На Рис. 1 приведены РЭМ- (а) и ПРЭМ-изображения (б) осесимметричного углубления. На Рис. 1в показаны усредненные по глубине профили концентрации атомов Ga (C_{Ga}) для углублений, полученных с использованием построчной и стандартной многопроходной стратегий сканирования, при использовании второй из них содержание Ga увеличивается почти на порядок.

Для углублений, приготовленных в подложке Al-Si, в области их дна выявлен слой Al толщиной 6 нм. Его наличие указывает, что уменьшение C_{Ga} при краевом воздействии ФИП связано с вторичным распылением материала атомами, выбитыми ионным пучком с наклоненной боковой стенки структуры.

Таким образом, показано, что распыление в краевом режиме эффективно для формирования структур в SiO₂, а изучение углублений в Al-Si позволило расширить представления о происходящих при этом процессах.

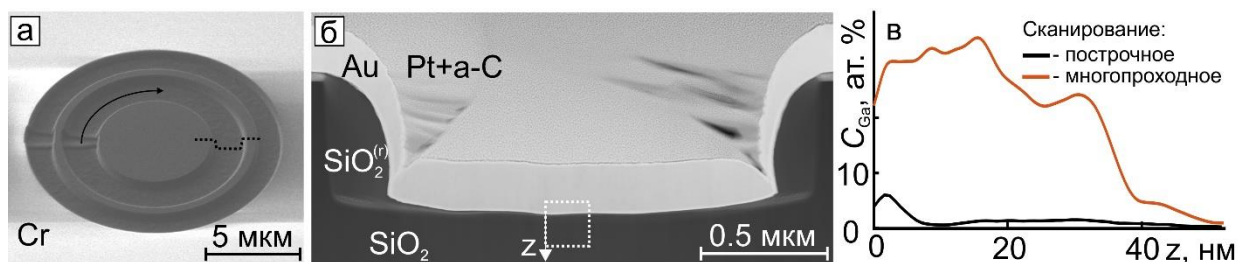


Рис. 1. РЭМ-изображение осесимметричного углубления (а), ПРЭМ-изображение его сечения, отмеченного пунктиром на (а), и профили распределения Ga по глубине (в).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 23-19-00649).

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В ПЛЕНКАХ NiO ПОСЛЕ ОТЖИГА

*А.Л. Васильев¹, И.Н. Трунькин¹, Э.М. Пашаев¹, А.П. Носов²,
И.А. Субботин¹, А.О. Беляева¹, О.А. Кондратьев¹, С.Г. Николаева¹*

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

NiO – материал с антиферромагнитным типом упорядочения магнитной подсистемы может найти применение в устройствах антиферромагнитной спинтроники, которые мало чувствительны к возмущениям внешних магнитных полей, характеризуются улучшенными высокочастотными характеристиками и проявляют уникальные магнитротранспортные свойства [1]. Дополнительные перспективы возможных применений NiO могут быть связаны с его легированием 3d-металлами, такими как железо или кобальт, за счет которого можно существенно влиять на различные характеристики магнитной подсистемы NiO [2,3].

Результаты электронно-микроскопических и рентгеновских исследований пленок оксида никеля с содержанием Fe – 0.5-2% показали, что при напылении NiO на подложку Al₂O₃ магнетронным напылением параметры кристаллической решетки оксида никеля меняются в зависимости от толщины плёнки. После отжига системы NiO/Al₂O₃ происходит выход железа из решетки NiO и его сегрегация на межзеренных границах и интерфейсе пленка/подложка. Кроме этого происходит рост двойников. В результате твердотельной реакции, стимулированной термическим воздействием в области интерфейса происходит образование шпинели FeAl₂O₄. Выход железа сопровождается уменьшением параметра решетки NiO, уменьшением содержания кислорода, что, по-видимому, приводит к падению плотности дефектов в пленке NiO.

1. Jungfleisch M.B., Zhang W., Hoffmann A. Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. 382 (13), 865 (2018).
2. Wang J. et al. Appl Phys Lett. 87 (20), 1 (2005).
3. Mallick P., C. Mishra N. Am.J.Mat.Sci. 2 (30), 66 (2012).

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В ОКРЕСТНОСТИ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ МЕЖДУ ПОДЛОЖКОЙ КРЕМНИЯ И ЭПИТАКСИАЛЬНЫМ СЛОЕМ Ge-Sb-Te

А.С. Приходько¹, Е. Залло², Р. Каларко³, Н.И. Боргардт¹

¹ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

² *Институт Вальтера Шоттки, Технический университет Мюнхена*

³ *Институт Микроэлектроники и Микросистем (ИММ)*

Эпитаксиальные пленки Ge-Sb-Te (GST) на подложках Si представляют интерес для устройств фазовой памяти. Известно, что на границе между GST и подложкой Si пассивированной атомами Sb образуются дислокации несоответствия [1], структура которых недостаточно изучена. В настоящей работе влияние несоответствия решеток GST и Si на позиции атомов Sb в окрестности дислокации изучалось методом количественной высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии.

Положение атомов Sb в области дислокации определялось с помощью итеративной процедуры сопоставления экспериментальных и расчетных микрофотографий. Для нахождения усредненного распределения атомов в окрестности экстраплоскости (рис. 1а) экспериментальные изображения усреднялись вдоль границы аналогично [2]. Для расчета микрофотографий (рис. 1б) использовалась атомистическая модель, позиции Sb в которой задавались в соответствии с плотностью распределения атомов $\rho(x,y)$ с двумя подгоняемыми параметрами. Найденная функция $\rho(x,y)$ на рис. 1в показывает, что в области экстраплоскости углы связей Si-Sb варьируются в диапазоне до $\approx 10^\circ$. Профили интенсивности для расчетной и экспериментальной микрофотографии, построенные вдоль стрелки А на рис. 1а, 1б демонстрируют хорошее согласие экспериментальных и расчетных изображений.

Таким образом, структурные электронно-микроскопические исследования показали, что на границе GST/Si связи Si-Sb отклоняются от нормального к границе направления. Величина этого отклонения достигает максимального значения в области ядра дислокации и постепенно уменьшается по мере удаления от него.

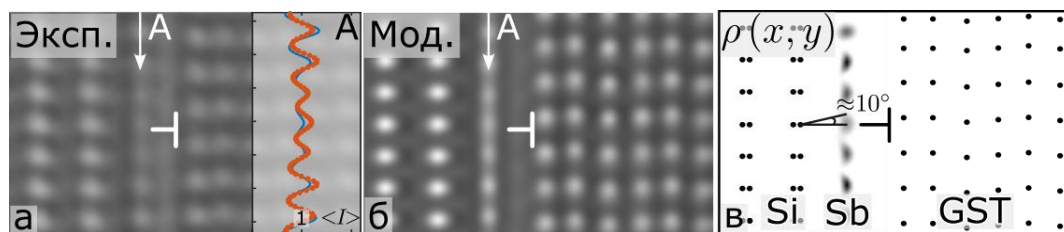


Рис.1 – (а) – экспериментальное и (б) расчетное на основе атомистической модели (в) изображения дислокации несоответствия между Si и GST

1. Ross, U., Lotnyk, A., et al.,. Journal of Alloys and Compounds, 676 (2016).

2. Borgardt N.I., Plikat B., et. al., Phys. Rev. B, 70 (2004).

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА РЕЛЬЕФНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЭМС-КНИМТ ЧИПА ТЕНЗОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ДАВЛЕНИЯ МЕТОДОМ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Л.В. Соколов

АО «Раменское приборостроительное конструкторское бюро»

Цель исследования – оптимизировать конструктивные параметры преобразователя давления на основе экспериментальных исследований распределения остаточных упругих напряжений на рельефной поверхности МЭМС-КНИМТ чипа мембранного тензопреобразователя с целью достижения максимальной чувствительности датчика.

Объектом исследования являются упругие статические напряжения [1], возникающие на границах раздела микромеханической КНИ-гетероструктуры: монокремниевая тензорамка – слой стекловидного диэлектрика – монокремниевая мембрана. Монокремниевая тензорамка состоит из четырёх равных частей, образующих симметричный измерительный мост.

Исследования выполнялись с помощью микроскопа комбинационного рассеяния Senterra II фирмы ООО “Bruker” [2] на пилотной партии чипов тензопреобразователя, изготовленных в рамках выполнения НИР «Исследование структур кремний на изоляторе и способов формирования ЧЭД на основе КНИ гетероструктуры для создания датчиков давления нового поколения».

Экспериментально установлен характер распределения остаточных упругих напряжений в локальных областях микромеханической структуры, а также определены величины и знак напряжений на рельефной поверхности чипа МЭМС-КНИ тензопреобразователя давления. Максимумы статических напряжений сжатия 870 МПа обнаружены на боковых гранях $\{111\}$ тензорамки вблизи границы их пересечения с плоскостью $[100]$ мембраны в центре рамки вдоль её поперечной оси.

Для подтверждения ожидаемых технических характеристик инновационных МЭМС-КНИМТ тензопреобразователей давления необходимо выполнение ОКР. Имеется проблема финансирования ОКР.

1. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1988. 712 с.
2. Woo Sik Yoo et al. // J. Micro/Nanolithogr. MEMS.MOEMS. 2014. V. 13(1). Art. № 011205.

АНАЛИЗ ВКЛАДА РАЗЛИЧНЫХ ЧАСТЕЙ АМИЛОИДНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКА Sup35 В ПОДДЕРЖАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ФИБРИЛЛ И ФЕНОТИПИЧЕСКОЕ ПРОЯВЛЕНИЕ «СИЛЬНОГО» И «СЛАБОГО» ВАРИАНТОВ ПРИОНА [PSI+]

*А.А. Дергалева¹, Ю.М. Чесноков², А.Д. Бурцева¹,
Т.Н. Баймухамедов², О.В. Митькевич¹, К.М. Бойко¹, В.В. Кушниров¹*

¹*Институт Биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН*

²*НИЦ «Курчатовский институт»*

Поиск моделей, объясняющих взаимосвязь трехмерной структуры амилоидных полиморфов с их фенотипическими проявлениями в клетках и организмах, является одной из неразрешенных проблем амилоидной биологии. В то время как в многоклеточных организмах поиск подобной модели сильно затруднен их сложностью, прионы одноклеточных организмов представляют собой более удобную модель, так как в их случае связь между физико-химическими свойствами прионных полимеров и их наблюдаемыми фенотипическими проявлениями проще реконструировать. Дрожжевой прион [PSI+] (наследуемые амилоиды белка Sup35), представлен «сильными» и «слабыми» структурными вариантами. Ранее мы показали, что основная часть амилоидной структуры, детерминирующая фенотип, находится в пределах с 2 по 72 а.к. как для сильных, так и для слабых вариантов, и разделяется на область 1А и 1Б. В данной работе методом крио-электронной микроскопии мы разрешили структуру Области 1 сильного варианта [PSI+] с разрешением 2,72 Å в пределах с 2 по 64 а.к. Помимо канонических водородных связей, участвующих в образовании кросс-бета слоев, данная структура имеет множество элементов, стабилизирующих фибриллу как в плоскости амилоидных протомеров, так и в направлении продольной оси фибриллы — в частности, стерические молнии и межмолекулярные π - π взаимодействия остатков тирозина. В частности, область 1Б образует элементы «стерической молнии» с частью области 1А. Используя протеазное картирование в комбинации с биохимическими и генетическими тестами, мы показали, что замена G58D дестабилизирует структуру фибрилл сильного варианта, предположительно нарушая ассоциацию Области 1А с Областью 1Б. Также мы показали, что большинство известных мутаций, нарушающих поддержания приона [PSI+], ассоциированы с областью стерических молний в структуре сильного варианта приона.

СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК PZT С РАЗЛИЧНЫМИ ЭЛЕКТРОДНЫМИ СЛОЯМИ

*О.М. Жигалина^{1,2}, Д.Н. Хмеленин¹, М.Г. Федоренко², Д.С. Серегин³,
К.А. Воротилов³*

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

³РТУ МИРЭА

Целью данной работы было установление влияния структуры различных электродных слоев (Pt, LNO, Ru, Ni) на структуру сегнетоэлектрического пленок PZT и свойства полученных композиций.

Структуру слоев изучали методами растровой электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, просвечивающей растровой электронной микроскопии, электронной дифракции и энергодисперсионного анализа с использованием микроскопа TermoFisher Scientific Tecnaі Osiris (200кВ). Поперечные сечения композиций изготавливали методом фокусированных ионных пучков с использованием растрового электронного микроскопа TermoFisher Scientific Scios.

В работе изучены композиции PZT–Pt–TiO₂–SiO₂–Si, PZT–Ru–O–Ru–SiO₂–Si, PZT–LNO–Si, Ni–SiO₂–Si [1]. При формировании композиций с Ru электродом отжиг при T = 650 °С приводит к образованию оксидного поликристаллического слоя RuO толщиной 20 нм, расположенного между пленкой PZT и Ru электродом. Использование Ru в качестве нижнего электрода, в отличие от стандартного Pt, приводит к существенному увеличению размера зерен сегнетоэлектрической пленки PZT до 3-5 мкм. При этом включения TiO₂ по границам зерен Ru отсутствуют. Использование LNO в качестве нижнего электрода способствует образованию столбчатых ориентированных зерен слоя PZT: взаимная ориентация (100)LNO//(100)PZT, [100] LNO//[100] PZT. Включения TiO₂ по границам зерен LNO также не обнаружены.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт».

1. Izyumskaya N., Alivov Y. I., Cho S. J., Morkoç H. et al. Processing, structure, properties, and applications of PZT thin films.// Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 2007;32:30–44.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФРАГМЕНТА ЗОЛОТНОГО ВИТОГО ШНУРА ИЗ ПОГРЕБЕНИЯ 18 СПАСО-ПРЕОБРАЖЕННОГО СОБОРА (ПЕРЕСЛАВЛЬ ЗАЛЕССКИЙ) С ПОМОЩЬЮ МУЛЬТИДИСЦИПЛИНАРНЫХ МЕТОДОВ

Э.А. Грешников¹, Е.А. Созонтов¹, И.Н. Трунькин¹, О.А. Кондратьев¹,
И.И. Елкина²

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

²Институт археологии РАН, Москва

На поверхности оплетки пряденых нитей золотного витого шнура отобранного с фрагментов текстиля из погребения Спасо-Преображенского монастыря Переяславля Рязанского с помощью РФА-спектрометра Bruker были построены карты распределения химических элементов (рис 1а). Аналогичные карты построены для участка торцевого среза ленты металлической оплетки с помощью Helios Nanolab (рис 1б). На основании анализа построенных карт установлено, что в золотных пряденых нитях витого шнура металлическая оплетка выполнена из серебряной ленты. Присутствие Ag и Cl в одних и тех же локациях, согласно проведенному картированию, свидетельствует о коррозии хлором серебряной ленты, обернутой вокруг нитей ее сердечника. Присутствие других химических элементов на основе солей металлов обусловлено примесью из руды, почвы и протравой крашенных волокон. РЭМ-изображение волокна сердечника (рис 1с) позволило изучить морфологию волокна и определить его тип (шелк).

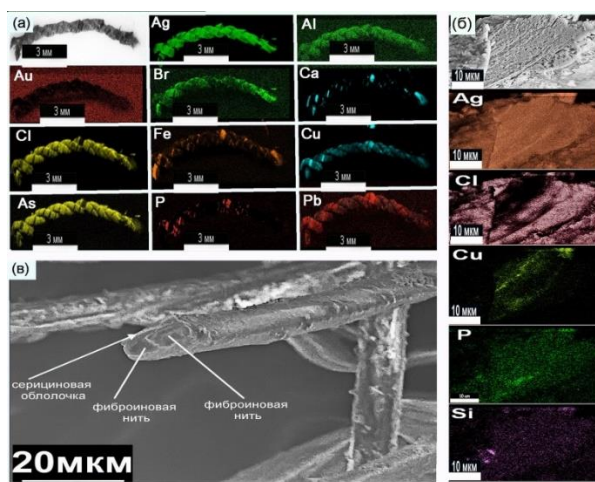


Рис. 1 Карты распределения химических элементов золотных пряденых нитей витого шнура построенных: (а) по поверхности, (б) по торцевому срезу - металлической оплетки, (в) РЭМ-изображение фрагмента волокна шелка из крашенной пряденной нити

Работа выполнена в рамках Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

СРЕДНЕВЕКОВАЯ НОВГОРОДСКАЯ БЕРЕСТЯНАЯ ГРАМОТА №13: МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ АНАЛИЗ

*Е.А. Созонтов¹, Э.А. Грешиников¹, П.Г. Гайдуков², С.Н. Малахов¹,
И.Н. Трунькин¹, О.А. Кондратьев¹*

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

² *Институт археологии РАН, Москва*

В ходе археологических работ в Новгороде под руководством Арциховского в 1952 г на Неревском раскопе была найдена берестяная грамота №13 с текстом. Стратиграфическая дата находки 30-е-40-е гг. XVв. Бересту №13 ожидала сложная судьба и долгое время она считалась утерянной. Совсем недавно она была вновь обнаружена при подготовке к переезду СПб филиала архива РАН в новое здание в сейфе реставратора, давно работавшего в архиве и уже умершего к этому времени. Грамота была передана в Архив ИИМК, из него в ИА РАН, который передал грамоту № 13 для исследований в НИЦ «Курчатовский институт». Методы исследования: Лазерная профилометрия, Рентгеновский флуоресцентный анализ и элементное картирование, Цифровое фотографирование высокого разрешения и компьютерная обработка, ИК спектроскопия, Оптическая микроскопия, Растровая электронная микроскопия.

Выводы: в результате проведенных экспериментов был подтвержден выявленный ранее при исследовании новгородской берестяной грамоты №1089 эффект самоокрашивания бересты при нанесении букв писалом с широкой пишущей кромкой, используя технику вдавливания, нарушающую структуру пробкового слоя бересты. Морфология и колористика поврежденной структуры поверхностного пробкового слоя современной бересты (образец сравнения) в области нанесения букв идентичны аналогичным следам, оставленным средневековым писалом на исторической бересте. Хорошо известно, и мы это также отмечали и подтвердили экспериментами по ИК-спектromетрии ранее при исследовании берестяной грамоты №1089, что в бересте содержатся красящие пигменты органического происхождения класса флавоноидов, а также дубильные вещества, закрепляющие выступающий в результате повреждения приповерхностного пробкового слоя природный краситель, содержащийся в бересте изначально. На основе этих данных, можно предположить изначальное отсутствие в поле букв текста на исторической бересте привнесенного извне пигмента. Установлены размеры и форма наконечника писала. Текст наносился писалом путем продавливания верхнего слоя бересты. По незначительной глубине следов букв и их небольшим размерам можно предположить, что стиль (регистр) письма близок к текстам, выполненным на пергамене или на бумаге, но при этом для нанесения текста не использовались специально приготовленные чернила.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА МИКРОСТРУКТУРУ ОБРАЗЦОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ ПУТЕМ ГОРЯЧЕГО ПРЕССОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА КРЕМНИЯ В ПОРОШКЕ КОБАЛЬТА

А.М. Большаков^{1,2}, М.С. Лукасов², В.В. Клечковская²

¹Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

² Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва

В термоэлектрических устройствах межфазные границы, являясь переходным состоянием от одной кристаллической структуры к другой, могут формировать третью фазу со своими физическими и кристаллографическими параметрами. Поэтому более широкое использование термоэлектричества требует не только улучшения внутренней эффективности преобразования энергии собственно термоэлектрических материалов, но и, учитывая возможность термодиффузии, анализа структуры приграничных слоев.

Влияние отжига на микроструктуру образцов, полученных методом горячего прессования исходных компонентов (монокристалла кремния и порошка кобальта), исследовалось с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), энергодисперсионного рентгеновского анализа (EDS) и дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD).

Установлено, что до отжига исходный образец содержит три переходных слоя на границе раздела компонентов Co/Si. Детальное исследование переходной области показало соответствие трем фазам силицидов кобальта: Co_2Si , CoSi и CoSi_2 . Известно, что идентифицированные фазы термодинамически стабильны при нормальных условиях (Lijun Zhang, 2006). Толщины слоев до отжига составили 7,18 мкм (Co_2Si), 21,03 мкм (CoSi) и 4,35 мкм (CoSi_2).

После отжига при 800 °С в течение 96 часов фаза CoSi_2 исчезла. Средняя толщина переходного слоя уменьшилась на 7,8 мкм. Анализ результатов, полученных методом дифракции обратно рассеянных электронов, подтвердил поликристаллическую структуру кобальта и монокристалличность кремния как до, так и после отжига.

Результаты работы демонстрируют влияние термической обработки на фазовый состав и микроструктуру переходного слоя, что важно для понимания процессов диффузии в системах Co-Si, применяемых в термоэлектрических устройствах.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Lijun Zhang, Yong Du, Honghui Xu, Zhu Pan, Experimental investigation and thermodynamic description of the Co-Si system // Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, vol.30, 2006, 470–481.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТАНТАЛОВЫХ КАТОДОВ, РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ, МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

А.В. Фокин¹, И.Н. Трунькин¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Производство медицинских изотопов вызывает большой практический и научный интерес. Сложное в эксплуатации оборудование требует высококачественных материалов, и в современном мире возникает острая необходимость оперативно менять страны-производители, подбирая необходимые материалы с удовлетворяющими характеристиками.

В ходе работ, проводимых в ускорителе производства мед. изотопов Siemens, были обнаружены различия между элементами, входящими в состав источника ионов, разных стран производства: Россия, США, Турция. Заявленные параметры одинаковы, но при работе турецких катодов наблюдались повышенные токи и нестабильность работы первые 40-50 часов. Для выяснения причин были проведены исследования методом растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного рентгеновского анализа. Исследования необходимы для повышения производительности и надежности работы оборудования.

Проведены исследования поверхности новых и отработанных катодов при разных ускоряющих напряжениях (30, 20, 18, 10 кэВ) для изменения глубины проникновения электронов. Установлено, что в новом турецком катоде наблюдается увеличенное содержание железа, относительно отработанного и всех иных катодов, при приближении к поверхности образца. То есть новые турецкие катоды имеют Fe-содержащее покрытие, разрушающееся в первые 40 ч. работы.

Было определено, что повышенное содержание железа негативно влияет на работы источника ионов. Наблюдается увеличение рабочего тока источника ионов (0,18-0,2 А по сравнению с 0,13-0,15 А), что негативно влияет на работу, а так же увеличивает вероятность возникновения аварийных ситуаций. Только по мере сгорания железа наблюдается улучшение работы и выход на режим, сопоставимый образцам России и США.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

Секция

Материаловедение и промышленные задачи

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АКТИВНЫХ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СУБСТАНЦИЙ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

А.В. Вологжанина¹, П.А. Буйкин^{2, 1}, П.В. Дороватовский³, Е.С. Куликова³,
А.А. Корлюков¹

¹ Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

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

³ НИЦ «Курчатовский институт»

Производство лекарственных препаратов нуждается в изучении возможных твердых форм активных фармацевтических субстанций (АФС) для таких целей фарминдустрии как контроль чистоты действующего вещества, качественный и количественный состав таблетированной массы, предотвращение патентных споров. Помимо этого, данные о кристаллическом строении фармацевтических субстанций в различном окружении дают возможность установить характерные типы координации, конформационную подвижность, возможные типы межмолекулярных взаимодействий, которые могут быть использованы для понимания механизма действия АФС. К сожалению, многие из них относятся к плохо кристаллизующимся соединениям, строение которых затруднительно определить с помощью лабораторных рентгеновских дифрактометров.

В ходе выполнения проекта был синтезирован ряд новых соединений: полиморфов, сольватов, сокристаллов, солей противораковых, противовирусных, противовоспалительных и др. фармацевтических препаратов. Их строение наряду с уже зарегистрированными, но структурно неохарактеризованными АФС было установлено с помощью монокристалльной и порошковой рентгеновской дифракции с использованием синхротронного источника излучения НИЦ «Курчатовский институт». Варьированием условий эксперимента установлены параметры, при которых из данных порошковой дифракции получают наиболее надежные структурные данные. Полученная информация о кристаллическом строении соединений, дифрактограммы, твердотельные ИК- и ЯМР спектры могут быть использованы в дальнейшем в фармацевтической промышленности.

Исследование поддержано Российским научным фондом (грант 23-73-00027).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ АЛЮМОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ СПЛАВА МАРКИ ВАС1 С ДОБАВЛЕНИЕМ ЧАСТИЦ WС, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

Ф.Л. Шошев, И.А. Богачев, П.Е. Кузнецова, В.Т. Эм, И.Д. Карпов

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва

admin@viam.ru

Методом дифракции нейтронов проведен количественный анализ данных остаточных напряжений на синтезированных методом селективного лазерного сплавления (СЛС) пластинах в виде призмы 10×10×50 мм из алюмоматричного композиционного материала на основе сплава марки ВАС1 с добавлением частиц WС. В образце в состоянии после СЛС присутствуют значительные внутренние напряжения – у поверхности обнаруживаются растягивающие напряжения до 150 МПа, в то время как в центре образца сжимающие до 250 МПа. Полученные данные позволили подобрать оптимальный режим термической обработки для снятия остаточных напряжений в исследуемых образцах. После термообработки разница в напряжениях на поверхности и в центре образца составляет не более 40 МПа. Достигнутые результаты позволяют учитывать величину остаточных напряжений в синтезированном материале после процесса печати для прогнозирования геометрических искажений деталей более сложной конфигурации.

АНАЛИЗ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ АДДИТИВНЫМ СПОСОБОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

*В.Т.Эм¹, И.Д. Карпов¹, Б.С. Волосков², А.Н. Федоренко², С.А. Евлашин²,
И.В. Сергеичев²*

¹*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

²*АНОО ВО «Сколковский институт науки и технологий»*

Целью работы было провести нейтронным методом исследование остаточных напряжений (ОН) в образцах цилиндрической формы и в форме пластин, изготовленных методом селективного лазерного сплавления (СЛС) из аустенитной стали 316L. Исследования проводились на стресс-дифрактометре СТРЕСС реактора ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт». Для выделения пробного объема (ПО) в образцах использовались щели шириной от 0.2 мм до 1 мм. При измерении цилиндрических образцов для увеличения количества отражающих зерен в ПО образцы вращались вокруг своей оси. Для уменьшения биений образца при вращении образец с помощью 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. Показано, что распределение ОН 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 ОН для одного размера диаметра (толщины). Распределение ОН других размеров можно рассчитать.

Исследование цилиндрических образцов (Ø11 мм) после отжига в интервале температур 600 – 1000⁰С, показало, что с увеличением температуры отжига ОН уменьшаются, но сохраняются до температуры 1000⁰С. Увеличение времени отжига от 1 часа до 2 часов, не приводит к заметному изменению ОН. Показано, что распределение ОН, в единицах, приведенных к пределу текучести при температуре отжига, одинаково для всех температур.

Работа выполнена на оборудовании уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» при поддержке гранта Российского научного фонда №24-19-00484

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

*А.Н. Федоренко¹, Б.С. Волосков¹, С.А. Евлашин¹, И.Д. Карпов², В.Т. Эм²,
И.В. Сергеичев¹*

¹*АНОО ВО «Сколковский институт науки и технологий», Центр технологий материалов*

²*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Курчатовский
комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Отдел нейтронных
экспериментальных станций*

Возникновение существенных остаточных напряжений характерно для большинства деталей, изготавливаемых по технологии селективного лазерного сплавления (PBF-LB). Моделирование остаточных напряжений помогает подобрать общую стратегию и эффективные режимы печати, оценить влияние дополнительных поддержек и предложить зоны для их установки. На практике, из-за ограничений вычислительных ресурсов, распространено использование упрощенных подходов к термомеханическому моделированию, не учитывающих всей полноты физических процессов, свойственных PBF-LB. В частности, не учитываются локальные температурные пики, а размер расчетной сетки соответствует десяткам реальных слоев сплавленного порошка [1]. Однако, подобные модели требуют калибровки, и наиболее полное экспериментальное представление позволяет получить метод нейтронной дифракции. В данной работе калибровка осуществлялась сопоставлением расчетных и экспериментальных данных по измерениям остаточных напряжений в образцах в форме параллелепипеда из нержавеющей стали, выраженных методом PBF-LB. Далее было проведено моделирование распределений остаточных напряжений в цилиндрических образцах разных диаметров и сравнение с экспериментальными измерениями на основе метода нейтронной дифракции. Кроме того, представлено сравнение с более простыми оценками на основе экспериментов с разрезанием образцов. Как один из аспектов подбора параметров модели, обсуждается проблема измерения основных механических параметров (модуль Юнга, предел текучести), определение которых при механических испытаниях в условиях без обработки (“as-built”) осложнено искажениями от эффекта остаточных напряжений в образцах. Эксперименты по измерению остаточных напряжений методом нейтронной дифракции были проведены на дифрактометре СТРЕСС (реактор ИР-8, НИЦ «Курчатовский институт»).

Исследование выполнено за счет гранта РНФ № 24-19-00484,
<https://rscf.ru/project/24-19-00484>.

1. A. N. Fedorenko, B. N. Fedulov, et al., Materials. 14, 23 (2021).

ЦИФРОВОЙ «ПОСТДОК» НА СИНХРОТРОНЕ: ТЕХНОЛОГИИ ИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ OPERANDO РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЙ МЕТРОЛОГИИ

А.В. Солдатов, А.А. Гуда, Б.О. Проценко, С.А. Гуда

Южный федеральный университет

Показано, что использование технологий искусственного интеллекта (глубокого машинного обучения) позволяет решать задачу анализа больших данных в режиме реального времени и успешно контролировать качество данных непосредственно в ходе комплексных экспериментов на источниках синхротронного излучения.

Основу подхода составляет независимый анализ трех частей спектра рентгеновского поглощения (области предкрая, области XANES и области EXAFS), что позволяет существенно увеличить достоверность результатов получаемых при независимом анализе этих трех наборов экспериментальных данных. Особенность такого подхода заключается в том, что он позволяет не только с высокой точностью (вплоть до 1-2 пикометров) определять межатомные расстояния (функцию радиального распределения), но и угловое распределение атомов – то есть параметры 3D локальной атомной и электронной структур материалов, включая возможность применения данного подхода для изучения зависящих от времени процессов.

Реализация настоящей методики имеет важное значение не только для проведения фундаментальных исследований, но и для последующего практического использования представителями высокотехнологичных предприятий. На основе разработанного прецизионного подхода к диагностике материалов на источниках синхротронного излучения можно создать метрологическую методику определения параметров наноразмерной локальной атомной и электронной структур материалов с анализом больших данных в режиме реального времени, в том числе в ходе технологически важных процессов (operando режим) и, практически без участия человека, специалиста в области спектроскопии. Важной особенностью данного подхода является то, что общение с созданным на основе технологий больших языковых моделей и машинного (глубокого) обучения цифровым ассистентом ведется в режиме диалога на естественном языке и не требует от пользователя продвинутых специальных знаний в области спектроскопии.

Разработка такой методики рентгеноспектральной нанометрологии крайне важна для решения задач создания и диагностики практически важных перспективных материалов с требуемыми уникальными свойствами, что необходимо для обеспечения технологического лидерства РФ в стратегически важных областях.

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (Соглашение No 075-15- 2025-509).

ЭКСПРЕСС-МЕТОД ОЦЕНКИ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ ПОЛУЧЕННЫХ АДДИТИВНЫМ СПОСОБОМ

*Б.С. Волосков¹, А.Н. Федоренко¹, С.А. Евлашин¹, И.Д. Карпов², В.Т. Эм²,
И.В. Сергеичев¹*

¹*АНОО ВО «Сколковский институт науки и технологий», Центр технологий материалов*

²*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Отдел нейтронных экспериментальных станций*

Аддитивные технологии, в частности селективное лазерное плавление (PBF-LB), позволяют изготавливать изделия сложной формы, однако сопровождаются высокими температурными градиентами, вызывающими остаточные напряжения и влияющими на механическое поведение. Снижение этих напряжений достигается термообработкой, но оценка её эффективности обычно требует длительных и дорогостоящих исследований. В данной работе предложен и апробирован экспресс-метод оценки остаточных напряжений, основанный на анализе диаграммы растяжения с разгрузкой. Метод позволяет выявлять влияние параметров термообработки на уровень остаточных напряжений в образце, при этом существенно уменьшает трудоемкость процедуры. Для его верификации использован надежный эталонный метод нейтронной дифракции на дифрактометре СТРЕСС (реактор ИР-8, НИЦ «Курчатовский институт»).

Апробация метода проведена на образцах коррозионностойкой стали 316L, полученных методом PBF-LB и подвергнутых отжигу (600–1000°C, время отжига 1–6 ч). Также, установлена связь параметров отжига с изменением остаточных напряжений, механических свойств и микроструктуры. Установлено, что цилиндрические образцы после печати характеризуются значительными сжимающими напряжениями в центральной области, переходящими в растягивающие ближе к поверхности. Обнаружена прямая зависимость между условиями отжига и степенью снижения остаточных напряжений. Показано, что повышенные температуры отжига способствуют не только снижению напряжений, но и эволюции микроструктуры: росту зерна и растворению ячеистой субструктуры. Эти процессы сопровождаются изменением совокупности механических свойств, включая снижение предела прочности и текучести.

Предложенный экспресс-метод позволяет значительно ускорить оценку эффективности снятия остаточных напряжений и может быть использован при оптимизации режимов термообработки в аддитивном производстве.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 24-19-00484, <https://rscf.ru/project/24-19-00484>.

ВЛИЯНИЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА СВЕРХМНОГОЦИКЛОВУЮ УСТАЛОСТЬ ОБРАЗЦОВ КОРРОЗИОННОСТОЙКОЙ СТАЛИ 316L ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

*И.В. Сергеев¹, Б.С. Волосков¹, А.Н. Федоренко¹, С.А. Евлашин¹,
И.Д. Карпов², В.Т. Эм²*

¹АНОО ВО «Сколковский институт науки и технологий», Центр технологий материалов

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Курчатовский
комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Отдел нейтронных
экспериментальных станций

Выполнены экспериментальные исследования сверхмногоциклового усталости (СМУ) образцов коррозионностойкой стали 316L, изготовленных методом селективного лазерного сплавления с внедренными искусственными дефектами заданного размера и формы, расположенными на заданном расстоянии от поверхности образцов. Анализ поверхностей разрушения показывает, что во многих случаях причиной образования трещин являлся не искусственный дефект, а случайный естественный дефект меньшего размера, но расположенный ближе к поверхности образца.

Касательно влияния расположения дефектов было отмечено, что трещины с большей вероятностью образуются в окрестности дефектов, расположенных ближе к поверхности. Однако эти дефекты все еще можно рассматривать как объемные дефекты. Дефект классифицируется как внутренний, когда соотношение r/d меньше 0,8 [Murakami, 2002], где r представляет собой радиус дефекта, а d - расстояние от центра дефекта до поверхности. В настоящем исследовании соотношение r/d находится в диапазоне 0,06–0,68. Это указывает на то, что трещина зарождается от внутреннего дефекта. С использованием соотношения r/d построена зависимость вероятности возникновения трещин, обусловленных искусственными дефектами от расстояния искусственного дефекта до поверхности образца. Эта зависимость сопоставлена с распределением остаточных напряжений вдоль радиуса образца.

Остаточные напряжения были определены методом нейтронной дифракции с использованием дифрактометра СТРЕСС, установленного на горизонтальном канале исследовательского реактора ИР-8 НИЦ «Курчатовский институт». Указанное сопоставление показало критическое влияние остаточных напряжений на процесс инициации и развития повреждений в аддитивных образцах стали 316L в режиме СМУ.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 24-19-00484, <https://rscf.ru/project/24-19-00484>.

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИН, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

М.М. Мурашев¹, В.Т. Эм¹, И.Д. Карпов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

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.

Исследования выполнены с использованием уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт».

Секция

Синхротронная и нейтронная визуализация

КОГЕРЕНТНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ *IN-LINE* ОПТИКА: 30 ЛЕТ ПУТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

А.А. Снигирев¹

¹ Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Тридцать лет назад, с появлением синхротронных источников третьего поколения, открылась уникальная возможность использовать их высокую когерентность для задач визуализации. Именно тогда была продемонстрирована практическая реализация метода *in-line* фазового контраста для рентгеновского излучения [1]. Совместно с внедрением высокоразрешающих 2D-детекторов [2] это положило начало новому направлению, которое сегодня стало одним из ключевых инструментов для исследования структуры и свойств вещества в материаловедении, биологии и медицине.

Важным этапом развития когерентной *in-line* оптики стало применение эффекта преломления для фокусировки и транспортировки рентгеновского излучения. Были предложены и реализованы составные преломляющие линзы (CRL, compound refractive lenses) [3], которые сегодня стали стандартным элементом синхротронной оптики. Развитие преломляющей оптики привело к созданию зум-объективов – трансфокаторов [4] позволивших формировать пучки и изображения с микронным и субмикронным разрешением. Это открыло новые возможности для микроскопии и томографии.

За три десятилетия метод *in-line* фазового контраста и преломляющая рентгеновская оптика превратились из экспериментальных идей в фундаментальные инструменты современной науки. Они определяют облик экспериментальных станций на новых источниках 4-го поколения [5] и продолжают находить всё более широкие применения – от фундаментальных исследований до медицинской диагностики.

1. A. Snigirev, I. Snigireva, et al., Rev. Sci. Instrum., 66 (12), 5486, (1995).
2. A. Koch, C. Raven, et al, J. Opt. Soc. Am., 15(7), (1998).
3. A. Snigirev, V. Kohn, et al, 384, 49, (1996).
4. G.B.M. Vaughan, J.P. Wright, et al, J. of Synchrotron Radiation, 18, 125, (2011).
5. ESRF Upgrade Programme Phase II (2015 – 2022), «Orange Book», (2014).

РЕНТГЕНОВСКАЯ МИКРОСКОПИЯ В СПЕКТРАЛЬНОМ ДИАПАЗОНЕ «УГЛЕРОДНОГО ОКНА» (ДЛИНА ВОЛНЫ 4.5 - 5 НМ)

И.А. Артюков

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

Спектральная область «углеродного окна», т.е. длины волн максимальной в мягком рентгеновском (МР) диапазоне прозрачности углерода $4,5 \text{ нм} < \lambda < 5 \text{ нм}$ может рассматриваться как расширение области применения МР-микроскопии за пределы «водяного окна». Её особенностями являются:

- ✓ возможность исследовать на просвет существенно более толстые слои органических и других углеродосодержащих материалов, в том числе образцы углеводородного топлива;
- ✓ наличие дифференциального абсорбционного контраста при визуализации различных микроструктур биологических объектов из-за разного химического состава (влияние количества атомов *P*, *S*, *O* и др.);
- ✓ возможность исследования стандартных медицинских гистологических срезов тканей с фиксацией в парафине без дополнительного замораживания и использования вакуумноплотных ячеек;
- ✓ уменьшенная дозовая нагрузка на биоструктуры из-за их относительной прозрачности;
- ✓ сниженные на 1-2 порядка требования к рабочему вакууму, чем в «водяном окне», из-за меньшего поглощения азота воздуха;
- ✓ отсутствие проблем, связанных с органическим загрязнением поверхности зеркал, фильтров и детектора;
- ✓ более широкие угловые и спектральные характеристики многослойных рентгеновских зеркал по сравнению с аналогичной оптикой нормального падения на длинах волн $< 4 \text{ нм}$.

В представленной работе с помощью зеркальной рентгеновской оптики нормального падения на основе *Со/С* многослойных покрытий с периодом около 2.3 нм были получены контрастные изображения различных биологических и других углеродосодержащих объектов толщиной от 10 мкм до 1 мм. Тем самым была продемонстрирована возможность создания и применения эффективной оптики для визуализации органических объектов в «углеродном окне».

1. A. Artyukov, R. M. Feschenko et al., Micron 41, 722 (2010).
2. И. А. Артюков, А. В. Виноградов, Н. Л. Попов, Квантовая электроника 47, 1041 (2017).

ИССЛЕДОВАНИЕ И РЕКОНСТРУКЦИЯ ОРНАМЕНТИРОВАННОЙ ЖЕЛЕЗНОЙ НАКЛАДКИ ИЗ МОСКОВСКОГО КРЕМЛЯ

*А.Ю. Лобода¹, П.В. Гурьева¹, Е.С. Коваленко¹, О.А. Кондратьев¹,
М.М. Мурашев¹, Д.Ю. Бадеев², В.И. Завьялов², К.М. Подурец¹,
Е.Ю. Терещенко¹, Е.Б. Яцишина¹*

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

² *Институт археологии РАН, Москва*

Исследованы два уникальных фрагмента железных пластин с рельефным орнаментом, обнаруженные при археологических раскопках на территории Московского Кремля в 2020 г. Применялись методы рентгеновской и нейтронной томографии, рентгенофлуоресцентного элементного анализа, масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой и металлографии. Определен состав использованных металлов – железная основа декорирована проволокой из сплава золота. Предложена реконструкция, объединяющая два фрагмента в единую накладку с рельефным орнаментом в виде двух драконов. Установлен способ нанесения декора накладки – выпуклое обронное гравирование с таушировкой проволокой. Форма накладки, характер нанесенного изображения драконов и способ изготовления предмета позволяют видеть в нем традицию мелкой пластики дальневосточных мастеров, хорошо знакомых с традиционными для данного региона изображениями драконов. Нельзя исключать и того, что накладка была выполнена золотоордынскими мастерами XIV в., которые подражали изделиям металлопластики чжурчжэней.

Исследование исторического контекста пластин выполнено в рамках НИР Института археологии РАН «Московский Кремль по материалам новейших археологических исследований: культурный слой, архитектурные сооружения, артефакты» (№ НИОКТР 122011100062-2), естественно-научные исследования (методами рентгеновской и нейтронной томографии, масс-спектрометрического и рентгенофлуоресцентного анализов) – в рамках реализации Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». Исследования методом нейтронной томографии выполнены с использованием уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт».

СОВМЕЩЕНИЕ МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ 3D ИЗОБРАЖЕНИЙ

*М. И. Гильманов^{1,2}, Л. Ю. Коляскин^{1,2}, М. В. Чукалина^{1,3}, Е. С. Коваленко⁴,
Д. П. Николаев^{1,3}, В. В. Арлазаров^{1,3}*

¹ ООО «Смарт Энджинс Сервис», Москва

² ИППИ РАН им. А.А. Харкевича, Москва

³ ФИЦ ИУ РАН (ИСА РАН), Москва

⁴ Национальный исследовательский центр «Курчатовский
Институт», Москва

Совмещение 3D изображений, подразумевает приведение трехмерных изображений объекта в общую мировую систему координат. Совмещение изображений полученных с использованием принципиально различных методов регистрации позволяет выполнять комплексный анализ данных, сопоставлять структурные и материальные характеристики, а также строить точные 3D-карты распределения компонентов, что открывает новые возможности в материаловедении, биомедицине и неразрушающем контроле. При этом, совмещение мультимодальных изображений осложняется разными оптическими свойствами материалов для разных диапазонов энергий и разных типов используемого излучения.

Широко распространенным методом преобразования трехмерных изображений к одной системе координат является поиск аффинного преобразования с использованием опорных точек. Несмотря на концептуальную простоту метода, совмещение изображений является многостадийным трудоемким процессом, требующим квалифицированного труда оператора и ручной разметки данных, при этом точность ручного совмещения остается весьма ограниченной. В этих условиях, актуальной является разработка полностью автоматических методов совмещения, позволяющих вывести обработку мультимодальных данных на новый уровень.

В рамках данного доклада рассмотрены вопросы оценки качества совмещения, мультимодальных данных, представлены примеры и проблемы, возникающие при совмещении реальных данных рентгеновской и нейтронной томографии, а также выполнено сравнение существующих автоматических алгоритмов совмещения. Отдельное внимание уделено созданию референсных совмещений с субвоксельной точностью и инструментов для сравнения качества работы автоматических алгоритмов совмещения.

МЕТОДЫ НЕЙТРОННОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОМОГРАФИИ В ИССЛЕДОВАНИИ АРХЕОЛОГИЧЕСКИХ АРТЕФАКТОВ ИЗ НЕКРОПОЛЯ ВОЛНА 1

Б.А. Бакиров^{1,2}

¹ *Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка, Объединенный институт
ядерных исследований*

² *Институт археологии, Российская академия наук*

Некрополь Волна 1 на Таманском полуострове является одним из важнейших памятников греческой колонизации Северного Причерноморья, где обнаружены ценные артефакты из различных металлов. Их исследование имеет большое значение для понимания процессов культурного взаимодействия и технологий обработки металлов в древности. При этом высокая ценность находок требует применения неразрушающих методов, способных раскрывать их структуру и степень сохранности без повреждения.

В работе использованы нейтронная и рентгеновская томография, а также дифракционные методы, что позволило комплексно изучить внутреннее строение и состав археологических предметов. Нейтронная томография продемонстрировала эффективность в выявлении скрытых дефектов, пустот и продуктов коррозии, тогда как рентгеновская томография обеспечила высокое качество визуализации плотных участков металла. Совместное применение этих подходов позволило получить разностороннюю информацию о сохранности и технологических особенностях артефактов.

Сравнительный анализ показал, что методы взаимно дополняют друг друга, открывая новые возможности для реконструкции первоначального облика предметов, понимания древних ремесленных традиций и разработки стратегий консервации. Комплексный подход на стыке археологии и современных физических методов визуализации значительно расширяет наши представления о материальной культуре античного времени и демонстрирует перспективы дальнейших исследований культурного наследия.

Исследование выполнялось при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-18-00196.

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ КОРНЕВЫХ СИСТЕМ РАСТЕНИЙ ПО ДАННЫМ НЕЙТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ

П.П. Кобчикова¹, А.В. Белушкин¹

¹ Объединённый институт ядерных исследований

Изучение архитектуры корневых систем растений важно для понимания их адаптации к условиям среды, однако прямое наблюдение затруднено из-за роста корней в почве. Нейтронная томография даёт возможность визуализировать их структуру без разрушения образца, но такие данные требуют специализированной обработки и количественного анализа.

В работе предпринята попытка построения автоматизированного подхода для анализа корневых систем по нескольким проекциям (~10 изображений с равным угловым шагом). На этапе предобработки применялись нормализация интенсивности и выравнивание фона, что позволило снизить влияние неравномерности нейтронного пучка. Для выделения корней использовались глобальная и адаптивная бинаризация, а также фильтры, чувствительные к тонким нитевидным структурам, с последующей морфологической очисткой. Для контроля качества сохранялись промежуточные изображения (нормализованное, карта линейных структур, бинарная маска, скелет).

Из сегментированных данных извлекались базовые скелетные характеристики (длина, число компонент, средняя длина ветвей, плотность, фрактальная размерность и другие). Эти признаки агрегировались по углам, что позволило получать устойчивые интегральные характеристики растений. Для сравнения использовались статистические методы, эффект размера (Cohen's d) и перекрёстная проверка (leave-one-angle-out), показавшие различия между двумя образцами.

Однако отмечено, что даже отдельные срезы одного растения могут существенно различаться из-за вариаций проекций. Это указывает на необходимость увеличения числа сканов или применения методов машинного обучения на больших наборах данных. Перспективным направлением является формирование размеченного датасета (например, полуавтоматически в ImageJ) и обучение нейросетевых моделей. Такие модели могут как автоматически сегментировать корневую систему (например, архитектуры типа U-Net), так и классифицировать изображения или извлекать структурные характеристики (ResNet и др.). Это позволит существенно ускорить анализ по сравнению с ручной обработкой и повысить воспроизводимость результатов.

Секция

Поверхность, интерфейсы, тонкие пленки

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХ-МНОГОПЕРИОДНЫХ GaAs/AlGaAs СВЕРХРЕШЕТОК

А. Д. Буравлев¹⁻⁴

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

² СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург

³ ИАП РАН, Санкт-Петербург

⁴ ООО «НК-Метка», Санкт-Петербург

Полупроводниковые сверхрешётки (СР) играют важную роль в современной нанoeлектронике и фотонике благодаря возможности создания различных оптоэлектронных устройств. Экспериментальные исследования и изготовление СР стали возможны в последние десятилетия благодаря значительному прогрессу в ростовых технологиях, в частности в молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ). Благодаря этому в последнее время были реализованы сверхмногопериодные (СМП) структуры СР с числом слоёв от нескольких сотен до тысяч. Однако, несмотря на технологический прогресс, создание структур СМП-СР с явно заданными характеристиками по-прежнему представляет собой нетривиальную задачу. Чтобы уменьшить рассеяние носителей на гетерограницах, образцы с сотнями и тысячами слоев следует выращивать с атомарной точностью толщин, субатомным уровнем среднеквадратичной шероховатости и диффузности интерфейсов и точностью состава, составляющей доли процента. В этой связи особую значимость приобретают экспериментальные методы, которые могут быть использованы для характеристики подобных многопериодных структур, с толщинами превышающими несколько микрон.

При выполнении работы методом МПЭ было синтезировано несколько серий образцов GaAs/Al_xGa_{1-x}As СР, отличающихся как толщинами квантовых ям и барьеров, различным составом алюминия, и уровнями их легирования. Количество периодов СР варьировалось в диапазоне от 100 до 500. Синтезированные СМП СР структуры имели в среднем толщину несколько микрон. Степень легирования n-типа по толщине СР для разных образцов была примерно одинаковой как для барьеров, так и для квантовых ям и варьировалась в диапазоне от 10¹⁵ до 10¹⁷ см⁻³.

Представленный доклад будет посвящен описанию результатов комплексного изучения синтезированных СМП СР структур различными методами, в том числе, на источниках синхротронного излучения.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР: ФИЗИКА И ХИМИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖСЛОЕВЫХ ОБЛАСТЕЙ

Е.О. Филатова

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Основной тенденцией современного развития высоких технологий является переход к нанометровому масштабу синтезируемых структур и слоев. Развитие нанотехнологий требует развития новых адекватных методов изучения и диагностики химического состава и атомного строения таких материалов, и особенно многослойных наносистем, в которых возрастает роль межфазовых границ. Уменьшение топологических размеров многослойных структур ведет к существенному увеличению роли процессов, происходящих на межфазовой границе, в частности, интердиффузии и химической реакции, приводящих, как правило, к формированию тонких интерслоев. Образовавшиеся промежуточные слои, в том числе поляризационные, могут существенно влиять на основные характеристики приборов (например, эффективную работу выхода), на разрешение и пиковый коэффициент отражения многослойных рентгеновских и нейтронных зеркал.

Будут кратко рассмотрены физические принципы, обуславливающие возможность проведения в многослойных структурах фазового химического анализа с высоким разрешением по глубине; перераспределение кислорода на межфазовой границе металл/диэлектрик/металл и его влияние на электрические характеристики систем, а также формирование межфазовых областей в многослойных рентгеновских зеркалах, подходы к управлению их протяженностью и структурой (нитридизация, введение барьерных слоев, отжиг) и поиск оптимальных структур. Работа частично выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-72-20125-П.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АДсорБИРОВАННОГО СЛОЯ КИСЛОРОДА НА НАНОПЛЕНКЕ ИТТЕРБИЯ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА NEXAFS

М.В. Кузьмин¹, С.В. Сорокина¹, В.Е. Ремеле¹, Р.Г. Чумаков²

¹ *Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе*

² *Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

В настоящее время значительный интерес вызывают нанoadсорбенты, на основе которых можно создавать нанопленочные структуры с уникальными параметрами [1]. В недавних исследованиях [2] было показано, что электронные, термические и иные свойства нанопленок иттербия могут быть модифицированы, например, в этих пленках может происходить валентный переход $\text{Yb}^{2+} \rightarrow \text{Yb}^{3+}$, при адсорбции на их поверхности молекул кислорода. Однако, физико-химические свойства поверхностного слоя адсорбированных частиц в данной системе оставались практически неизученными.

В настоящей работе с помощью спектроскопии NEXAFS (околопороговая тонкая структура рентгеновских спектров поглощения) была исследована адсорбционная конфигурация и электронное состояние молекулярного кислорода на нанопленке иттербия толщиной ~ 6 nm, выращенной *in situ* на подложке Si(111)(7×7). Показано, что образование связей O–Yb внутри нанопленки не происходит, т.е. адсорбция имеет недиссоциативный характер. Адсорбированные молекулы находятся на поверхности в виде однозарядных ионов O_2^- . Определена длина связей O–O в них (1.33 Å). С помощью анализа угловых зависимостей спектров NEXAFS обнаружен рентгеновский дихроизм молекул O_2 на поверхности иттербия. Он обусловлен ориентацией внутримолекулярных σ^* орбиталей преимущественно по нормали к поверхности нанoadсорбента.

1. T. A. Saleh, Surface science of adsorbents and nanoadsorbents. In: Interface Science and Technology, Elsevier, Academic Press (London), 34 (2022) 324 p.
2. М. В. Кузьмин, М. А. Митцев и др., ФТТ 66 (5), 775 (2024).

РЕНТГЕНОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ С УЧЕТОМ РАССЕЯНИЯ И ДИФРАКЦИИ В СКОЛЬЗЯЩЕЙ ГЕОМЕТРИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ТВЕРДЫХ И ЖИДКИХ СЛОИСТЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*В.Е. Асадчиков¹, Б.С. Роцин¹, Ю.О. Волков¹, А.М. Тихонов^{1, 2},
А.Д. Нуждин¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН

Проведен анализ оборудования и экспериментальных работ на современных синхротронных источниках [1, 2]. Рассматриваются теоретические подходы, разработанные авторами, и соответствующие экспериментальные данные, полученные при исследовании твердых подложек из различных материалов для широкого класса применений. Представлены результаты, полученные авторами и их сравнение с данными атомно-силовой микроскопии и оптических измерений [3, 4]. Рассмотрены решения обратной задачи рентгеновской рефлектометрии при исследовании нанесенных на такие подложки однослойных и многослойных покрытий [4, 5]. Эти результаты сопоставлены с данными просвечивающей электронной микроскопии [6, 7]. Полученный опыт был использован при исследовании поверхности жидких фаз и нанесенных на них органических плёнок [8–10]. В случае [9] результаты сопоставлялись с данными молекулярно-динамических расчётов и показано их хорошее соответствие. Большая часть этих исследований проведена с использованием современных синхротронных экспериментальных станций.

Проведение рентгеновских экспериментов было осуществлено в рамках соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии (с Минобрнаукой) № 075-15-2025-458 и госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

1. <https://www.esrf.fr/UsersAndScience/Experiments/CBS/ID10>
2. <https://www.esrf.fr/UsersAndScience/Experiments/StructMaterials/ID31>
3. М. Л. Занавескин, И. С. Занавескина, и др., Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 3 (2006).
4. И. В. Кожевников, А. С. Воронов, и др., Кристаллография. 51, 6 (2006).
5. В. Е. Асадчиков, И. В. Кожевников, и др., Мир измерений. 7 (2012).
6. R. Tholapi, I. A. Karateev, et al., Journal of Applied Physics. 121. (2017).
7. В. Е. Асадчиков, Ю. О. Волков, и др., Кристаллография. 64, 5 (2019).
8. В. Е. Асадчиков, Ю. О. Волков, и др., Кристаллография. 68, 1 (2023).
9. Yu. A. Ermakov, V. E. Asadchikov, et al., Langmuir. 35 (2019).
10. А. М. Тихонов, Ю. О. Волков, и др. ЖЭТФ. 168, 2 (2025).

МАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ БЛИЗОСТИ В СВЕРХРЕШЕТКАХ Fe/GdH_x

Е.А. Кравцов², И.А. Лихачёв¹, И.А. Субботин¹, Э.М. Пашаев¹, Д.И. Девятериков², М.А. Макарова², Ю.А. Саламатов²,

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

² *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

Система Fe/Gd является одной из хорошо исследованных сверхрешеток типа редкоземельный металл/переходный металл. Известно, что в отличие от ферромагнитных 3d-металлов, редкоземельные металлы легко поглощают водород из окружающей атмосферы даже при малых давлениях водорода, и можно ожидать, что при помещении сверхрешеток в атмосферу водорода при малых давлениях, водород будет концентрироваться в слоях редкоземельных металлов. Варьируя давление водорода и температуру, можно контролируемым образом изменять концентрацию водорода в слоях редкоземельных металлов, изменяя их структурные, магнитные и электронные свойства.

Мы представляем результаты комплементарных нейтронографических, рентгеновских и магнитометрических исследований покрытых каталитическим слоем Ni сверхрешеток Fe/Gd с толщинами слоев Gd от 7 до 40 нм, гидрированных при давлении водорода 730 Торр и при температуре 100 °С. Было установлено, что водород проникает в данные образцы на всю глубину и концентрируется в слоях Gd, образуя гидриды GdH₂ и GdH₃. В слоях, содержащих гадолиний, водород концентрируется главным образом в центре слоев, в то время как вблизи интерфейсов его концентрация значительно меньше. В отличие от объемных гидридов, которые являются немагнитными при температурах выше 20 К, в сверхрешетках Fe/GdH_x гидриды гадолиния являются магнитными при температурах вплоть до комнатной. Под действием магнитного поля формируется неоднородное распределение магнитных моментов в слоях гидридов, магнитные моменты в центре слоев ориентируются в направлении магнитного поля, а на интерфейсах – против магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 24-12-20024.

ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЁНОК СЛОЖНЫХ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ОКСИДОВ

Э.М. Пашаев¹, А.Л. Васильев¹, А.П. Носов², И.А. Субботин¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

² *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН*

Тонкопленочные наноразмерные гетероструктуры широко востребованы в современных перспективных системах микро- и наноэлектроники благодаря вариативности их структурных и функциональных свойств, зачастую, отличающихся от структуры и свойств объемных материалов. Формирование таких пленок на гетерогенных подложках может приводить к сложным структурным преобразованиям. Структурная диагностика сформированных систем является одним из определяющих этапов технологий микроэлектроники.

Работа посвящена установлению структурных особенностей в тонких пленках сложных железосодержащих оксидов: гематит ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$), ортоферрит иттрия (YFO), феррит-гранаты ($\text{BiY}_2\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, BYIG), сформированных на гетерогенных подложках Al_2O_3 методом магнетронного распыления, выявлению механизма сложного фазообразования, происходящего при формировании планарных систем, в том числе, при изменении толщин наноразмерных плёнок, разработке структурной модели для описания их магнитных и магнитооптических свойств.

Исследуемые в работе структуры обладают уникальными магнитными, магнитооптическими и мультиферроидными свойствами, зависящими, в том числе, от толщины и ориентационных соотношений системы плёнка-подложка, благодаря чему они активно используются в устройствах спинтроники.

В работе приводятся результаты структурных исследований различными методами рентгеновской и электронно-микроскопической диагностики с привлечением в ряде случаев при их совместном анализе результатов магнитных измерений.

Обнаружено изменение микроструктуры наноразмерных плёнок YFO с изменением их толщины. В самых тонких пленках происходит формирование нескольких фаз: o-YFeO₃, h-YFeO₃, Y₃Fe₅O₁₂ и оксидов железа. В пленках толщиной более 10 нм оставались только o-YFeO₃ и гранаты. Было показано, что гранаты Y₃Fe₅O₁₂ образуются при отжиге после напыления. Впервые показано, что изменение магнитооптических свойств плёнок BYIG вызвано сегрегацией висмута к подложке и формированием оксидов железа на поверхности. Установлена двухступенчатая релаксация пленок гематита, определяющая их магнитные и магнитооптические свойства.

ИССЛЕДОВАНИЯ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ 2D МАГНИТНЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

В.Д. Жакетов^{1,2,3}

¹ Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный

³ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва

Низкоразмерные магнитные и сверхпроводящие гетероструктуры, ввиду наличия большого количества интересных явлений, в настоящее время активно изучаются. Одним из эффективных методов изучения магнетизма является рефлектометрия поляризованных нейтронов, позволяющая получать изотопные и магнитные глубинные профили с нанометровым разрешением. Низкотемпературные исследования эффектов близости в сверхпроводяще-ферромагнитных системах [1] и редкоземельных пленках с нетривиальным магнитным упорядочением [2] проводились с использованием рефлектометра РЕМУР реактора ИБР-2 (г. Дубна).

В настоящее время активно изучаются эффекты близости на границе раздела двух сред. Особый интерес представляют слоистые низкоразмерные структуры со сверхпроводящими (S) и ферромагнитными (F) свойствами, в которых реализуется взаимодействие двух антагонистических параметров порядка. Перспективными системами для изучения эффектов близости являются S/F-гетероструктуры из ниобия и редкоземельных (RE) металлов [3]. В качестве примера для слоистой гетероструктуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Nb}(40 \text{ нм})/[\text{Dy}(6 \text{ нм})/\text{Ho}(6 \text{ нм})]_{34}/\text{Nb}(10 \text{ нм})$ было обнаружено, что при температуре ниже сверхпроводящего перехода на магнитное состояние гелимагнетика влияет сверхпроводимость, а именно веерное магнитное упорядочение перестраивается в гелимагнитное упорядочение [4].

Описанные периодические слоистые системы являются искусственными слоистыми кристаллами. При отражении нейтронов от периодической слоистой структуры наблюдаются пики Брэгга. Слоистые искусственные квазикристаллы также представляют особый интерес. Возможно создание искусственных слоистых систем с квазикристаллическостью в направлении, перпендикулярном плоскости структуры. Рассматривается возможность создания слоистых квазикристаллов из чередующихся сверхпроводящих и ферромагнитных слоев. Эти модельные системы просты в изготовлении и исследовании, но позволят изучать нетривиальные явления, такие как фрактальная сверхпроводимость и дальний магнитный порядок в квазипериодической системе, а также их сосуществование. Особый интерес представляет создание структур Фибоначчи с использованием магнитов со спиральным магнитным порядком.

1. Yu.V. Nikitenko et al. // Physics of Particles and Nuclei, v. 53, No. 6, pp. 1089-1125 (2022).
2. D.I. Devyaterikov et al. // Journal of Surface Investigation, v. 16, № 5, pp. 839-842 (2022).
3. Khaydukov Yu.N. et al. // Phys. Rev. B, vol. 99, pp. 140503(R) (2019).
4. Zhaketov V.D. et al. // Physics of the Solid State, Vol. 65, No. 7 (2023).

Секция

Современные задачи экологии, структурной химии,
радиохимии

ОТ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ К ПРИРОДНЫМ ОБЪЕКТАМ: СИНХРОТРОННЫЕ МЕТОДЫ КАК ИНСТРУМЕНТ ИЗУЧЕНИЯ ФОРМ И МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ

А.Ю. Романчук, Т.В. Плахова, А.С. Кузенкова, И.Э. Власова, С.Н. Калмыков

МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет

Изучение форм нахождения и физико-химических форм радионуклидов является ключом к пониманию закономерностей их миграции в окружающей среде. Для решения этой задачи необходимо сочетать исследования в строго контролируемых лабораторных условиях на модельных системах с изучением реальных природных образцов. Такой комплексный подход позволяет выявить фундаментальные механизмы взаимодействия радионуклидов с минеральными и органическими компонентами среды, а также проверить их применимость к реальным экологическим ситуациям.

На кафедре радиохимии МГУ активно реализуется данный подход. Особая роль в этих исследованиях принадлежит синхротронным методам, которые позволяют получать информацию о химическом состоянии радионуклидов даже при их крайне низких концентрациях. В докладе будут представлены результаты последних лет, включающие идентификацию актинид-содержащих фаз, потенциально формирующихся в условиях окружающей среды, а также исследования сорбционных процессов, определяющих задержку радионуклидов в природных барьерах. Отдельное внимание будет уделено результатам применения синхротронных методов для анализа реальных образцов, загрязнённых радионуклидами, что позволяет напрямую сопоставлять модельные представления с природными системами.

1. T. V. Plakhova, M. A. Vyshegorodtseva, I. F. Seregina, R. D. Svetogorov, A. L. Trigub, D. A. Kozlov, A. V. Egorov, M. D. Shaulskaya, D. M. Tsymbarenko, A. Y. Romanchuk, V. K. Ivanov, S. N. Kalmykov, *Chemosphere* 368, 143664 (2024).
2. A. S. Kuzenkova, T. V. Plakhova, R. D. Svetogorov, E. S. Kulikova, A. L. Trigub, V. O. Yapaskurt, A. V. Egorov, A. S. Toropov, A. A. Averin, M. D. Shaulskaya, D. M. Tsymbarenko, A. Y. Romanchuk, S. N. Kalmykov, *Environ. Sci.: Nano* **11**, 4381-4390 (2024).
3. T. B. Egorova, A. Y. Romanchuk, A. V. Egorov, et al., *Environ. Sci.: Processes Impacts* 27, 1003–1012 (2025).
4. P. I. Skryleva, A. V. Rzhavskaia, Y. G. Izosimova, et al., *Chemosphere* 374, 144196 (2025).
5. A. Y. Romanchuk, A. L. Trigub, S. N. Kalmykov, *J. Contam. Hydrol.* 266, 104400 (2024).
6. A. S. Kuzenkova, T. V. Plakhova, I. M. Nevolin, E. S. Kulikova, A. L. Trigub, V. O. Yapaskurt, M. D. Shaulskaya, D. M. Tsymbarenko, A. Y. Romanchuk, S. N. Kalmykov, *Inorg. Chem.* 62, 21025-21035 (2023).

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ТРУДНО КРИСТАЛЛИЗУЮЩИХСЯ ВЕЩЕСТВ С ПОМОЩЬЮ КОРОТКОИМПУЛЬСНОГО КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Г.В. Фетисов

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва

Наиболее точный и широко применяемый в химии метод определения атомно-молекулярного строения вещества – рентгеноструктурный анализ (РСА) по данным дифрактометрии монокристалла на монохроматическом излучении – часто оказывается неприменим из-за трудности выращивания кристаллов размерами $\sim 30 - 300$ мкм, которые используются в традиционном РСА. В таких случаях, при наличии монокристаллов микронного или даже субмикронного размера, для РСА можно использовать метод поточной последовательной рентгеновской кристаллографии (SXC), разработанный в последние два десятилетия [1] для реализации на излучении рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL). В этом методе набор дифракционных данных для РСА получается от потока микрокристаллов, пропускаемых через пучок импульсного яркого когерентного излучения XFEL [1-2], а задача определения структуры решается подобно РСА методом вращения кристалла, хорошо разработанному для монокристалльных автоматических лабораторных дифрактометров с двумерным детектором [1-2]. К настоящему времени опубликовано достаточно много примеров РСА методом SXC (см. [1] 6.12). Однако чрезвычайная ограниченность доступа к работе на мега-установках коллективного пользования типа XFEL препятствует использованию данного метода для оперативного контроля продуктов химического синтеза. Здесь рассматриваются: (1) альтернативные компактные и менее дорогие источники короткоимпульсных РЛ с характеристиками подобными излучению XFEL, такие как лазерно-плазменные и лазерно-электронные генераторы РЛ, созданные благодаря доступности оптических лазеров высокой мощности; (2) практика применения этих источников для РСА методом SXC.

1. Ищенко А.А., Фетисов Г.В., Асеев С.А. *Методы детектирования ультрабыстрой динамики вещества*. М: ФИЗМАТЛИТ, 2022 — с 284–389
2. Фетисов Г.В. *УФН*, **190**(1) 2–36 (2020)

Постерные доклады

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАЦИИ НАНОЧАСТИЦ SiO_2 В ПРИСУТСТВИИ ЧЕРВЕОБРАЗНЫХ МИЦЕЛЛ ДИМЕРНОГО ПАВ (C18-4-C18) МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

М.М. Авдеев^{1,2}, А.В. Шуленина^{1,3}, Г.С. Петерс^{3,1},
Е.П. Харитонова¹, В.С. Молчанов¹, О.Е. Филиппова¹

¹ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва

² Объединённый институт ядерных исследований, Дубна

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Сетки червеобразных мицелл в растворах поверхностно-активных веществ (ПАВ) интересны возможностью контроля вязкоупругих свойств в пределе нескольких порядков посредством внешнего воздействия (температура, pH, др.). Подобное свойство широко применяется как в коммерческих продуктах (краски, моющие средства), так и в индустриальной сфере, например, в методах струйной печати и в нефтедобыче. Более эффективное формирование подобных сеток без добавок возможно в случае димерных (гемини) ПАВ, которые обладают крайне высокой поверхностной активностью и способны образовывать различные по форме агрегаты благодаря собственной химической структуре. На данный момент актуальным является поиск путей улучшения и расширения свойств растворов червеобразных мицелл путём включения добавок (наночастиц и др.). Наночастицы в растворах червеобразных мицелл ПАВ могут выступать в роли сшивок и таким образом влиять на самоорганизацию, усиливая вязкоупругие свойства системы. В частности, это позволяет уменьшить количество используемого ПАВ и улучшить температурную стабильность свойств системы.

В данной работе методом малоуглового рентгеновского рассеяния исследована структура водных растворов наночастиц SiO_2 в присутствии димерного ПАВ (C18-4-C18). Определено, что червеобразные агрегаты ($L > 1$ мкм, $d \sim 6$ нм) формируются при любых концентрациях ПАВ и соли. Добавление наночастиц в систему червеобразных мицелл увеличивает упругость растворов и их стабильность. Обнаружено, что наночастицы в присутствии ПАВ частично агрегируют в анизотропные структуры, что может быть связано с олигомерной природой димерного ПАВ. Полученные результаты вносят ясность в макроскопическое поведение растворов наночастиц и ПАВ различных концентраций в присутствии либо отсутствии солей с микроскопической точки зрения, включая реологические свойства и температурную стабильность структуры растворов, а также доказывают возможность потенциального применения в нефтедобывающей отрасли наравне с классическими системами мономерных ПАВ.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова. Исследования выполнены на станции БиоМУР с использованием уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» НИЦ «Курчатовский институт».

ЭПИТАКСИАЛЬНАЯ ИНТЕГРАЦИЯ EuO С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ ПЛАТФОРМАМИ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ СПИНТРОНИКИ

*Д.В. Аверьянов¹, И.С. Соколов¹, А.Н. Талденков¹, О.А. Кондратьев¹,
И.А. Каратеев¹, А.Н. Виниченко², И.С. Васильевский², Е.Н. Абрамова³,
А.А. Трофимов³, О.Е. Парфёнов¹, А.М. Токмачёв¹, В.Г. Сторчак¹*

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

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

³ *МИРЭА — Российский технологический университет, Москва*

Оксидные материалы и формируемые на их основе гетероструктуры проявляют комплекс уникальных свойств, открывающих перспективы разработки электронных компонентов нового поколения с расширенной функциональностью. Ключевым подходом, способным ускорить внедрение этих систем за счет минимально возможного изменения производственных процессов, является их интеграция с существующими полупроводниковыми платформами.

Данная работа посвящена интеграции ферромагнитного полупроводника EuO с ключевыми материалами электронной и оптоэлектронной промышленности: Si [1, 2], Ge [2], GaAs [3] и InSb. За счет спинового расщепления зоны проводимости EuO демонстрирует практически 100 % спиновую поляризацию носителей, определяя высокий потенциал его применения в устройствах спинтроники.

Синтез образцов производился методом молекулярно-лучевой эпитаксии путем осаждения атомов Eu в потоке кислорода. В рамках работы исследована применимость основных режимов формирования пленок EuO (режим сильной дистилляции, режим слабой дистилляции и режим компенсации потоков) на каждой из полупроводниковых подложек в контексте их влияния на структурные, магнитные и транспортные свойства пленок, а также качество границы раздела. Изучена роль поверхностных фаз Eu в стабилизации эпитаксиального роста. Рассмотрены подходы, позволяющие преодолеть основные проблемы – синтез нестехиометрических пленок, образование побочных фаз на границе раздела. В совокупности результаты исследований указывают на перспективность разработанных методик синтеза с учетом ограничений, накладываемых физико-химическими свойствами каждого из полупроводниковых материалов.

Работа выполнена при поддержке НИЦ «Курчатовский институт» и РНФ (25-79-10047, 24-19-00038).

1. D. V. Averyanov, I. S. Sokolov, et al., Adv. Funct. Mater. 2104925 (2021).
2. D. V. Averyanov, I. S. Sokolov, et al., J. Mater. Chem. C 11, 5481 (2023)
3. D. V. Averyanov, I. S. Sokolov, et al., J. Alloys Compd. 1009, 176961 (2024).

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ В СПЕКТРАХ ЗАПРЕЩЕННЫХ ОТРАЖЕНИЙ В ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ

К.А. Акимова¹, Е.Н. Овчинникова¹, А.П. Орешко¹, В.Е. Дмитриенко²

1 МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

2 Отделение «Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва

AkimovaKA@my.msu.ru

В работах [1,2] была продемонстрирована нетривиальная температурная и азимутальная зависимость интенсивности и спектральной формы запрещенных отражений типа $h00$ ($h=4n+2$) в кристаллах семейства MH_2PO_4 ($M=K, Rb$), которая обусловлена изменением резонансной части $E1E1$ атомного фактора вследствие тепловых колебаний, а также вследствие изменения симметрии мгновенных конфигураций, образованных атомами водорода вокруг атомов металла в параэлектрической фазе. Численное моделирование таких эффектов в сопоставлении с экспериментальными данными, измеренными на синхротронах третьего поколения, позволило получить значения некоторых физических параметров, таких как частота низколежащей моды оптических колебаний и энергия активации отдельных конфигураций водорода. В настоящей работе обсуждается вопрос о том, насколько чувствительны такие запрещенные отражения к температуре, если измерения проводить при энергии падающего излучения вблизи К-края поглощения фосфора. С помощью программы FDMNES [3] были рассчитаны диполь-квадрупольный ($E1E2$) вклад в тензорный атомный фактор фосфора, а также производные диполь-дипольного ($E1E1$) вклада, отвечающие за термоиндуцированный (ТМИ) эффект и влияние мгновенных конфигураций атомов (МКА) водорода. Сравнение величин этих вкладов для К-краев поглощения калия и фосфора показало, что во втором случае отношение коэффициентов, описывающих ТМИ и МКА эффекты, к величине $E1E2$, значительно меньше для фосфора, чем для калия. Таким образом, температурная зависимость интенсивности запрещенных отражений должна быть значительно более ярко выражена при измерении на К-крае поглощения калия, чем на крае поглощения фосфора. Это может быть связано с тем, что атомы фосфора находятся в окружении тетраэдров, образованных атомами кислорода, и в низколежащих оптических модах колебаний изменения локальной симметрии положений фосфора незначительны. Кроме того, атомы кислорода в первой координационной сфере ослабляют влияние положений атомов водорода, на атомный рассеивающий фактор фосфора.

1. C. Richter, D.V. Novikov, E.Kh. Mukhamedzhanov, et al.// Phys. Rev. 2014. B92. 214116.
2. G. Beutier, S.P. Collins, G. Nisbet, et al. // Phys. Rev. 2015. V. B89, 094110.
3. <https://www.neel.cnrs.fr>

КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ

*О.В. Акимова¹, Р.Д. Светогоров², Е.С. Куликова², А.В. Овчаров²,
Т.П. Каминская¹, В.В. Попов¹*

¹*Физический факультет Московского государственного университета имени М.В.
Ломоносова, Москва*

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

Актуальность работы обусловлена аспектом потребностей технологических новаций в новых функциональных материалах с особыми свойствами. Исследованные сплавы и модификация их физических свойств важны для широкого спектра наукоемких технологий и являются особо важными для водородной энергетики.

Проведены комплексные исследования структурных особенностей металлических систем, формируемых в результате легирования палладия иттрием, кобальтом, свинцом и рутением. Рассмотрена эволюция структуры указанных металлических систем при легировании водородом.

Исследования проводились на станции Белок/РСА Курчатовского источника синхротронного излучения методом рентгеновской дифракции при снятии дифракционных картин на просвет образцов; методом энергодисперсионного рентгеноспектрального анализа (EDXA) с использованием сканирующего электронно-ионного микроскопа Helios_Nanolab 600; методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и магнитно-силовой микроскопии (МСМ). Микроструктура поверхности образцов также охарактеризована на модернизированном оптическом микроскопе МКД-Р фирмы ЛОМО с видеокамерой, соединенной с компьютером.

Наиболее значимые результаты:

- (а) – установлены особенности морфологии формируемой поверхности сплавов в зависимости от элемента легирования палладия.
- (б) – определены столбчатое строение и элементный состав пластин декогезии сплава палладий-иттрий при содержании последнего в количестве 7 масс. %. Указанная концентрация иттрия отвечает сочетанию высоких показателей водородопроницаемости сплавов палладий-иттрий и прочностных характеристик.
- (в) – определена наиболее приемлемая концентрация легирующего палладий элемента-свинца с целью достижения высокой водородопроницаемости и устойчивого удержания водорода в структуре. Из результатов рентгеновской дифракции для этой концентрации легирующего элемента установлена температура Дебая.

(г) – впервые на основании экспериментальных результатов прецизионной рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения проведена оценка вероятности формирования дефектов упаковки и выполнен учет их влияния на размер блоков поликристаллической мозаики сплавов $\text{Pd}_{93.5}\text{In}_{6.0}\text{Ru}_{0.5}$ и $\text{Pd}_{100-x}\text{Pb}_x$ ($x=5, 8, 12, 16, 20$ масс.%), модернизация свойств которых востребована для технологических процессов сепарации водорода высокой степени чистоты.

Научная новизна результатов состоит в исследовании ряда новых эффектов на наноуровне, как пример-процессы самоупорядочивания атомов металлических систем, что стало возможным благодаря применению в методе рентгеновской дифракции синхротронного излучения.

Обозначенные выше исследования выполнены на образцах, изготовленных в Институте металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук (ИМЕТ РАН) и любезно предоставленных для исследований.

Исследование проводилось в рамках государственного задания Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Электронно-микроскопические исследования проводились на оборудовании Ресурсного центра зондовой и электронной микроскопии (Курчатовский комплекс NBICS-технологий) НИЦ «Курчатовский институт».

Рентгеновские дифракционные исследования проводились с использованием уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

ДИАГНОСТИКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОТКЛОНЕНИЙ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРЕМНИЕВЫХ ПЛАНАРНЫХ СОСТАВНЫХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ НА «КИСИ-КУРЧАТОВ»

*А.В. Александров¹, М.С. Фоломешкин¹, Ю.А. Волковский¹, А.Ю. Серёгин¹,
В.Г. Кон¹, П.А. Просеков¹, А.В. Мянских¹, К.В. Руденко¹, В.А. Юнкин²,
А.А. Снигирёв³, Ю.В. Писаревский¹, А.Е. Благов¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН

³ Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Фокусировка пучков синхротронного излучения (СИ) до нанометровых размеров открывает широкие возможности для исследования микро- и нанообъектов благодаря высокой локальности и интенсивности излучения. В связи со строительством в России источников СИ нового поколения развитие технологий нанофокусировки является актуальной задачей [1].

Одним из перспективных подходов является применение планарных составных преломляющих линз (СПЛ) [2], изготавливаемых из монокристаллического кремния. Технологии микроструктурирования позволяют создавать линзы с апертурой 50 мкм, способные фокусировать пучок до размеров порядка 25 нм [3]. При травлении кремния критически важна точность формирования профиля: наклон боковых стенок, возникающий вследствие особенностей анизотропного травления [4], приводит к искажению параболической формы и возникновению aberrаций.

В работе представлен метод диагностики таких отклонений при криогенном травлении. Численные расчёты в рамках волновой оптики [5], сопоставленные с экспериментальными данными, показали, что модель с линейным изменением наклона по глубине адекватно описывает наблюдаемые искажения. Эксперимент проведён на станции РКФМ Курчатовского источника СИ с использованием СПЛ с апертурой 50 мкм. Первоначальные результаты выявили aberrации и смещение фокуса, вызванные наклоном боковых стенок. После проведения диагностики удалось скорректировать процесс изготовления, что позволило существенно снизить уровень aberrаций. Предложенная методика обеспечивает возможность диагностики для устранения отклонений формы СПЛ, повышая эффективность фокусировки и способствуя усовершенствованию технологии изготовления СПЛ.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части моделирования и в рамках НИОКР «СИЛА» в части проведения экспериментов.

1. М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. // Кристаллография. 67, 5 (2022).
2. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al. // Phys. Rev. Lett. 103 (2009).
3. V.G. Kohn, M.S. Folomeshkin // J. Synchrotron Radiat. 28 (2021).
4. V. Yunkin, M. Grigoriev, S. Kuznetsov et al. // Proc. SPIE. 5539, 226 (2004).
5. V.G. Kohn // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. 76, 600 (2002).

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СТРУКТУРЫ ЯДРО/ОБОЛОЧКА СОСТАВА AgInS/ZnS

С.В. Амарантов

НИЦ «Курчатовский институт»

Структурно-люминесцентные квантовые точки (КТ) I-III-VI (I = Cu, Ag; III = In, Al, Ga; VI = S, Te, Se) [1] обладают возможностями тонкой настройки спектрального диапазона путем изменения размера и состава. Это делает возможным спроектировать КТ испускающие свет в видимом и ближнем инфракрасном (ИК) диапазонах. Благодаря низкой токсичности и люминесцентной и коллоидной стабильности, КТ состава I-III-VI возможно использовать в качестве многофункциональных люминесцентных меток в живых организмах. Наличие трех и более элементов в составе позволяют изменять и улучшать оптические и электронные свойства КТ, открывая новые возможности для получения и применения люминесцентных наночастиц. Разделения по размеру КТ AIS/ZnS концентрировали и фракционировали методом многократного переосаждения и центрифугирования [2] Таким методом было получено восемь фракций КТ с диаметром D_{\max} КТ от 4,0 нм до 12,0 нм.

Были получены спектры поглощения, люминесценции, кинетики затухания люминесценции, был проведен элементный анализ, определены размеры частиц методом лазерного динамического светорассеяния и рентгеновским малоугловым рассеянием. Исследование внутренней структуры КТ проводилось методом малоуглового рентгеновского рассеяния SAXS. Используя модель сферически симметричного приближения, из кривой малоуглового рентгеновского рассеяния, было получено распределение радиальной плотности внутри частицы $\rho(r)$. С ростом номера образца, который пропорционален времени седиментации, размер КТ постепенно уменьшался. В работе предложена методика для описания профиля радиального распределения по радиусам. В результате получено, что растворы КТ N1-N4 описываются тремя радиусами, для растворов N5-N8 характерно понижение количества параметров модели радиального распределения плотности $\rho(r)$ до двух радиусов. Таким образом, с уменьшением размера происходят структурные изменения от трех оболочечной до двух оболочечной, что находится в зависимости от аналогичного распределения компонентов в спектрах люминесценции.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Johnson C. M., Pate K. M., Shen Y., et al. // J. Colloid Interface Sci. 2015. Vol. 458. P. 310–314.
2. Raevskaya A.E., Lesnyak V., Haubold D., et al. // Phys. Chem. 2017. Vol. 121. P. 9032–9042

РОСТ И РЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ДОПИРОВАННЫХ ИОНАМИ Co^{2+} И Y^{3+} КРИСТАЛЛОВ $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Л.А. Арбанас^{1,2}, А.А. Калоян³, Д.С. Горбунов³, А.А. Гогин³, И.А. Каурова²,
В.Л. Маноменова⁴, Г.М. Кузьмичёва²

¹ Российский Университет Дружбы Народов имени Патриса Лумумбы

² МИРЭА-Российский технологический университет

³ Курчатовский комплекс синхротронно-нейтронных исследований, НИЦ «Курчатовский институт»

⁴ Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт»

Допирование кристаллов для придания новых или улучшения имеющихся свойств, в конечном счете определяющихся дефектами роста или кристаллической структуры, приводит к разным результатам в зависимости от концентрации ионов активаторов, причем малые или сверхмалые концентрации примесей в литературе практически не рассматриваются.

Цель работы - установление дефектов в монокристаллах $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, допированных изовалентными (Co^{2+}) и гетеровалентными (Y^{3+}) примесями. Выбор $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\alpha\text{-NSH}$) в качестве матрицы обусловлен перспективами его применения в УФ-фильтрах солнечно-слепого диапазона (200-300 нм).

Ограниченные монокристаллы $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}^{2+}$ и $\alpha\text{-NSH}:\text{Y}^{3+}$ (размер $\sim 80 \times 80 \times 50$ мм³) выращены из водных растворов с малыми концентрациями ионов-допантов 1.0 вес.% и 0.42 вес.%, вводимых в составе $\text{Co}^{2+}\text{SO}_4 \cdot (6+7)\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Y}^{3+}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ соответственно. Изучение пластин $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}$ и $\alpha\text{-NSH}:\text{Y}$ с ориентацией $\langle 100 \rangle$ выполнено методом рентгеновской дифракционной топографии: станция «РТ-МТ», КИСИ-Курчатов; отражение под брэгговским углом $\theta \approx 8.13^\circ$, монохроматор Si(111), $\lambda = 0.89$ Å; энергия пучка 13.7 кэВ, отражения 202.

Установлено, что кристалл NSH:Y характеризуется меньшей концентрацией дефектов относительно NSH:Co. Характерное искажение профиля рефлекса на топограммах NSH:Co указывает на наличие полей деформаций. Менее деформированная область NSH:Y характеризуется меньшей плотностью дислокаций (500/см²) относительно технического кремния, используемого в солнечных элементах [1], что позволяет предположить равномерность объемного распределения допанта и сделать вывод о перспективности применения NSH:Y в УФ-фильтрах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Проект № FSFZ-2024-0003).

1. Л.А. Битюцкая, и др Учебно-методическое пособие, Воронеж: Изд.-полигр. центр Воронежского гос. ун., 34 (2013).

ДЕФЕКТЫ, ИНИЦИИРУЮЩИХ УСТАЛОСТНЫЕ РАЗРУШЕНИЯ В ГРАНУЛИРОВАННОМ СПЛАВЕ ЭП741НП (ЧАСТЬ II)

*В. В. Артемов¹, В. И. Бондаренко¹, М. А. Артамонов², А. С. Кумсков¹,
И. С. Павлов¹, Е. Ю. Марчуков², А. Л. Васильев^{1,3,*}*

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

²Филиал ПАО «ОДК–УМПО» ОКБ им. А. Люльки, Москва

³Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) Московская область, Долгопрудный

a.vasiliev56@gmail.com

В первой части опубликованных результатов исследования дефектов, обнаруженных на границах усталостных трещин в образцах из заготовок дисков газотурбинного двигателя представлены данные о кристаллической структуре и элементном составе дефектов [1]. Исследуемые образцы были изготовлены из гранул менее 140 мкм сплава ЭП741НП методом горячего изостатического прессования и последующей термообработки.

Методом электронно-ионной микроскопии проведена трехмерная реконструкция микроструктуры дефектов, связанных с образованием усталостных трещин в образцах, разрушенных в результате малоцикловых испытаний. Определены геометрические параметры выделенных в процессе 3D-реконструкции дефектов, содержащих Hf, Nb, Ti, Al, Ni. Была подтверждена гипотеза, предложенная в первой части [1]: конгломераты преципитатов HfO₂ и других формируют плоские «ковры» относительно малой толщины, что приводит к повышенному напряженному состоянию у дефектной области, при сравнении с объемными керамическими дефектами, традиционно относящимися к данному типу материала.

1. Павлов И.С., Артамонов М.А., Артемов В.В. и др. // Кристаллография. 2024. Т. 69. № 6. С. 927. <https://doi.org/10.31857/S0023476124060027>

ЭЛЕКТРОННАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ТОНКИХ ПЛЕНОК НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ФТОРИДОВ С РЗЭ

В.Н. Баранова¹, А.К. Кулыгин¹, А.С. Авилов¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Нестехиометрические фториды $M_xRe_{1-x}F_{2+x}$ ($M = Ca, Sr, Ba$; $Re =$ редкоземельный элемент) представляют интерес как перспективные твёрдые электролиты в виду особенностей ионной проводимости, связанной с формированием анионных вакансий при изменении состава. В тисонитовых и флюоритовых фазах проводимость демонстрирует немонотонный характер при изменении степени замещения x , объяснение механизма которого требует систематического изучения всего ряда соединений.

В наноразмерном состоянии материалы характеризуются высокой долей поверхностных атомов, дефектностью и гетерогенностью, что влияет на электронную структуру и формирует свойства, отсутствующие в объёмных образцах. Традиционный рентгеновский анализ на монокристаллах не применим к объектам размером ниже $\sim 0,05$ мкм, а порошковая XRD затруднена при уточнении *ab initio* неизвестных фаз. Электронная микроскопия и дифракция обеспечивают нанометровое разрешение и чувствительность к локальной структуре тонких плёнок и нанокристаллов.

Настоящая работа является частью серии исследований, направленных на прецизионное изучение нанокристаллических плёнок $M_xRe_{1-x}F_{2+x}$ методами электронной кристаллографии. Для нанокристаллов CaF_2 показано, что сочетание электронной прецизионной дифракции [1], микроскопии и полнопрофильного анализа (метод Ритвелда) позволяет корректно разделять перекрывающиеся рефлексы и выявлять сосуществование двух флюоритовых фаз с различными параметрами ячейки (5.46 и 5.91 Å). Для типичной фазы подтверждён ионный характер связи в рамках k -модели [2], а аномальная характеризуется дефицитом анионов и повышенными температурными факторами. Разработанный подход обеспечивает количественную характеристику нестехиометрических фторидов в наносостоянии и открывает путь к системному исследованию всего ряда $M_xRe_{1-x}F_{2+x}$.

Работа выполнена в рамках госзадания НИИЦ «Курчатовский институт».

1. А. К. Кулыгин, К. В. Кулыгин, А. С. Авилов, Кристаллография 65(2), 325-334 (2020).
2. N. K. Hansen, P. Coppens, Acta Cryst. A 34, 9 (1978).

IN SITU EXAFS ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО СИНТЕЗА ТИТАНОСИЛИКАТОВ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ ЦЕЗИЯ

К.В. Бархударов¹, Н.П. Иванов¹, В.А. Афонченко¹, А.Л. Тригуб²

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

²НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Для изучения процесса иммобилизации радионуклидов ^{137}Cs методом рентгеновской спектроскопии поглощения была разработана специальная экспериментальная установка. Основу установки составлял гидротермальный реактор, нагревательная плитка с ПИД-регулятором для точного контроля температуры и теплоизолирующая наружная оболочка.

Гидротермальный реактор имел двухкомпонентную конструкцию, состоящую из внутреннего тefлонового стакана, помещенного в металлический корпус. Для обеспечения прохождения рентгеновского излучения в металлическом корпусе реактора и наружной теплоизолирующей оболочке были выполнены соосные отверстия

Созданная установка обеспечила возможность проведения исследований в режиме реального времени (in situ) процессов синтеза титаносиликатов и иммобилизации радионуклидов цезия при контролируемом гидротермальном нагреве. Такая конфигурация позволила получить спектроскопические данные непосредственно в ходе протекания химических процессов без необходимости прерывания эксперимента.

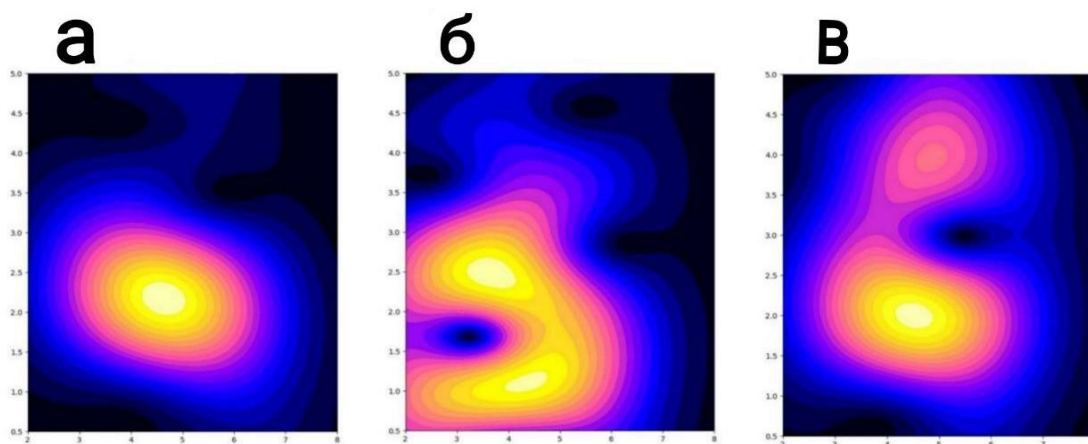


Рисунок 1 – Cs K Wavelet-преобразованные EXAFS спектры в полученных титаносиликатах: а) до нагрева, б) in situ 180 °С, в) после охлаждения

Исследование выполнено в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования № FZNS-2024-0013.

МИКРОАНАЛИЗ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК SmS, ПОЛУЧЕННЫХ МАГНЕТРОННЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Е.Б. Баскаков, С.И. Супельняк

«Лаборатория космического материаловедения - Калуга» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

Моносульфид самария (SmS) интересен своими термоэлектрическими свойствами, поэтому актуальной задачей является исследование свойств для использования и разработки термоэлектродвигателей на основе тонких пленок SmS. Целью работы было исследование электрических и термоэлектрических свойств тонких пленок SmS.

Исследуемый образец представлял собой тонкопленочную структуру SmS с Ni контактами на подложке ситалла и был получен посредством магнетронного распыления. Слой SmS напыляли в течении 10 мин при $I = 340$ мА и $U = 320$ В. Микроанализ пленки SmS, проведенный методом энергодисперсионной спектроскопии, показал равномерность состава по длине образца, наличие кислорода и значительное преобладание S со средним соотношением компонентов Sm:S = 0,55. По карте распределения электрического сопротивления по поверхности образца (рис.1, а) обнаружено, что плёнка SmS имеет градиент сопротивления от 3 до ~60 Ом, направленного поперек образца. Среднее значение измеренного сопротивления слоя SmS через Ni контакты составил $R_{\text{общ}} = 60$ Ом. Исследование термоэлектрических свойств показало уменьшение генерируемого термоЭДС с ростом температуры (рис.1, б).

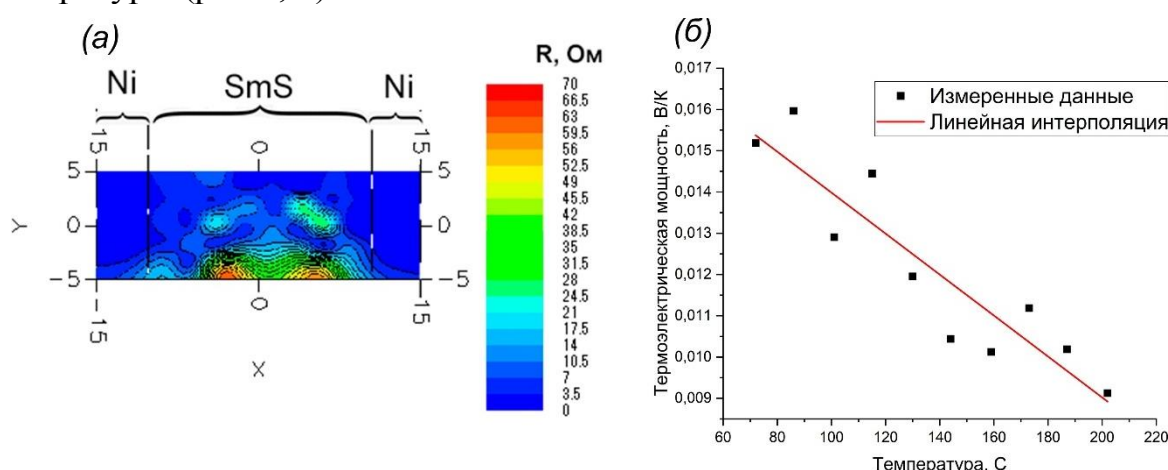


Рис.1. Электрические измерения: а – сопротивление, б – температурная зависимость коэффициента Зеебека

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». В части электронной микроскопии работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» КККиФ НИЦ «Курчатовский институт».

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛАНАРНЫХ НАНОСТРУКТУР SiC/Au/Si

Н.А. Башлыков¹, И.С. Волчков¹, А.Ш. Асваров¹

*Отделение институт Кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»*

Карбид кремния (SiC) является широкозонным полупроводником с непрямозонной структурой. Существует большое количество политипов кристалла SiC: кубический 3C-SiC, гексагональные 4H-SiC и 6H-SiC, каждый из которых за счет своих уникальных свойств находит применение в различных областях микро- и нанoeлектроники. Применение в МОП-транзисторах и устройствах полевой эмиссии обуславливает интерес в получении тонких плёнок и наноструктур SiC с заданным структурным политипом на Si- подложках или вискерах.

Данная работа посвящена изучению структурных особенностей массивов микро- и нановискероv SiC/Au/Si. Методика получения вискероv состоит из следующих стадий:

1. Выращивание вискероv Au/Si методом пар-жидкость-кристалл.
2. Нанесение тонкого слоя графита посредством высокотемпературного отжига в присутствии графитового нагревателя.

Полученные образцы исследовались методами РЭМ, ЭДС, РФА и рамановской спектроскопии.

Исследование методами РЭМ и ЭДС позволило построить карты распределения элементов, которые показывают, что имеется локализация скоплений углерода на остриях Si-вискероv, которая может указывать на образование тонкой пленки углерода на Si-вискерах и образование 3C-SiC. При этом первоначальная тонкая имеет тенденцию к кластеризации.

Результаты РФА показывают присутствие как рефлексов, относящихся к β -фазе 3C-SiC, так и рефлексy графитовых фаз.

Данные рамановской спектроскопии позволили подтвердить результаты исследований методами РЭМ и РФА. Наблюдаются как пики Si, так и пики, соответствующие политипу 3C-SiC, а также пики, характеризующие графитовую компоненту. Обсуждаются структурные особенности полученных планарных структур.

Работа проведена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОРТОФЕРРИТА ИТТРИЯ

А.О. Беляева, О.А. Кондратьев, Ю.М. Чесноков

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Среди перспективных соединений наноэлектроники и спинтроники особое место занимают магнитные материалы с антиферромагнитным типом упорядочения, к которым относится ортоферрит иттрия (YFeO_3). Для корректной работы спинтронных устройств желательно использовать однофазные системы, магнитное поведение которых было бы прогнозируемым.

Исследуемые в работе пленки ортоферрита иттрия были получены методом магнетронного распыления мишени, состоящей из смеси оксидов железа и иттрия, с последующим отжигом. Ввиду этого полученные пленки могут находиться в неравновесном состоянии, что способно привести к фазовому расслоению и существенно влиять на магнитные характеристики тонких пленок.

Целью работы было детальное изучение структурных изменений, происходящих в тонких пленках в результате высокотемпературного отжига, методами рентгеновской диагностики и электронной микроскопии образцов толщиной 5 и 200 нм до и после отжига. На основе структурных данных проанализированы изменения магнитных характеристик YFeO_3 плёнок.

Полученные результаты показали существенные различия в кристаллической структуре, приводящие к сложной вариации магнитных свойств отожженных и неотожженных образцов.

1. A.L. Vasiliev, I.A. Subbotin, A.O. Belyaeva et al. Phys. Metals Metallogr. 125, 64–77 (2024).
2. M. Andreeva, R. Baulin, A. Nosov et al. Magnetism. 2(4), 328-339 (2022).

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА μ -ОКСОМОСТИКОВОГО ДИМЕРА ЖЕЛЕЗА (III) НА ОСНОВЕ ЛИГАНДА N,N'-ЭТИЛЕНБИС(3-МЕТОКСИ-САЛИЦИЛИМИНА)

М.А. Благоев¹, Н.Г. Спицына¹, А.С. Лобач¹, Г.В. Шилов¹, А.И. Дмитриев¹, М.В. Жидков¹

¹ ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка

Механизмы, лежащие в основе катализа μ -оксомостиковых димеров железа (III) с salenовым лигандом, являются более сложными для понимания, чем для 4d- и 5d-металлов. Это в свою очередь связано с большим количеством доступных степеней окисления и спиновых состояний этого переходного металла [1,2]. В работе описаны магнитные свойства и мессбауэровские спектры μ -оксомостикового димера железа (III): $3[(\mu\text{-O})\{\text{Fe}^{\text{III}}(\text{3OMe-Salen})\}_2] \cdot 12\text{H}_2\text{O} \cdot 4\text{CH}_3\text{OH}$ (**1**), где salen = N,N'-этиленбис(3-метокси-салицилальдиминат). Магнитная восприимчивость описывается уравнением Блيني-Бауэrsa для $S=5/2$ с антиферромагнитным обменом: $g=2.062(1)$, $J/k_B=-161.2(3)$ К. Соответствие между теорией и экспериментом показывает, что три различные конформации димеров в элементарной ячейке не влияют на параметр обменного взаимодействия. Мессбауэровские спектры при 296 К ($\Delta E_Q=0.89$ и $\delta=0.33$ мм/с) и 78 К ($\Delta E_Q=0.85$ и $\delta=0.43(1)$ мм/с) также описываются одним дублетом, что подтверждается функцией распределения квадрупольных расщеплений.

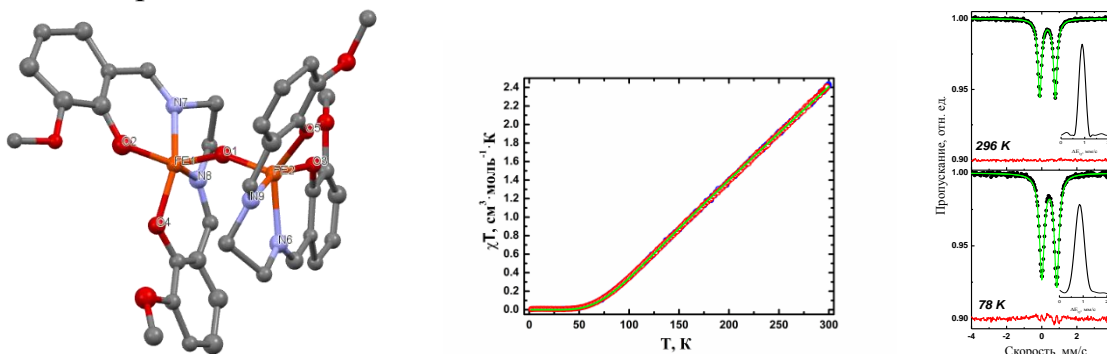


Рисунок 1. Слева: Димер в **1** при 100 К. Посередине: Температурная зависимость произведения магнитной восприимчивости на температуру в диапазоне 2-300 К. Справа: Мессбауэровские спектры **1** при 296 и 78 К. На вставке – функция распределения квадрупольных расщеплений.

Работа выполнена по теме Государственного задания, № гос. Регистрации 124013100858-3. При выполнении работы использовалась приборная база ЦКП ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

1. V. Murašková, V. Eigner, D. Sedmidubský, *Available at SSRN* 5393853, (2025).
2. H.J. Schugar, G.R. Rossman, C.G. Barraclough, H.B. Gray, *J. Am. Chem. Soc.*, 2683, 94, (1972).

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ НОВЫХ УГЛЕАЛЮМИНИЕВЫХ КОМПОЗИТОВ ПРИ МЕХАНИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ

*М.А. Большенко¹, А.В. Хохлов^{3,2}, С.Н. Галышев², Б.И. Атанов², В.И. Орлов²,
А.В. Бузмаков¹, Ю.С. Кривоносов¹, В.Е. Асадчиков¹*

¹ Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

² Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук

³ НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова

Углеалюминиевые композиты (УАК) представляют собой перспективный класс материалов для авиационно-космической отрасли благодаря уникальному сочетанию лёгкости, высоких удельных прочностных и жесткостных свойств, а также коррозионной стойкости и устойчивости к агрессивным средам. Однако их широкое внедрение сдерживается рядом физико-химических и технологических проблем, ключевыми из которых являются сложность пропитки углеродных волокон алюминиевым расплавом и образование хрупкого карбида алюминия на границе раздела фаз. Разработки данных композитов ведутся уже много лет, но так и не привели к успеху из-за проблем физико-химической и технологической природы [1].

Критическим фактором для обеспечения высоких механических характеристик УАК является формирование оптимальной границы между волокном и матрицей. Исследования показывают, что для повышения трещиностойкости и прочности композита необходимо не максимальное сцепление, а создание податливого интерфейса с контролируемо низкой прочностью на сдвиг. Одним из подходов к решению этой задачи является оптимизация терморежимов изготовления и легирование матрицы для минимизации роста карбидных фаз.

В данной работе для неразрушающего контроля структуры и анализа внутреннего строения образцов, полученных методом прессования углеалюминиевых проволок, применялся метод рентгеновской микротомографии. Проведенная сегментация данных позволяет выделить отдельные составляющие материала — алюминиевую матрицу и пучки проволок, что является основой для дальнейшего математического моделирования и количественного анализа механических свойств углеалюминиевых композитов. В работе предложен и реализован метод численного анализа структуры исследуемых образцов. Все проекции исследуемых образцов были сняты на томографах, функционирующих в НИЦ «Курчатовский институт» [2]. Образцы УАК получены в рамках проекта РНФ 22-79-10064-П.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Хохлов А.В., et al., J. Физическая мезомеханика. 28 (2), (2025)

2. Buzmakov A. et al., J. Applied Crystallography. 48 (3), (2015)

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Ti-Zr В ЭКСПЕРИМЕНТЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

*П.А. Борисова¹, С.М. Дубинский², О.В. Страхов², М.М. Мурашев¹,
С.С. Агафонов¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² НИТУ «МИСИС», Москва

Важным свойством сплавов на основе Ti таких систем, как Ti-Zr и Ti-Zr-Nb является возможность подобрать такое соотношение элементов, чтобы отрицательная и положительная амплитуды рассеяния Ti и Zr (или Zr и Nb) компенсировали амплитуду рассеяния (когерентную длину рассеяния) сплава и приводили ее к нулевому значению, то есть к отсутствию Брэгговских отражений. Поэтому сплавы на основе Ti-Zr представляют собой перспективные материалы, которые могут быть использованы в качестве кандидатов для разработки различных конструкций (оснасток, контейнеров для порошка и элементов ячеек высоких давлений), предназначенных для экспериментальных приложений при реализации метода нейтронной дифракции.

В данной работе проведены исследования с помощью рентгеновской и нейтронной дифракции и нейтронной радиографии сплавов $Ti_{67.6}Zr_{32.4}$ и $Ti_{67}Zr_{18}Nb_{15}$, полученных двумя методами – селективным лазерным плавлением и вакуумной дуговой плавкой. Проведена оценка пропускания нейтронов этими сплавами, сделано заключение о возможности использования (при комнатной температуре) в эксперименте по нейтронной дифракции контейнера из исследуемых сплавов на основе Ti для диагностики хорошо рассеивающего нейтроны порошкового образца, поскольку интенсивность порошка будет на несколько порядков выше, чем дифракционный сигнал от сплавов $Ti_{67.6}Zr_{32.4}$ и $Ti_{67}Zr_{18}Nb_{15}$.

Исследования нейтронной дифракции и радиографии выполнены с использованием уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт».

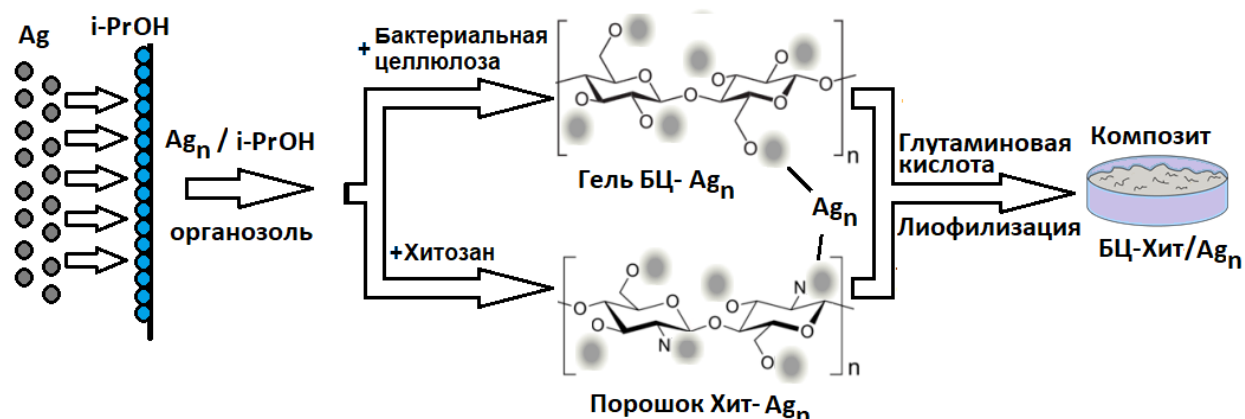
СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИЕ КОМПОЗИТЫ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ С ХИТОЗАНОМ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРА

И.Е. Бутенко¹, П.Р. Волошина¹, А.Ю. Васильков¹

¹ *Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова Российской академии наук*

Функционализация поверхности бактериальной целлюлозы (БЦ), не обладающей собственной биологической активностью, хитозаном (Хит) и наночастицами серебра (AgНЧ) является перспективным направлением, позволяющим расширить область применения этого биосовместимого полимера в медицине [1]. Это позволяет получить новые гибридные материалы, сочетающие свойства биополимеров и антимикробные свойства AgНЧ .

Композит бактериальной целлюлозы с хитозаном и наночастицами серебра (БЦ-Хит/ AgНЧ) был получен путем смешивания гелеобразной БЦ, полученной методом динамического культивирования, и хитозана, которые предварительно были модифицированы наночастицами серебра, синтезированными методом металло-парового синтеза (МПС).



Методами РФЭС, СЭМ/ЭДС и РФА исследованы состав, структура и электронное состояние металла в системах БЦ-Хит и БЦ-Хит/ AgНЧ . Композиты имеют пористую трехмерную сетчатую структуру с элементами фибрилл БЦ, объединенными пленками хитозана, и однородным распределением AgНЧ . Установлено, что серебро в полученном гибридном материале присутствует в двух состояниях - Ag^0 и Ag^+ .

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 24-23-00220

1. Vasil'kov, A.; Butenko, I.; Naumkin, A. et al. // *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24, 7667.

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЧЕТЫРЁХКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ ТИПА MIL-78 С ИОНАМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Д.А. Валешный¹, А.Г. Муштаков^{1,2}, Г.М. Кузьмичёва¹, Р.Д. Светогоров^{1,3},
В.Л. Демин¹, Е.Б. Маркова^{1,2}

¹МИРЭА – Российский технологический университет (РТУ МИРЭА)

²Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Многокомпонентные фазы с 4-мя и более компонентами (n) в составе могут относиться к высокоэнтропийным материалам (ВЭ) при реализации «коктейльного» эффекта, искажения локальной или/и атомной структуры из-за некогерентного срастания n элементарных ячеек с n разными ионами, медленной диффузии, высокой энтропии смешения (прежде всего, конфигурационной составляющей) и концентрации валентных электронов, результатом чего проявление скачкообразного изменения характеристик свойств (но не всех!) по сравнению с однокомпонентными аналогами.

Среди ВЭ выделяется большая группа кислородосодержащих соединений разной структурной сложности, среди которых особое место занимают металлоорганические каркасы (ВЭ-МОФ), сведения о которых крайне скудны или просто отсутствуют.

Цель работы – установление возможности отнесения к ВЭ-МОФ впервые полученных фаз общего состава $(4RE)BTC$.

Однофазные $(4RE)BTC$ и их компоненты $REBTC$ с ионами $RE^{3+} = Sm, Eu, Tb, Dy, Er$ и бензол-1,3,5- трикарбоновой кислоты $((BTC)^{3-})$ типа MIL-78 (пр. гр. $C2/m$, $Z = 8$; $a \sim 7 \text{ \AA}$, $b \sim 15 \text{ \AA}$, $c \sim 8.5 \text{ \AA}$, $\beta \sim 109^\circ$) (станция Белок-РСА; КИСИ «Курчатов»; метод Ритвельда) получены гидротермальным методом в автоклаве из смеси растворов ($C = 134 \text{ mM}$) солей $RE^{3+}(NO_3)_3 \cdot xH_2O$, H_3BTC и $NaOH$ в дистиллированной воде, термической обработке и сушке осадка на воздухе. Фазы $REBTC$ демонстрируют линейную связь объема ячейки ($V, \text{\AA}^3$) с атомным номером RE^{3+} для $RE = Sm - Ho$, а значение $V, \text{\AA}^3$ с $RE = Er^{3+}$ отклоняется от прямой ($V, \text{\AA}^3$ больше, чем должно быть при условии прямолинейной связи), что вызвано присутствием H_2O в пустотах каркаса $([ErBTC] \cdot mH_2O)$, подтвержденное методом ДСК. Образцы $(Sm, Eu, Tb, Er)BTC$, $(Sm, Eu, Tb, Dy)BTC$, $(Eu, Tb, Dy, Er)BTC$ с исходным эквимолярным соотношением RE показали увеличение химической стабильности в 1.11 раза (наибольшая величина $\Delta H = 8057 \text{ Дж/г}$ для $(Sm, Eu, Tb, Er)BTC$) по сравнению с однокомпонентными. Согласно ПЭМ, получены микрокристаллы с равномерным (с учетом специфики метода) распределением RE по образцам как с эквимолярным, так и с неэквимолярным соотношением RE в исходном составе. Все эти факты не исключают образование ВЭ- $(4RE)BTC$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Проект № FFSFZ-2024-0003).

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ ТОЧЕК В ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛАХ

В.Э. Валиулин^{1,2,3}, А.В. Михеенков^{1,2}, Н.М. Щелкачев^{1,2}, Е.А. Левашов³

¹Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

³Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Традиционные экспериментальные методы определения эвтектических точек эффективны для материалов с относительно низкой температурой плавления. Однако современные тугоплавкие соединения, характеризующиеся температурой плавления свыше 3000 К, требуют принципиально новых подходов к исследованию их эвтектических состояний из-за высокой стоимости и технической сложности экспериментальных исследований.

В данной работе представлен инновационный **численный метод** определения эвтектических точек, основанный на нейросетевом моделировании потенциала взаимодействия в тугоплавких системах. Эффективность подхода продемонстрирована на примере системы Ti-B-C, которая является одной из наиболее изученных в данной области.

Методология включает комплексное **компьютерное моделирование** основных физико-химических характеристик, как плотности материала, коэффициента диффузии и вязкости, а также модуля всестороннего сжатия. Анализ особенностей поведения этих параметров позволяет с высокой точностью определять положение эвтектических точек, что подтверждается совпадением результатов с экспериментальными данными. Разработанная вычислительная методика существенно сокращает необходимость проведения дорогостоящих экспериментальных исследований при поиске эвтектических точек в тугоплавких соединениях.

Таким образом, предложенный подход открывает новые перспективы для эффективного изучения эвтектических состояний тугоплавких материалов с использованием современных методов компьютерного моделирования.

РЕЗОНАНСНО-АНОМАЛЬНАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗОЛЯ, ОБОГАЩЁННОГО РУБИДИЕМ

Ю.О. Волков^{1,3}, А.М. Тихонов^{1,2,3}

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

² Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, Москва

³ Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна РАН, Черноголовка

volkov.y@crys.ras.ru

Метод резонансно-аномальной рефлектометрии основан на зависимости фактора атомного рассеяния от энергии зондирующего излучения: $f(q, E) = f_0(q) + f'(q, E) + if''(q, E)$. При этом резонансная часть структурного фактора $\delta F(q, E)$ определяет соотношение кривых отражения $R(q, E)/R_0(q)$, измеренных под и над краем поглощения искомого атома [1], тогда как нерезонансная часть $F_0(q)$, пропорциональная распределению электронной плотности $\rho_e(z)$ на межфазной границе, может быть рассчитана путем решения обратной задачи рефлектометрии для угловой зависимости зеркального отражения $R_0(q)$ [2].

В работе по данным резонансно-аномальной рентгеновской рефлектометрии с использованием синхротронного излучения в окрестности К-края поглощения атома рубидия (≈ 15.21 кэВ) нами изучено распределение левитирующих ионов Rb^+ на поверхности кремнеземных гидрозолей (коллоидных водных растворов наночастиц SiO_2 с характерными размерами 5 нм и 27 нм). Получены непараметрические распределения как электронной плотности $\rho_e(z)$, так и объёмной концентрации ионов Rb^+ по глубине $\mu(z)$ в приповерхностном слое, а также предложена качественная модель для их описания. Оценочная поверхностная плотность рубидия составила $\approx 4 \times 10^{18} \text{ м}^{-2}$, при толщине обогащенного слоя $\approx 20 \text{ \AA}$, что согласуется с количественными оценками избыточной концентрации рубидия в изученных системах, полученными в предыдущих работах [3].

Расчетно-методическая часть работы выполнена в рамках Соглашения № 075-15-2025-458 с Министерством науки и высшего образования РФ. Теоретическая часть работы выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-00200).

1. Fenter P., Park C., Nagy K.L., and Sturchio N.C., Thin Solid Films 515, 5654 (2007).
2. Kozhevnikov I.V., Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A 508, 519 (2003).

ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕН-ХИТОЗАНОВОГО КОМПОЗИТА, МОДИФИЦИРОВАННОГО КОНЬЮГАТАМИ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

П.Р. Волошина, А.Ю. Васильков, П.С. Локтева

¹ *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*

Распространение антибиотикорезистентных штаммов микроорганизмов требует создания новых эффективных антимикробных средств с комбинированным действием и низким риском развития резистентности. Создание гибридных коллаген-хитозановых композитов и их модифицирование конъюгатами наночастиц серебра (AgНЧ) с флавоноидами или антибиотиками позволяет объединить полезные свойства компонентов, такие как биосовместимость, антибактериальная активность, антиоксидантные свойства, а также придать материалу новые функциональные характеристики.

Получены новые нанокompозиты на основе коллаген-хитозановой матрицы (КолХит), содержащие конъюгаты кверцетина с наночастицами серебра (AgНЧ@Кверц) или грамицидина С с наночастицами серебра (AgНЧ@Грам). Гибридные нанокompозиты получали двумя различными способами. В первом случае проводили модифицирование готовой губки КолХит конъюгатом наночастиц металла с антибиотиком грамицидин С [1]. Во втором для получения металлсодержащего КолХит использовали порошки коллагена и хитозана, модифицированные конъюгатом AgНЧ@Кверц, которые переводили в гелеобразное состояние, затем гели смешивали и лиофилизировали с образованием пористой губки.

Результаты физико-химических исследований композитов (РФЭС, РФА, СЭМ/EDX) свидетельствуют о формировании пористой трехмерной сетчатой структуры, которая не нарушается при введении наночастиц серебра. РФА показал наличие наночастиц серебра с размером кристаллитов около 17 нм, равномерно распределенных в объеме материала. По данным РФЭС, серебро в образцах находится преимущественно в металлическом состоянии Ag^0 с незначительным присутствием Ag^+ .

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 24-23-00220

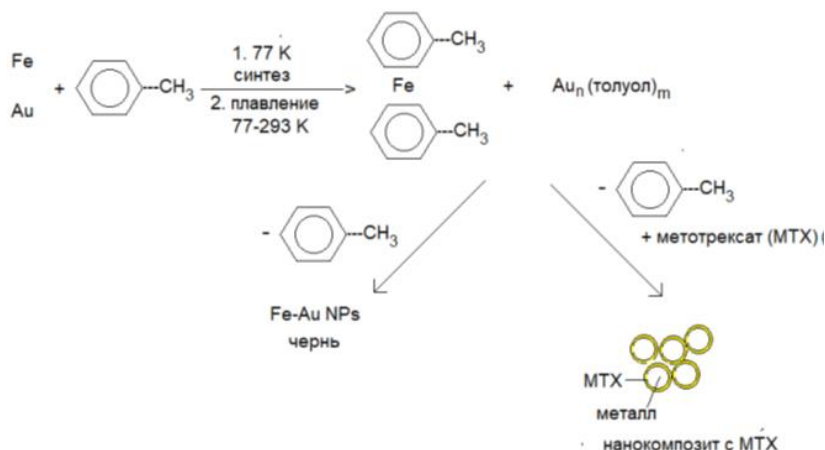
1. A.N. Tretyakova, P.R. Voloshina, et al., Mendelev Commun. 481, 35 (2025).
doi:10.71267/mencom.7706

АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ Au-Fe НАНОЧАСТИЦ И ИХ КОНЬЮГАТОВ С МЕТОТРЕКСАТОМ

А.А. Воронова¹, А.Ю. Васильков¹, А.В. Наумкин¹

¹ *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*

Серьезные ограничения традиционной химиотерапии при онкологии, связанные с неспецифичностью и побочными эффектами, могут быть сняты с помощью металлических наночастиц, так как они обеспечивают специфическую доставку лекарств и значительно повышают эффективность терапии, минимизируя нежелательные реакции [1]. Исследуемые системы биметаллических AuFe наночастиц (AuFe НЧ) и их конъюгатов с метотрексатом (MTX) были синтезированы методом металло-парового синтеза.



Методом РФЭС установлена химически неоднородная поверхность AuFe НЧ, в которой присутствуют две фазы с разными электропроводящими свойствами. Показано, что при взаимодействии MTX с Au регистрируется минимальное присутствие окисленного металла, но в биметаллических конъюгатах его доля увеличивается. Анализ спектров N 1s показал наличие Au-N связей, а характеристики C 1s и N 1s спектров указывают на экранирование Fe непроводящей MTX-Au оболочкой.

Мессбауэровская спектроскопия AuFe НЧ зарегистрировала состояния Fe⁰, а также Fe³⁺ и Fe²⁺. Обнаружены суперпарамагнитные НЧ γ-Fe₂O₃ размером 8-10 нм. Данные XANES/EXAFS указывают на неупорядоченную структуру твердого раствора Au⁰ и окисленного золота в матрице оксида железа.

Наночастицы AuFe и их конъюгаты с MTX проявили сильную антибактериальную активность против *Escherichia coli* и *Bacillus cereus*, что показывает их биомедицинский потенциал.

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ НОРМИРОВКИ СПЕКТРОВ РФА-СИ НА ТОК И НА КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ НА ПРИМЕРЕ СТАНДАРТНОГО ОБРАЗЦА ЗОЛОТОСОДЕРЖАЩЕЙ РУДЫ

К.С. Гаврилова^{1, 2}, В.А. Трунова^{1, 2}, Е.С. Крупович^{1, 2, 3}, Д.С. Сороколетов⁴

¹ *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН*

² *Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск*

³ *Центр коллективного пользования «СКИФ» ФГБУН науки Федерального исследовательского центра «Институт катализа СО РАН», Новосибирск*

⁴ *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск*

При проведении флуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения (СИ) стандартной практикой является нормировка интенсивности сигнала на ток накопителя для компенсации флуктуаций интенсивности источника [1]. Однако на сигнал также влияют факторы, связанные с пробой: неоднородность поверхности, рассеяние и поглощение. Цель работы — сравнительная оценка эффективности нормировки на ток и на интенсивность Комптоновского рассеяния для минимизации погрешности измерений на примере стандартного образца золотосодержащей руды (СЗР-2).

Исследование проведено на пробах стандартного образца СЗР-2 с аттестованным содержанием Au и As. Пики флуоресценции Au-L α и As-K α регистрировались при энергиях возбуждающих квантов 11,6 кэВ и 17 кэВ на станции элементного анализа (ВЭПП-3, ИЯФ СО РАН). Измеренные интенсивности нормировались двумя способами: на ток электронного пучка и на интенсивность пика Комптоновского рассеяния.

Нормировка на ток показала значительный разброс данных: стандартное отклонение (Sr) для Au-L α составило от 13% до 36%, для As-K α — от 15,3% до 35,4% (при 11,6 и 17 кэВ, соответственно). При использовании нормировки на Комптоновское рассеяние наблюдалось снижение разброса: Sr для Au-L α составило 5,9%, для As-K α — от 5,9% до 7,1%. При анализе графиков зависимости нормированного (на Комптоновское рассеяние) сигнала от тока линии тренда становятся более горизонтальными, а количество выбросов уменьшается. Также полиномиальный характер некоторых зависимостей после нормировки на Комптон может указывать на микрогеометрическую и химическую неоднородность проб, что требует дальнейшего исследования.

1. Сидорина А. В. Оптимизация методики определения элементного состава биологических объектов методом РФА-СИ : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.02 / А. В. Сидорина ; Ин-т неорганической химии им. А. В. Николаева. — Новосибирск, (2014). — С. 65-68.

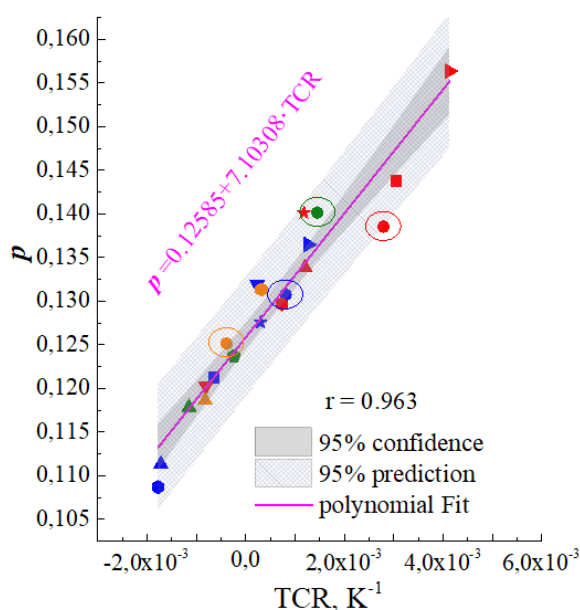
КОРРЕЛЯЦИЯ УРОВНЯ ДОПИРОВАНИЯ И ТЕМПЕРАТУРНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ КЕРАМИКАХ YBCO

*С.Х. Гаджимагомедов¹, Д.К. Палчаев¹, М.Х. Рабаданов¹, Ж.Х. Мурлиева¹,
М.Ю. Пресняков², Н.С. Шабанов¹, Р.М. Эмиров¹, А.Э. Рабаданова¹*

¹ Дагестанский Государственный Университет, Махачкала

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Установлена и обоснована линейная корреляция между уровнем допирования (p) и температурным коэффициентом электросопротивления (TCR) для 20 наноструктурированных сверхпроводящих керамик на основе YBCO [1]. Показано, что указанная зависимость сохраняется при варьировании условий синтеза нанопорошков и керамических образцов, при изменении пористости и дисперсности частиц, а также при различных средних значениях кислородного индекса и типах проводимости нормального состояния (металлическом или полупроводниковом).



Для характеристики образцов применялись: рентгенофазовый анализ на дифрактометре PANalytical Empyrean серии 2, просвечивающая электронная микроскопия на приборе Titan 80–300. Значение сопротивления измерялось четырёхзондовым методом на автоматизированной установке (на базе мультиметра Keithley 2002). Отличительной особенностью этих керамик является то, что основная сверхпроводящая фаза YBCO, характеризующаяся $T_c \sim 92K$, при наноструктурировании распадается на сверхпроводящие фазы с различной

кислородной стехиометрией (от ~ 6.9 до ~ 6.7), что приводит к уширению интервала ΔT_c .

Данная связь может быть полезна при разработке технологий получения наноструктурированных ВТСП с заданными характеристиками для создания компонент функциональной электроники. Представляется возможность оценок значения p или TCR, для наноструктурированных керамик YBCO, по одному из известных параметров.

1. S. K. Gadzhimagomedov et al., of Physics and Chemistry of Solids, 168, 110811 (2022).

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КАТИОНОВ Са НА СТРУКТУРУ ОЛИГОПЕПТИДАЗЫ В МЕТОДАМИ МУРР И МД

Ю.А. Гапонов¹, Д.Е. Петренко¹, Г.С. Петерс¹, А.М. Михайлова²,
Т.В. Ракитина^{1,2}

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

² Институт биоорганической химии им. акад. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН

Олигопептидаза В (OpV) является патогенным фактором протозойных инфекций, а также защищает бактерии от широкого спектра антимикробных пептидов. Известно, что ионы Ca^{2+} регулируют активность OpV в процессе протозойной инвазии [1]. Нами было показано влияние Ca^{2+} на активность бактериальной OpV из условно-патогенной бактерии макромолекулы *Serratia proteamaculans* (SpOpV), полученной в системе экспрессии *E. Coli*. Так как классические Са-связывающие центры в последовательности SpOpV отсутствуют, для изучения структурных основ влияния Ca^{2+} на активность белка была использована комбинация методов МУРР и МД.

Малоугловые эксперименты были проведены на станции БиоМУР синхротронного источника НИЦ «Курчатовский институт». Были получены кривые рассеяния от растворов рекомбинантной SpOpV в присутствии разных концентраций катионов Ca^{2+} . МД эксперимент проводили в течение 100 нс, используя открытую конформацию фермента в качестве стартовой модели.

Методом МУРР было показано, что в присутствии Ca^{2+} структурные характеристики макромолекулы меняются незначительно. Небольшое уменьшение радиуса Гинье, свидетельствующее о компактизации молекулы, подтверждало сближение доменов белка, которое наблюдалось при анализе МД траекторий. Детальный анализ МД траекторий показал уменьшение подвижности аминокислотных остатков в области функционально-важной гистидиновой петли, вызванное образованием стабильных полярных контактов между катионами Ca^{2+} и отрицательно-заряженными аминокислотными остатками белка.

Таким образом, данные о поведении молекулы в растворе в совокупности с анализом контактов между молекулой белка и катионами Ca^{2+} позволили установить природу Са-зависимых изменений активности фермента дикого типа и ряда мутантных вариантов, что в перспективе будет способствовать созданию таргетных ингибиторов фармакологически-важного фермента.

Малоугловой эксперимент проводили в рамках темплана НИЦ Курчатовский Институт. В части протеолитического анализа работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-536).

1. Motta F.N. et al. Oligopeptidase B, a missing enzyme in mammals and a potential drug target for trypanosomatid diseases // Biochimie. 2019. Vol. 167. P. 207–216.

МОДЕРНИЗАЦИЯ СТАНЦИИ РТ-МТ (КАНАЛ 1.6 СИНХРОТРОНА КИСИ- КУРЧАТОВ)

А.А. Гогин, Д.С. Горбунов, С.Н. Якунин, А.А. Калоян

НИЦ «Курчатовский институт»

В докладе представлены результаты глубокой технической и методической модернизации станции рентгеновской топографии и микротомографии (РТ-МТ) синхротрона КИСИ – Курчатова. Продемонстрированы весомые изменения в техническом и программном оснащении станции РТ-МТ.

Сочетание нового гониометра и современных контроллеров движения позволило добиться высокой прецизионности при проведении научных экспериментов по микротомографии и рентгеновской топографии с угловым и линейным сканированием. В состав РТ-МТ успешно имплементирован новый рентгеновский визуализационный детектор со сменными объективами, позволивший значительно улучшить пространственное разрешение (размер пикселя от 0,325 мкм).

Проведенная модернизация расширяет методические возможности установки и ее применение в области материаловедения. Новая система управления позволяет разрабатывать новые алгоритмы проведения экспериментов на РТ-МТ. В нее уже интегрировано большое количество известных методик исследования объектов с помощью рентгеновской топографии и микротомографии. На станции реализована востребованная пользователями методика непрерывного томографического сканирования, позволяющая исследовать динамические процессы. Кроме того, доступны методы классической и спиральной микротомографии. Представлены результаты впервые проведенных на станции экспериментов по секционной топографии, сканирующей топографии и топографии по Борману. Система управления ориентирована на пользователя и предоставляет ему возможность проводить все эксперименты в автоматическом режиме.

Описан новый подход к пред- и пост-обработке томографических данных, полученных на станции. Он позволяет минимизировать ошибки реконструкции данных и значительно подавляет кольцевые артефакты.

ПРОБЛЕМА УЧЕТА ДИХРОИЗМА И ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ ПРИ ОБРАБОТКЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ДИФРАКЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ

М.В. Горбунова, Е.Н. Овчинникова

МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва

При энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения атомов в низкосимметричных кристаллах как в геометрии поглощения, так и рассеяния, проявляется анизотропия, обусловленная расщеплением электронных состояний в кристаллическом поле или магнитным упорядочением. Современная экспериментальная техника позволяет провести рентгеновские поляризационные измерения и выделить вклады в спектры поглощения, обусловленными дихроизмом и двулучепреломлением в кристалле [1]. Также продемонстрировано влияние этих явлений на спектральные и азимутальные зависимости запрещенных отражений [2]. Возникновение таких отражений обусловлено локальной анизотропией положений атомов, поэтому необходимость учета перечисленных факторов при их обработке очевидна. В настоящей работе написана программа на языке Python, позволяющая провести учет дихроизма и двулучепреломления при обработке спектров запрещенных отражений в кинематическом приближении теории дифракции. Как входные параметры она использует данные, предварительно рассчитанные с помощью программы FDMNES [3]. Работа программы протестирована на примере обработки спектров запрещенных отражений в низкосимметричном F_3BO_6 (пр.гр.Pnma), измеренных ранее на синхротроне ESRF [4]. Продemonстрировано возрастание точности обработки спектров при учете явлений дихроизма и двулучепреломления в резонансных рентгеновских спектрах.

1. A.T. Schmitt, Y. Joly, K. S. Schulze, et al. Optica. 2021. V.8. P. 56-61. Hannon
2. Y. Joly, S. P. Collins, S. Grenier, et al. Phys.Rev.B. 2012. V.86, 220101.
3. <https://fdmnes.neel.cnrs.fr>.
4. Beutier G., Ovchinnikova E., Collins S.P., Dmitrienko V.E., et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V. 21. P. 265402-265414.

ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ НОВЫХ ГИПСОВЫХ КОМПОЗИТОВ

*А.Л. Головин¹, К.С. Петропавловский², В.Б. Петропавловская²,
Т.Б. Новиченкова², М.Г. Сульман², В.В. Артемов¹, А.Л. Васильев¹*

¹ *КК КиФ НИЦ «Курчатовской институт»*

² *Тверской Государственный технический Университет*

Создание композиционных материалов на основе гипсового вяжущего и модификация гипсовой матрицы за счет направленной кристаллизации, самоармирования нитевидными кристаллами и введения разнообразных заполнителей, включая пористые, дает возможность повысить их качество, добиться высокой прочности, низкой плотности и позволяет изготавливать из таких композитов широкий спектр строительных изделий: от строительных смесей до стеновых блоков, перегородок и т.д. Разработка таких материалов требует комплексного анализа структуры гипсовых композитов.

Состав гипсовых композитов исследован методами рентгенофазового анализа (РФА), растровой и просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭРМ). Так как в состав гипса входит вода (химическая формула $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), исследования методами электронной микроскопии (ЭМ) могут сопровождаться декомпозицией образцов. Поэтому, при ЭМ исследованиях необходимы были минимальные дозы облучения. Исследования проводились с использованием оборудования центра коллективного пользования КК КиФ «НИЦ Курчатовский институт»: рентгеновского дифрактометра Rigaku Miflex (Rigaku, Япония), двухлучевого электронно-ионного микроскопа Scios и просвечивающего/растрового электронного микроскопа Osiris (оба – Thermo Fisher Scientific, США).

В результате РФА обнаружено, что, наряду с основной кристаллической фазой – гипса – $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, моноклинная сингония, пр. г. $I2/c$, встречаются в разной пропорции β -гипс – $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ (моноклинная сингония, пр. г. $I2$, гексагональный $\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, ромбоэдрический графит и α -кварц. ЭМ исследования выявили кристаллические частицы с широким диапазоном размеров от десятков нм до десятков мкм. Более крупные частицы демонстрировали слоистую микроструктуру. Относительно мелкие частицы представляют собой поликристаллические образования нанометровых размеров. ЭРМ показал, что кроме основных элементов, а именно, Ca, S, O, в частицах гипса присутствует Na, K, Mg и Fe. Наряду с кварцем и графитом выявлены включения алюмосиликатов.

DSSNA: АЛГОРИТМ АНАЛИЗА ВТОРИЧНОЙ И ТРЕТИЧНОЙ СТРУКТУРЫ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ В ТРАЕКТОРИЯХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

С.В. Горелов^{1,2}, А.Л. Коневега^{1,2,3}, А.В. Швецов^{1,2,3}

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина*

²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург*

³*Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва*

gorelov_sv@npi.nrcki.ru

Современные методы исследования нуклеиновых кислот всё чаще требуют не только статического описания их структуры, но и учёта динамических изменений структуры макромолекулы во времени. Молекулярная динамика (МД) предоставляет широкий спектр информации о конформационных переходах, флуктуациях и взаимодействиях на атомном уровне, что имеет ключевое значение для понимания биологических процессов. Для анализа таких динамических данных необходимы специализированные алгоритмы, способные точно и эффективно раскрывать структурные особенности нуклеиновых кислот в траекториях МД. Для решения указанной задачи был разработан специализированный алгоритм DSSNA для анализа вторичной и третичной структуры нуклеиновых кислот непосредственно в траекториях молекулярной динамики.

Алгоритм DSSNA позволяет осуществлять детальный структурный анализ, сопоставимый по точности с результатами одного из признанных стандартов — x3dna-dssr [1,2], но с учётом динамики макромолекул. Разработанный алгоритм делает упор на анализ пространственного расположения оснований нуклеиновых кислот, но при этом не теряет способности безошибочно анализировать классические вторичные и третичные мотивы нуклеиновых кислот, обозначенных в алгоритме x3dna-dssr. Это значительно расширяет возможности исследований, поскольку позволяет выявлять динамические конформационные состояния, движения оснований, изменения водородных связей и другие характеристики, которые не видны при статическом анализе. Применение DSSNA способствует более глубокому пониманию молекулярных механизмов, таких как репликация, транскрипция, трансляция, регуляция и взаимодействия нуклеиновых кислот с белками.

Практическая значимость алгоритма DSSNA заключается в том, что он открывает новые горизонты для моделирования и анализа биомолекул с учётом реальной динамики и изменчивости, что важно для биофизических и биохимических исследований, а также для разработки новых лекарственных препаратов. В условиях современных вызовов в области молекулярной биологии способность анализировать и интерпретировать динамические данные становится всё более востребованной. Благодаря интеграции

алгоритма DSSNA исследователи получают мощный инструмент, позволяющий сочетать высокоточный структурный анализ с динамическими аспектами молекул нуклеиновых кислот, обеспечивая целостное понимание их поведения и функций на атомном уровне.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации грант №075-15-2024-630 (разработка алгоритма) и тема №1023031500033-1-1.6.7;1.6.4;1.6.8 Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика (молекулярная динамика и тестирования алгоритма).

1. Lu XJ, Olson WK. 3DNA: a software package for the analysis, rebuilding and visualization of three-dimensional nucleic acid structures. *Nucleic Acids Research*. 2003;31(17):5108–5121.
2. XJ, Olson WK. DSSR: an integrated software tool for dissecting the spatial structure of RNA. *Nucleic Acids Research*. 2015;43(21):e142.

ЭЛЕКТРОННОЕ И АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИТИТАНАТОВ КАЛИЯ И МАКСЕНОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ИОНАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

О.Ю. Грапенко¹, В.Г. Власенко, А.В. Гороховский²

¹ *НИИ физики, ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»*

² *ФГБОУ ВО «Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.»*

Исследование направлено на установление взаимосвязи между структурой и свойствами перспективных функциональных наноматериалов - полититанатов калия (ПТК) и максенов, модифицированных ионами переходных металлов. Актуальность работы обусловлена потребностью в создании эффективных фотокатализаторов для очистки сточных вод и материалов для устройств хранения энергии.

В результате исследований установлено, что оптимизация синтеза ПТК (соотношение $\text{TiO}_2\text{:KOH:KNO}_3$ с последующей обработкой H_2O_2) позволяет получать наноразмерные частицы (<50 нм) с повышенным содержанием Ti^{3+} (до 29,1-47,4 ат.%), что значительно усиливает фотокаталитическую активность. Модификация ПТК ионами переходных металлов (Fe, Cr, Co, Mn, Cu) приводит к образованию голландитоподобных структур, при этом большинство ионов (кроме меди) занимают октаэдрические позиции в решётке титана. Наибольшая каталитическая активность в реакции разложения метиленового синего под действием видимого света достигнута для Fe-модифицированного ПТК.

Изучение композитов на основе максенов показало, что диэлектрическая проницаемость системы $\text{PVDF/V}_2\text{CT}_x$ возрастает с концентрацией наполнителя из-за интерфейсной поляризации. Для композитных плёнок $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x/\text{Mo}_{1.33}\text{CT}_x$ установлено, что оптимальное содержание 20 мас.% $\text{Mo}_{1.33}\text{CT}_x$ обеспечивает максимальную удельную ёмкость $487 \text{ Ф}\cdot\text{г}^{-1}$ из-за улучшенной диффузии ионов и обратимости окислительно-восстановительных процессов.

Установлено, что ключевыми факторами, влияющими на каталитическую и электрохимическую активность, являются: размер частиц и морфология ПТК, формируемые в процессе синтеза; природа и локализация ионов переходных металлов в кристаллической решётке; специфические поверхностные свойства и межслойные взаимодействия в максенах.

Полученные результаты позволяют разработать научные принципы направленного синтеза функциональных наноматериалов с заданными каталитическими и электрофизическими свойствами для применения в фотокатализе и устройствах хранения энергии. Предложенные подходы к модификации слоистых наноматериалов открывают новые возможности для создания высокоэффективных каталитических систем и современных энергонакопительных устройств.

ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ РЕФЛЕКТОМЕТР ДЛЯ КОМПАКТНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ DARIA: МОНТЕ- КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ

N.A. Grigoryeva¹, N.A. Kovalenko², S.V. Grigoriev²

*1M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of
Sciences, Ekaterinburg, Russia 2B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, NRC
«Kurchatov Institute», Gatchina, Russia*

В работе представлены результаты McStas моделирования и оптимизации (с заданным разрешением по переданному импульсу $\Delta q/q \leq 5\%$) узлов рефлектометра, работающего на компактном источнике тепловых и холодных нейтронов. Предложенная система прерывателей позволяет формировать на образце спектр нейтронов необходимой ширины. Для уменьшения потерь нейтронов предложены нейтроноводы с суперзеркальным покрытием.

НЕЙТРОННАЯ СТРЕСС-ДИФРАКТОМЕТРИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЦИРКОНИЕВЫХ КАНАЛАХ СУЗ РБМК

Я.А. Белоусов^{1,2}, Г.О. Александров^{1,2}, В.И. Пастухов³, С.А. Аверин³,
В.А. Цыгвинцев³, С.С. Соловьева³, И.Д. Карпов⁴, В.Т. Эм⁴, А.Ф. Губкин^{1,2,3}

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

²Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург

³АО «Институт реакторных материалов» ГК Росатом, Заречный

⁴НИЦ «Курчатовский институт», Москва

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.

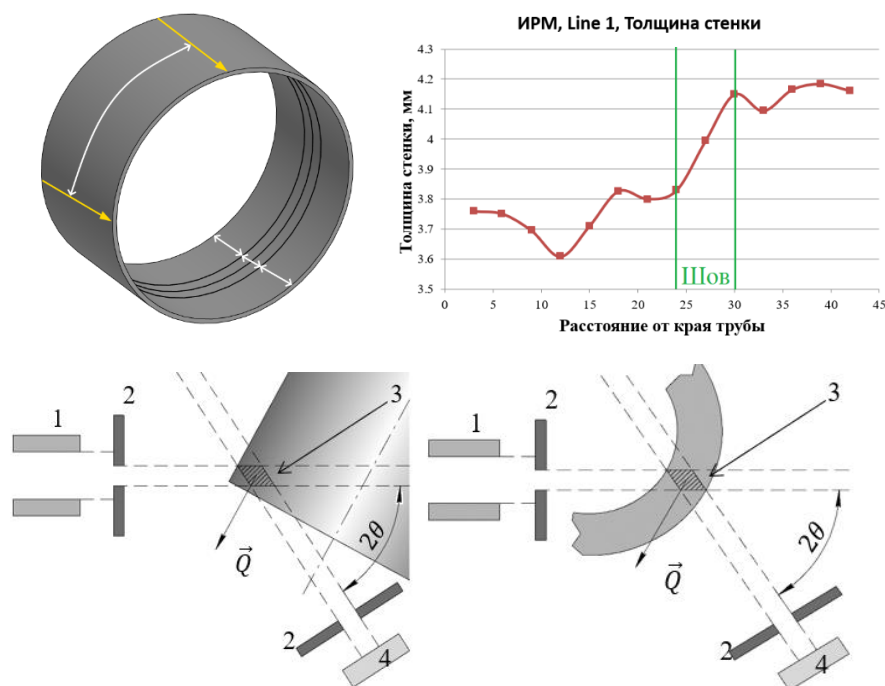


Рисунок 1. Общий вид образца с указанием двух направлений сканирования (желтые линии), результат измерения толщины стенки трубы вдоль направления сканирования, размещение образца на стресс-дифрактометре при измерении осевой и кольцевой компонент напряжений.

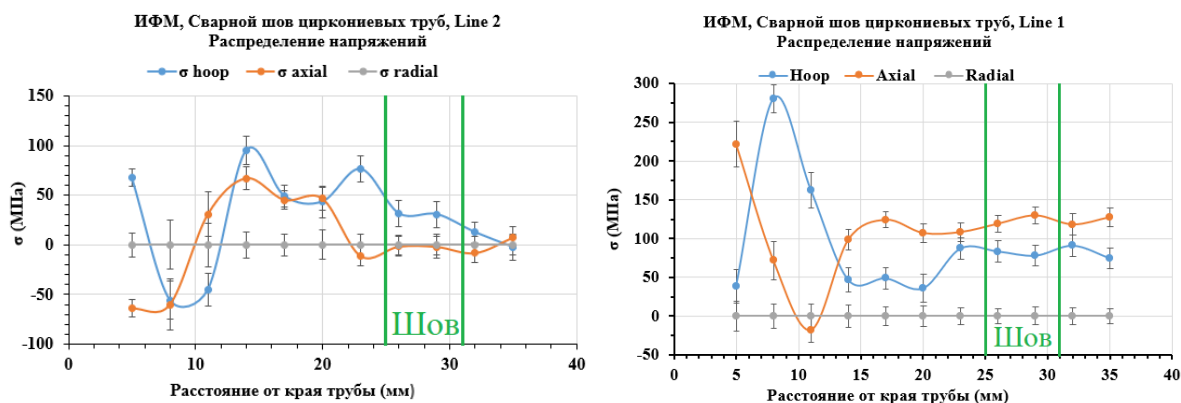


Рисунок 2. Сравнение результатов сканирования остаточных напряжений по двум линиям вдоль оси трубы.

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 90° 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 ~ 15 мм от края шва наблюдается в обоих случаях.

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

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, В.И. Пастухов, М.С. Лютикова, М.В. Чернецов, ВАНТ **5(96)** (2018) с. 49

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ ГЕКСАФЕРРИТА БАРИЯ $\text{BaFe}_8\text{Al}_4\text{O}_{19}$

С.А.Гудкова¹, Г.М. Зирник¹, Е. А. Шрамков^{1,2,3}

¹ Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

³ Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Дальневосточный федеральный университет»

Исследование оксидов сложного состава является актуальной задачей, в связи широким спектром применения этих соединений в электротехнике [1,2]. Примером сложного оксида является гексаферрит ($\text{MeFe}_{12}\text{O}_{19}$). Гексаферриты могут образовываться с барием и стронцием и другими двухвалентными металлами. При этом, гексаферрит бария – $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$, имеет структуру магнетоплюмбита, что приводит к появлению у него ряда уникальных свойств: высокая намагниченность насыщения, большая коэрцитивная сила, а также механическая прочность и высокая химическая стабильность. В кристаллической решётке $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ выделяют 5 типов атомов железа в зависимости от их атомарного окружения: 12k, 4f₂, 2b, 2a, 4f₁. Кристаллическая решётка $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ состоит из двух брутто формул.

Для расширения диапазона физических свойств $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ его легируют. В качестве легирующих элементов могут выступать: как металлы – висмут, галлий, цинк и т.д., так и неметаллы – бор, сурьма и т.д. С помощью легирования получается вносить изменения в коэрцитивные силы, параметры кристаллической решётки и температуру Кюри.

При этом на фоне всех возможных легированных гексаферритов качественно отличаются гексаферриты с высокой степенью замещения, например $\text{BaAl}_4\text{Fe}_8\text{O}_{19}$. Данное соединения обладает двумя точками Кюри, что было подтверждено с помощью порошковой нейтронной дифракции в геометрии Брэгга-Брентано проведённой на реакторе ИР-8 в НИЦ Курчатовский институт [3]. Из полученных спектров видно, что при нагреве пики, отвечающие за магнитный момент атомов железа в ряде кристаллографических плоскостей, сначала уменьшаются, а затем при температуре 500 °С начинают снова увеличиваться.

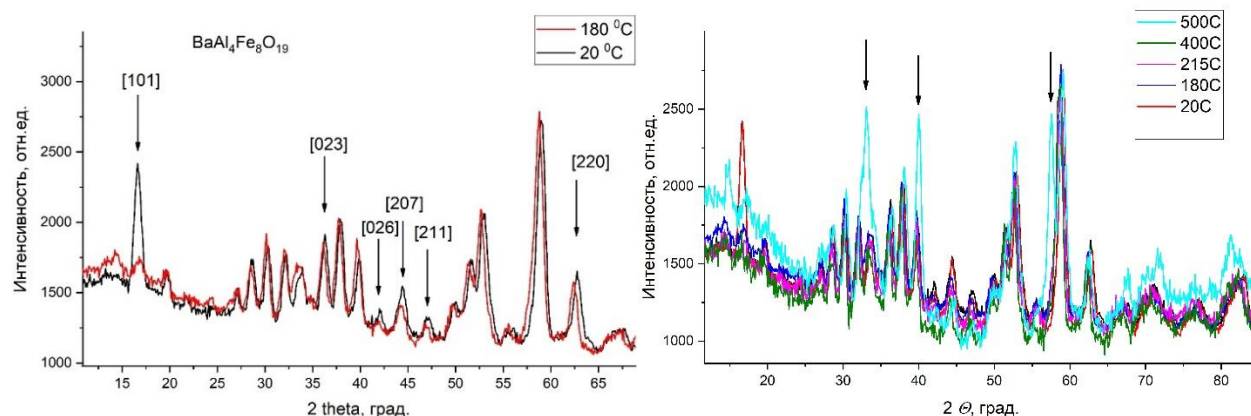


Рис. Дифракция нейтронов, полученная от $\text{BaFe}_8\text{Al}_4\text{O}_{19}$ при температурах 20° - 500°

Для определения позиций замещения железа алюминием была построена теоретическая модель. В теоретической модели квантово-химическими методами решалась задача численной оптимизации позиций атомов внутри кристаллической решётки, при этом параметры решётки оставались постоянными. Начальные расположения атомов в кристаллической решётке получались замещением нужного количества атомов железа атомами алюминия. Решение квантово-химической задачи осуществлялось методами описанными в статье 4.

По результатам расчётов энергетически выгодными являются системы с замещением железа на позициях 2a и 12k. Из всех полученных результатов наиболее интересным является решение с симметричным расположением замещаемых атомов относительно плоскости, проходящей через середину кристаллической решётки. В данной конфигурации внутри одной кристаллической решётки образуется область атомов железа и кислорода, по своим параметрам схожая с кристаллической решеткой магнетита Fe_3O_4 .

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

1. Talaat A. et al. // J. Alloys Compd. Elsevier, 2021. Vol. 870. 159500.
2. Pullar, Robert C.. // *Progress in Materials Science* 57 (2012): 1191-1334.
DOI:10.1016/J.PMATSCI.2012.04.001
3. Gudkova S.A. et.al. // JMMM. , 2023. Vol. 603, 172229
DOI: 10.1016/j.jmmm.2024.172229
4. Shramkov E. A. et. al. // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2025. V 19(2), P. 460–464.
DOI:10.1134/S1027451025700685

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ТОНКОЙ ПЛЁНКИ ТЬ С ГЕЛИКОИДАЛЬНЫМ МАГНИТНЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ

Д. И. Девятериков¹, Ю. А. Саламатов¹, Е.А. Кравцов¹, Г.Е. Жезляев¹, He Bai²,
Tao Zhu²

¹IMP UB RAS, Ekaterinburg, Russia

²CSNS, Dongguan, China

Известно, что в объёмных образцах Dy, Ho, Tb наблюдается появление геликоидального магнитного упорядочения при пониженной температуре[1]. Одной из актуальных задач является исследование влияния эпитаксиальных напряжений и размерных эффектов на особенности гелимагнитного упорядочения в тонких плёнках Dy, Ho, Tb [2-3]. В данной работе будут приведены результаты исследования кристаллической и магнитной структуры плёнки Tb (97 нм). Плёнка Tb была синтезирована методом высоковакуумного магнетронного распыления, осаждение производилось на подложку Al₂O₃ (a-pl), с использованием буферного и защитного слоёв Nb. Анализ кривых отражения рентгеновской рефлектометрии позволил оценить толщины слоёв в образце: Al₂O₃(a-pl)||Nb(49 нм)||Tb(97 нм)||Nb(27 нм). Анализ данных рентгеновской дифрактометрии позволил установить, что слои Nb и Tb являются текстурированными вдоль нормали к поверхности образца, в них реализуются следующие ориентационные соотношения с подложкой Al₂O₃(11-20)||Nb(110)||Tb(0001). Ориентационные соотношения в плоскости образца Al₂O₃(1-10-2)||Nb(001)||Tb(-2110) были получены путём анализа асимметричных сканов через рефлексы Nb (211) и Tb (11-24). Таким образом, слои Tb и Nb получились квазимонокристаллическими, что существенно отличает их от ранее исследованных плёнок Dy и Ho, текстурированных лишь в направлении нормали к поверхности образца [2-3]. Были получены значения постоянных решётки эпитаксиальном слое Tb $a=3.612 \text{ \AA}$, $c=5.688 \text{ \AA}$, что позволило установить, что решётка Tb в образце слегка сжата вдоль оси c. При анализе кривых отражения нейтронной рефлектометрии, полученных на инструменте MR в CSNS, Дуньгуан, Китай при температурах от 231 до 210 К, было установлено, что температурный диапазон существования гелимагнитной фазы во внешнем поле 100 Ое при изменении температуры по ZFC протоколу примерно соответствует таковому в объёмных монокристаллах Tb, в то время как при измерениях по FC протоколу, периодическое магнитное упорядочение сохранялось при температурах ниже T_c в монокристаллах Tb. Период магнитной геликоида незначительно уступает таковому в объёмных монокристаллах Tb, что качественно согласуется с результатами, полученными ранее для плёнок Tb [4].

1. Koehler, W.C., Journal of Applied Physics 36 (1965)
2. V.D. Mello *et al.* JMMM, 600 (2024)
3. A.A. Gurgel *et al.* JMMM, 610 (2024)
4. C Dufour *et al.* J. Phys.: Condens. Matter 9 (1997)

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СТАНЦИЯ «СЕРИЙНАЯ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ» НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ 4-ГО ПОКОЛЕНИЯ «СИЛА»

П.В. Дороватовский¹, В.А. Лазаренко¹, Р.Д. Светогоров¹

¹ *НИИЦ «Курчатовский институт»*

Dorovatovskiy_PV@nrcki.ru

В настоящее время разрабатывается новая установка "СИЛА" (синхротрон-лазер), которая не будет иметь аналогов в мире и превзойдет по техническим характеристикам существующие международные источники синхротронного излучения (СИ). Ввод объекта в эксплуатацию запланирован на 2032 год. Один из двенадцати каналов вывода СИ будет посвящен исследованиям в области кристаллографии макромолекул.

Рентгеновская кристаллография макромолекул, несмотря на бурное развитие методов электронной микроскопии, до сих пор остается основным методом получения трехмерной структуры макромолекул, возможности которого были расширены методом серийной кристаллографии [1]-[2]. Источник излучения был выбран ондулятор, который покрывает весь необходимый диапазон энергий (6-30кэВ) для задач макромолекулярной кристаллографии. Будущая станция «серийной макромолекулярной кристаллографии» сможет работать в нескольких режимах. Благодаря трем трансфокаторам, схема фокусировки рентгеновского излучения сможет работать в «режиме розового пучка», в «режиме широкого пучка» (размер пучка около 300мкм) и в «режиме микрофокусного пучка» (5мкм). Кроме того, благодаря планируемым возможностям дифрактометра можно будет быстро сканировать кристаллизационные планшеты и «каптоновые сетки - mesh», а также собирать данные серийной кристаллографии с нескольких разных кристаллов (планируется реализация только методов «фиксированной мишени»).

Высокая яркость источника, оптическая схема станции и широкие возможности окружения образца сделают станцию «серийной макромолекулярной кристаллографии» флагманом на территории РФ для анализа кристаллов белков, вирусов и других макромолекулярных комплексов.

1. Ursby T. et al. MicroMAX–new opportunities in macromolecular crystallography //ACTA CRYSTALLOGRAPHICA A-FOUNDATION AND ADVANCES. – 2 ABBEY SQ, CHESTER, CH1 2HU, ENGLAND : INT UNION CRYSTALLOGRAPHY, 2021. – Т. 77. – С. C817-C817.
2. Pearson A. R., Mehrabi P. Serial synchrotron crystallography for time-resolved structural biology //Current Opinion in Structural Biology. – 2020. – Т. 65. – С. 168-174.

IN SITU ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ 6H-SiC(0001) ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ РЕЗИСТИВНОМ ОТЖИГЕ

Д.Е. Дураков^{1,2}, А.С. Петров^{1,2}, Д.И. Роголо^{1,2}, Д.А. Насимов¹,
Д.Ф. Никифоров^{1,2}, Д.В. Щеглов¹, А.В. Латышев^{1,2}

¹ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск

² Новосибирский государственный университет

Сложность создания электронных приборов на основе графена заключается в получении его качественных слоёв на диэлектриках, поэтому перспективным является методом термического разложения карбида кремния (SiC). Быстрая сублимация Si в вакууме усложняет контроль качества и количества слоёв графена, но *in situ* наблюдение методом отражательной электронной микроскопии (ОЭМ) и дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) помогает управлять процессом графитизации SiC.

Были проведены эксперименты по отжигу подложек 6H-N SiC(0001) ($\sigma = 0.02\text{--}0.1$ Ом/см). Для *ex situ* анализа образцов применялся метод сканирующей электронной микроскопии (СЭМ).

Методами ОЭМ и был впервые зафиксирован процесс формирования ступенчато-террасированной морфологии поверхности 6H-SiC при отжиге и установлена зависимость эволюции морфологии поверхности SiC, измеренной СЭМ (Рис. 1), от времени отжига. Методом ДБЭО определены критерии завершения ключевых стадий процесса: формирование буферного слоя диагностируется по появлению в дифракционной картине рефлексов сверхструктуры $(6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3})R30^\circ$, а его преобразование в монослой графена – до исчезновения этих рефлексов [1] и образования двуслойного графена (вставка на Рис. 1).

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Наноструктуры». Диагностика методами СЭМ выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-72-30023).

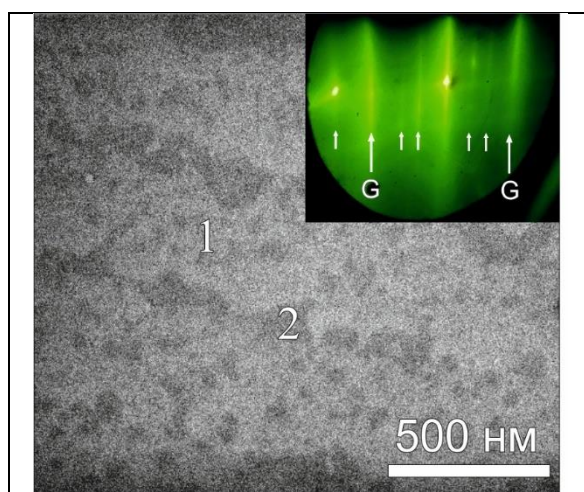


Рис. 1. СЭМ-изображение поверхности SiC после отжига 5 мин при $T = 1300^\circ\text{C}$, «1» и «2» области с однослойным и двуслойным графеном. На вставке изображена картина ДБЭО во время отжига, соответствующая СЭМ-изображению.

О СИСТЕМЕ КОРРЕКЦИИ ЗАМКНУТОЙ ОРБИТЫ ДЛЯ ПРОЕКТА СИЛА

В.С. Дюбков^{1, 2}, И.А. Юрин^{1, 2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Для проведения прецизионных экспериментов с фотонами, генерируемыми электронными сгустками источника СИ 4-го поколения «СИЛА», реализуемого НИЦ «Курчатовский институт», необходимо осуществлять контроль и коррекцию замкнутой (равновесной) орбиты пучка. Для эффективной работы пользователей СИ стабильность орбиты должна быть не хуже 10% от размера электронных пучков [1]. Для коррекции магнитного поля, хроматичности и секступольных нелинейностей магнитных полей оптических элементов, а также ошибок их выставки, предусмотрена система коррекции, включающая, помимо прочего, 11 корректирующих магнитов (корректоров) на каждом из 40 суперпериодов накопительного синхротрона «СИЛА». Для контроля положения пучка в магнитооптической структуре накопительного синхротрона «СИЛА» предусмотрено 10 мониторов положения пучка (BPM) в расчете на каждый суперпериод накопителя. Для проекта «СИЛА» предполагается внедрение новой, специально разрабатываемой для проекта, аппаратной архитектуры системы обратной связи по пучку. В работе представлены предварительные результаты расчетов, полученные для предполагаемых полевых ошибок и ошибок выставки магнитных элементов накопителя без учёта наведённых пучком (пучками) полей. Характерный вид матриц отклика представлен на рисунке 1.

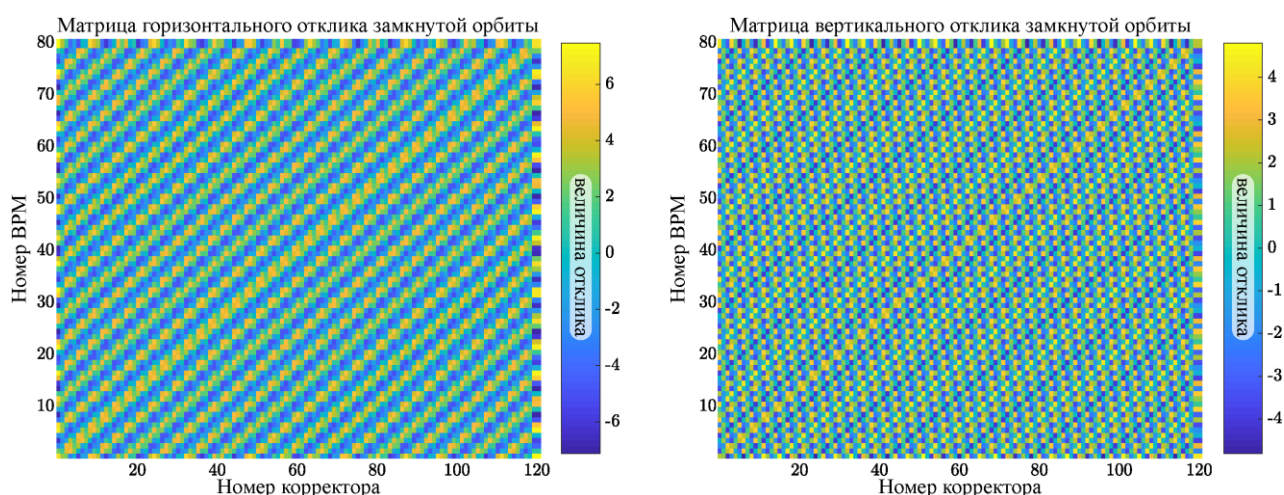


Рисунок 1 – Характерный вид матриц отклика (включены два BPM на периоде вблизи встраиваемого устройства и три универсальных корректора)

1. P G. Decker, in Proceedings of DIPAC 2005 (Lyon, France, 2005), p. 233.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ РЕШЁТКИ «а» И «с» В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЁНКАХ FeRh ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ AFM-FM

Г.Е. Жезляев^{1,2}, Д.И. Девятериков¹, Е.А. Кравцов^{1,2}, В.И. Зверев³

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

²Уральский федеральный университет, Екатеринбург

³Физический факультет Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, Москва

В эквиатомном соединении FeRh наблюдается необычный магнитоструктурный переход из антиферромагнитной (АФМ) в ферромагнитную (ФМ) фазу при переходе через критическую температуру ~ 380 К. В объёмных образцах переход сопровождается изотропным расширением ОЦК решётки FeRh на 1% [1]. В эпитаксиальных тонких плёнках FeRh аналогичный фазовый переход сопровождается тетрагональным искажением элементарной ячейки FeRh с увеличением параметра решётки «с» в направлении нормали к поверхности образца [2]. При этом в образце в некотором диапазоне температур наблюдается сосуществование ФМ и АФМ фаз, характеризующихся различными значениями параметров решётки. Настоящая работа посвящена изучению процессов, происходящих как с параметром решётки с в направлении «out-of-plane», так и с параметром решётки «а» в направлении «in-plane» при фазовом переходе.

Работа производилась на рентгеновском дифрактометре PANalytical Empyrean. В ходе эксперимента измерялась температурная зависимость положения трёх рефлексов out-of-plane: FeRh(003), FeRh(103), FeRh(222). Измерение FeRh(003) производилось в симметричной геометрии, в то время как FeRh(103) и FeRh(222) в асимметричной геометрии пучка. Разделение вкладов в дифракционный максимум ФМ и АФМ фаз в температурном диапазоне их сосуществования производилось с помощью фитирования рефлекса функциями распределения Пирсона (VII) и Войта. Предполагая, что каждая из фаз обладает тетрагонально искаженной элементарной ячейкой собственным набором постоянных решётки (a_{AFM} , c_{AFM} , a_{FM} , c_{FM}), мы получили зависимости этих постоянных решётки от температуры и оценили изменение количества FM и AFM фазы с температурой.

1. A. I. Zakharov, A. Kadomtseva, R. Levitin, and E. Ponyatovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 2003 (1964).
2. M. A. de Vries, M. Loving, M. McLaren, R. M. D. Brydson, X. Liu, S. Langridge, L. H. Lewis, C. H. Marrows, Appl. Phys. Lett. 9 June 2014; 104 (23): 232407.

СТРУКТУРНЫЕ И ЯМР-ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ СПЛАВА КОБАЛЬТ-МЕДЬ

*Д.Л. Загорский¹, И.М. Долуденко¹, Е.С. Куликова¹, П.В. Дороватовский¹,
С.А. Чупраков², А.П. Геращенко²*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»
² Институт физики металлов УрО РАН

Отработаны способы получения массивов нанопроволок (НП) из двухкомпонентного сплава кобальт-медь методом матричного синтеза. Известно, что добавлением небольших количеств меди может значительно изменить магнитные свойства кобальта-например, увеличить коэрцитивную силу. В работе синтезирован ряд образцов НП и показана связь их структуры и состава с условиями роста - составом электролита и ростовым напряжением. Элементный анализ показал, что с увеличением ростового напряжения уменьшается содержание меди и соответственно увеличивается содержание кобальта.

Структурные исследования проводились как на рентгеновском дифрактометре, так и на источнике СИ. Полученные данные взаимно дополняют друг друга. Так, было выявлено наличие двух фаз кобальта (ГЦК и ГПУ); причём увеличение ростового напряжения приводит к увеличению количества ГЦК фазы. Изменение параметров решёток для обеих фаз примерно соответствует закону Вегарда. Это является косвенным доказательством того, что каждая из фаз является твёрдым раствором.

Измерение ЯМР подтвердили соответствующее изменение соотношения ГЦК и ГПУ фаз. Наличие низкочастотных линий в спектрах ЯМР свидетельствует о формировании твёрдого раствора, в котором атомы кобальта координированы несколькими атомами меди. Уменьшение интенсивности этих линий в образцах, полученных при более высоком ростовом напряжении, свидетельствует об уменьшении количества меди в твердом растворе.

Работа по получению, аттестации и структурным исследованиям (рентген и СИ) проведена в рамках выполнения Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». ЯМР исследования выполнены в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН.

МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОПРОВОЛОКИ ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ: СИНТЕЗ И МИКРОСКОПИЯ

*Д.Л. Загорский¹, И.М. Долуденко¹, Д.А. Бизяев², О.М. Жигалина¹,
В.М. Каневский¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² КФТИ им Завойского, Казань

В работе получены и исследованы различные типы функциональных нанопроволок (НП) из металлов группы железа и меди. Метод матричного синтеза позволяет изменяя состав электролита и условий осаждения получать несколько типов НП- однокомпонентные, многокомпонентные гомогенные и гетерогенные (слоевые).

Изучена возможность применения массивов НП в качестве катализаторов. Показано, что образцы с медными НП ускоряют процесс окисления окиси углерода, а кобальтовые НП ускоряют реакцию гидрирования этилена. Эффект вызван значительным увеличением площади поверхности.

Магнитные свойства НП отличаются от свойств объёмных аналогов. Это связано с наноразмерностью и высоким аспектным отношением НП. Показано увеличение коэрцитивной силы, изменение направления оси лёгкого намагничивания. Для слоевых НП продемонстрировано их «разделение» на отдельные магнитные наночастицы (для медицины), генерация излучения терагерцовой частоты при пропускании тока.

Для изучения типов НП и этапов их получения использовались различные типы микроскопии. Так, РЭМ успешно применялась для аттестации исходных матриц и их срезов, для анализа полученных НП- их длины, диаметра, расположения. При анализе слоевых НП наиболее эффективным оказался метод ПЭМ-была определена толщина наноразмерных слоёв, их элементный состав. Электронная дифракция выявила отличающуюся структуру соседних слоёв.

Зондовая микроскопия позволила для отдельной НП выявить отдельные домены и характер перемагничивания во внешнем поле. Для НП в матрице был изучен характер перемагничивания во внешнем поле, определяемый взаимодействием с соседними НП.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ЭФФЕКТИВНАЯ ИММОБИЛИЗАЦИЯ ^{137}Cs С ПОМОЩЬЮ ДВУХКАТИОННЫХ ТИТАНОСИЛИКАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МИКРОВОЛНОВЫМ СИНТЕЗОМ

*А.Р. Зайкова¹, Н.П. Иванов¹, В.Б. Ринчинова¹, К.В. Бархударов¹,
Д.К. Цыганков¹*

¹ Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

zaikova.alena2006@yandex.ru

Загрязнение водных экосистем радионуклидом Cs^+ в процессе эксплуатации ядерного топлива остается острой экологической проблемой. Это связано с его высокой радиотоксичностью, длительным периодом полураспада и значительной удельной активностью. Одним из эффективных способов очистки жидких радиоактивных отходов является использование неорганических сорбентов, обладающих цеолитоподобной структурой, для селективного извлечения радионуклидов.

Титаносиликаты представляют особый интерес благодаря своей прочной кристаллической решетке, включающей атомы титана, кремния и кислорода. Такая структура формирует развитую систему каналов, способствующую селективной сорбции катионов Cs^+ за счет эффекта ионного сита. Эти свойства делают титаносиликаты перспективными материалами для очистки жидких радиоактивных отходов и последующей долговременной фиксации ^{137}Cs .

В ходе исследования был получен титаносиликат фармакосидеритового типа методом гидротермально-микроволнового синтеза. Процесс проводился при температурах 180°C, 200°C и 220°C, в течение 24 часов при давлении 1,3 МПа. Анализ структурных характеристик синтезированных образцов подтвердил их высокую стабильность, а сорбционные свойства были изучены путем определения фазового и элементного состава, удельной поверхности и размеров пор.

Данные, представленные в таблице 1, демонстрируют коэффициенты распределения ^{137}Cs в растворах NaNO_3 (0,1 моль/дм³) для различных типов сорбентов. Было установлено, что наилучшими свойствами в условиях высокосолевых растворов обладают образцы GTS-M-200 и GTS-M-220, что подтверждает их высокую эффективность в селективном извлечении радионуклидов.

Наименование образца	Значения K_d ^{137}Cs , см ³ /г при сорбции из раствора
	0,1 моль/дм ³ NaNO ₃
GTS-M-180	47100±5350
GTS-M-200	92500±6440
GTS-M-220	72700±8690

Таблица 1. Значения коэффициента распределения (K_d) ^{137}Cs на различных сорбентах

Работа выполнена в рамках Государственного задания № FZNS-2024-0013, тема: «Спектроскопия рентгеновского поглощения на источниках синхротронного излучения для направленного химического синтеза функциональных материалов востребованных в атомной промышленности»

РЕНТГЕНООПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Д.А. Зверев¹, А.А. Баранников¹, А.С. Нарикович¹, А.А. Снигирев¹

¹ Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта, Калининград

daswazed@yandex.ru

Возможность оперативного измерения параметров источника (его размера, расходимости и стабильности пучка) обеспечивает бесперебойную работу при различных экспериментальных схемах и гарантирует оптимальную производительность пользователей. По принципу работы все оптические методы, используемые в диагностике пучка, можно разделить на два направления: прямой метод визуализации источника и интерферометрический подход для измерения волнового фронта. Первый метод дает пространственное изображение источника, а второй — представление о фазовой структуре пучка.

Прямой метод изображения источника может быть реализован при помощи преломляющей оптики. Система диагностики и мониторинга высокоэнергетического источника на основе преломляющих параболических линз была предложена еще в 2001 году [1]. В серии экспериментов на различных станциях ESRF, была показана возможность изображения источника с высоким пространственным и временным разрешением с помощью составных преломляющих линз. Преимуществами использования такой оптики являются ее высокая эффективность в жесткой области спектра рентгеновского излучения, а также гибкость настройки оптической схемы для получения увеличенного изображения источника.

Интерферометрический подход используется для фазовой диагностики пучка, проведения измерений параметров источника и визуализации волнового фронта. В зависимости от конкретных задач может применяться планарный многолинзовый интерферометр, например, изготовленный из кремния [2-4]. Альтернативным эффективным решением является применение борного волокна, выступающего в роли хорошо откалиброванного оптического объекта. Этот подход позволяет не только проводить измерение параметров источника, но и характеризовать влияние на когерентность пучка любых оптических элементов, интегрированных в экспериментальную схему [5].

1. T.Weitkamp, et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equ.467, 248-251 (2001).
2. A. Snigirev, et al., Physical Review Letters 103, 064801 (2009).
3. D.Zverev, et al., Optics Express 28, 21856-21868 (2020).
4. D.Zverev, et al., Optics Express 29, 35038-35053 (2021).
5. V.Kohn, et al., Physical review letters 85, 2745 (2000).

НАНОЧАСТИЦЫ ОКСИДА ЦИНКА ДОПИРОВАННЫЕ Sm и Eu: ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

Я.Г. Зернов¹, Т.В. Резниченко¹, А.Л. Тригуб², Н.П. Иванов¹, А.В. Шурыгин¹

¹ Дальневосточный Федеральный Университет, Владивосток

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Перспективы применения наноструктурированного оксида цинка, допированный ионами самария и европия, являются многообещающими в области фотокатализа и оптических технологий. Образцы были синтезированы при отжиге ацетатных солей металлов в муфельной печи при 600°C. Средний размер частиц на основе СЭМ снимков составил 150 нм. При допировании оксида цинка самарием обнаружены фотокаталитические способности к нейтрализации метилового оранжевого и родамина Ж. При допировании оксида цинка европием выявлены фотолюминесцентные свойства. Уникальные люминесцентные свойства этого материала, допированного Eu, открывают возможности для его использования в оптоэлектронике и биосенсорике.

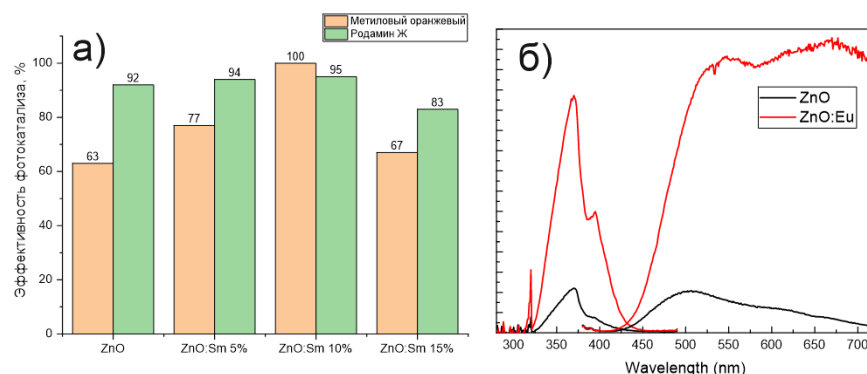


Рисунок 1. (а) Эффективность фотокатализа для образцов с самарием.
(б) Фотолюминесценция возбуждения и поглощения

Фотокаталитические исследования проводили при УФ свете в течение 24 часов при постоянном при перемешивании. Концентрация красителя была взята 10 мг/л. Фотолюминесцентные спектры были получены для твердых образцов с энергией возбуждения 365 нм. Спектр эмиссии представляет собой широкую полосу от 400 до 800 нм с двумя выраженными максимумами. Методом спектроскопии рентгеновского поглощения на станции СТМ КИСИ-Курчатов по краю поглощения самария выявлено частичное замещение атомов Zn на Sm в кристаллической решетке.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

ШИРОКОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ В ГЕОМЕТРИИ СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ: ИССЛЕДОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЛОЕВ МЕЛЬДОНИЯ В ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Э.С. Ибрагимов¹, О.А. Кондратьев¹, А.О. Беляева¹, Н.В. Марченков¹,
Н.Н. Удалова², А.Е. Тарасов²

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Широкоугольное рентгеновское рассеяние в скользящей геометрии (GIWAXS) – метод рентгеновского дифракционного структурного анализа, при котором регистрируется двумерная карта рентгеновского рассеяния, как правило, в диапазоне до 45° при малых углах падения (обычно менее 1°) рентгеновских лучей на образец. Среди разнообразных рентгенодифракционных методов GIWAXS является одним из наиболее полезных для исследований тонких поликристаллических пленок, позволяя получать куда более широкий спектр структурных данных по сравнению с классическими методами рентгеновской дифракции.

GIWAXS позволяет расширить возможности классической дифрактометрии. Двумерные карты рассеяния позволяют проводить не только продвинутый фазовый анализ, но и исследовать текстуру поликристаллической пленки, ее микро- и макронапряжения [1]. При этом анализ данных параметров может быть выполнен как качественно, так и количественно, например, возможна оценка разориентации кристаллитов. Скользящая геометрия падения (grazing incidence) имеет особое значение для проведения исследований чувствительных к поверхности и глубине проникновения рентгеновского излучения, что позволяет проводить профилирование тонких пленок по глубине.

Данный метод был реализован с использованием рентгеновского дифрактометра Rigaku SmartLab Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований НИИЦ «Курчатовский институт» и применен для исследования серии образцов тонких пленок гибридных перовскитов FAcSbI₃. GIWAXS исследования продемонстрировали как возможность проведения традиционного фазового анализа, так и исследований свойств поверхности пленки. В частности, получение серии дифракционных картин в скользящей геометрии в диапазоне углов падения рентгеновского излучения от 0,2° до 1° позволило локализовать кристаллические фазы, образующиеся при пассивации поверхности исследуемых пленок с помощью компактных цвиттер-ионов мельдония [2].

В работе впервые доказана успешность пассивации поверхности компактными цвиттерионами мельдония. Был продемонстрировано повышение стабильности и эффективности перовскитных материалов и устройств на их

основе. Химическая природа цвиттер-ионов мельдония позволила достичь комбинированного воздействия на перовскитный материал, одновременно улучшая его оптоэлектронные свойства, микроморфологию и устойчивость к различным стрессовым факторам.

1. W.L. Tan, C.R. McNeill. X-ray diffraction of photovoltaic perovskites: Principles and applications // Appl. Phys. Rev. 2022. V. 9. No. 2. P. 021310.
2. Udalova N. N. et al. Compact Meldonium Zwitterion as a Promising Multifunctional Surface Passivator for Perovskite Solar Cells with Increased Stability //ACS Applied Energy Materials. – 2025.

РАЗРАБОТКА ПРОТОТИПА РАДИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИД-СО-ГЛИКОЛИДА С ЗАГРУЖЕННЫМ НЕРАДИОАКТИВНЫМ ИЗОТОПОМ ЭРБИЯ (III)

А.Д. Иваненко, А.И. Кулебякина, А.В. Бакиров, Д.Р. Стрельцов

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Одним из наиболее перспективных радиоактивных лантаноидов для применений в адресной β -терапии является ^{169}Er . Его основным преимуществом считается низкоэнергетическое β -излучение, а также практически полное отсутствие γ -излучения. Этот изотоп по основным характеристикам конкурирует с эталонным β -излучателем ^{177}Lu , который в настоящее время используется в коммерчески доступных радиофармпрепаратах для лечения нейроэндокринных опухолей [1]. Целью данной работы является разработка модельного радиофармацевтического препарата на основе полилактид-со-гликолида (ПЛГА) с загруженным нерадиоактивным изотопом редкоземельного металла эрбия.

В настоящей работе проведено сравнение двух методов загрузки ионов металла в наночастицы ПЛГА: инкапсуляция и поверхностная адсорбция, для сравнения эффективности загрузки, а также для определения особенностей распределения ионов в частице. Полученные наноосаждением незагруженные частицы (образец 1) характеризуются гидродинамическими диаметрами (D_h) 122 нм. Поверхностная адсорбция ионов эрбия (III) на наночастицы (образец 2) не влияет на D_h . Частицы с ионами эрбия (III), инкапсулированными в объем наночастиц ПЛГА (образец 3), имеют D_h 142 нм. Изображения, полученные методом АСМ, демонстрируют сферическую морфологию частиц всех трех образцов, размеры коррелируют с ранее полученными значениями D_h . Массовое содержание эрбия определялось методом рентгеновского флуоресцентного анализа, эффективность загрузки ионов эрбия (III) составила 5,6% и 4,8% для образцов 2 и 3, соответственно.

Дополнительно водные суспензии были исследованы методом малоуглового рентгеновского рассеяния с использованием источника синхротронного излучения. Анализ кривых продемонстрировал радиус инерции 31 нм для образца 1 и 34 нм для образцов 2 и 3. Максимальный размер D_{\max} составил для всех трех образцов 110 нм. Величина коэффициента наклона начальных участков для кривых в двойных логарифмических координатах составила порядка 4 для всех образцов, что соответствует рассеянию от поверхностного фрактала – компактного объекта, что указывает на наличие индивидуальных сферических частиц. Для определения детальных структурных параметров наночастиц ПЛГА, загруженных ионами эрбия (III), было выполнено моделирование в программе SASfit.

1. R. Formento-Cavaier, U. Köster, et al., Nucl. Instrum. Methods in Phys. Res. B. 463, 468-471 (2020).

ВЛИЯНИЕ ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ НА ТЕПЛОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

А.И. Иванова, О.В. Малышкина, К.А. Мариничева, И.А. Каплунов

ФГБОУ Тверской государственный университет

Исследование процессов, происходящих в полупроводниковых кристаллах в результате воздействия ионизирующего излучения, имеет большое научное и прикладное значение. Проведенные многочисленные исследования подтверждают, что в отличие от больших доз при облучении малыми дозами гамма-квантов полупроводниковых материалов приводит к увеличению времени жизни и подвижности зарядов, а также к упорядочению структуры кристаллов [1].

В настоящей работе представлены результаты исследования тепловых характеристик монокристаллов кремния, подвергнутых ионизирующему излучению гамма-квантов (доза обработки 25000 Р). Известно, что кристаллы кремния являются ключевыми материалами для ИК-оптики, оптоэлектроники и гамма-спектрометров. В работе определены коэффициент тепловой диффузии α (температуропроводности) и коэффициент теплопроводности k пироэлектрическим методом прямоугольной тепловой волны (thermal square wave method (TSWM)). Теория метода подробно описаны авторами в [2]. Теплопроводность кристалла является наиболее чувствительным параметром к изменениям структуры, наличию дефектов. Облучение кристаллов кремния γ -квантами приводит к образованию радиационных дефектов, (точечных дефектов и их комплексов с примесными атомами), которые в свою очередь вызывают уменьшение теплопроводности и температуропроводности, что подтверждается полученными результатами (см. табл.).

Таблица. Тепловые характеристики образцов

Образец	Ориентация	Тип проводимости	исх.	после γ	исх.	после γ
			k , Вт·м/град	k , Вт·м/град	α , 10^{-6} м ² /с	α , 10^{-6} м ² /с
Si	(111)	n	55	42	4,8	4,0

Исследования выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

1. И.П. Чернов, А.П. Мамонтов, Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2000, 303, 1, 74 (2000).
2. О.В. Малышкина, О.Н. Калугина, М.Ю. Гаваян, И.А. Каплунов Физика твердого тела, 57,11, 2102 (2015).

ФОРМУЛЫ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ПО ТОЛЩИНЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

А.И. Ильин¹, В.К. Егоров¹, А.А. Иванов²

¹ *ИПТМ РАН, Черноголовка*

² *НИЯУ МИФИ, Москва*

Пленки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ толщиной 150–320 нм, полученные методом импульсного лазерного осаждения с разной скоростью из одной мишени состава $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$ на подложки $\text{SrTiO}_3(100)$ с использованием и без использования скоростной фильтрации эрозионного факела, имели разные характеристики структуры и ВТСП свойств. После осаждения со скоростью ~0.5 нм/с пленки имели $T(R=0) = 85 - 87$ К со значениями кислородного индекса ~6.85. Для пленок, осажденных со скоростью менее 0.1 нм/с в течение 30–60 мин, $T(R=0)$ была ≈ 77 К. Методами СЭМ и АСМ на поверхности пленок выявлены ограниченные пирамиды, а пленки толщиной 320 нм также имели ямки на поверхности. Ограниченные спиральные пирамиды с увеличением времени осаждения эволюционировали в крупные вытянутые частицы, вероятно, по механизму Оствальда. Применение методов РФА позволило выявить вариации содержания как атомов Y, Ba и Cu, так и атомов примесных элементов по толщине пленок. Полученные спектры RBS ионов He^+ и H^+ дали возможность рассчитать элементный состав фазы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ по глубине пленки. Введение атомов гелия в формулы состава фазы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ пленки позволило учесть в расчетах рассеяние ионов He^+ на вакансиях и пустотах кристаллической структуры, что дало совпадение элементного состава формул с результатами РФА и значениями толщин пленок, полученных стилусным профилометром. Для пленок с однородной структурой формулы состава не зависели от средней высоты пирамид на поверхности. Знание рельефа поверхности и профиля химического состава по глубине позволяет оптимизировать технологии осаждения пленок YBCO в целях получения наноразмерных структур для создания приборов электроники и фундаментальных исследований в этой области.

УЧЕТ ФОНА В НЕЙТРОННОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ С 2D ПОЗИЦИОННОЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ ДЕТЕКТОРОМ

Н.Н. Исакова^{1}, А.И. Калюканов¹, И.П. Макарова², В.Т. Эм¹*

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

*² Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

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 этом 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. Разработанная методика учета фона 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. 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 $\text{Cs}_4(\text{HSO}_4)_3(\text{H}_2\text{PO}_4)$. Эти монокристаллы являются представителями семейства суперпротоников $\text{MmHn}(\text{AO}_4)_{(m+n)/2} \cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}, \text{NH}_4$; $\text{AO}_4 = \text{SO}_4, \text{SeO}_4, \text{HPO}_4, \text{HAsO}_4$) [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].

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)

ВОЗМОЖНОСТИ СИНХРОТРОННЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ МАКРОМАСШТАБА ДО КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ

*И.А. Каменских², А.Н. Васильев¹, М.В. Коржик³, Е.Д. Рубцова²,
И.Н. Шпиньков²*

¹*НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

²*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

³*НИИ ядерных проблем Белорусского государственного университета, Минск*

Применение синхротронного излучения в исследовании люминесцирующих материалов с 70-х годов прошлого века существенно обогатило арсенал люминесцентной спектроскопии. Исследования с высокоэнергетическим возбуждением позволили определить структуру возбужденных областей кристалла, что явилось важной предпосылкой перехода к новым материалам с композиционным разупорядочением, керамическим материалам, гибридным органо-неорганическим материалам, композитным материалам, включающим нанобъекты. Перспективы их использования рассмотрены в докладе.

ВЛИЯНИЕ БУФЕРНОЙ Si-ВСТАВКИ НА СТРУКТУРУ МНОГОСЛОЙНЫХ ЗЕРКАЛ Ti/Ni РАЗНОЙ КОНФИГУРАЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ И СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

*Я.Д. Кардеев¹, А.Ю. Серегин¹, Ю.А. Волковский¹, П.А. Просеков¹,
В.Н. Полковников², Р.М. Смертин², Ю.В. Писаревский¹, А.Е. Благов¹*

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород

Многослойные зеркала на основе Ti/Ni находят применение как в рентгеновской оптике в источниках синхротронного излучения (СИ), так и в нейтронографии в качестве отражающих элементов [1]. Важным фактором, влияющим на эффективность применения таких систем как зеркал, является качество межслоевых границ. Одним из способов-улучшения отражательной способности систем Ti/Ni является включение в структуру периода буферных Si-вставок [2].

В представленной работе проведено исследование влияние Si-вставок на качество межслоевых границ в периодических системах Ti/Ni. Методом рентгеновской рефлектометрии и стоячих рентгеновских волн исследовались четыре типа многослойных пленок на основе 40 периодов: Ti/Ni, Ti/Si/Ni, Ti/Ni/Si и Ti/Si/Ni/Si. Измерения проводились на лабораторном дифрактометре SmartLab Rigaku и на станции РКФМ синхротронного источника КИСИ-Курчатов. Полученные профили распределения электронной плотности и распределения атомов Ti и Ni по глубине позволили количественно оценить толщины переходных слоев.

Установлено, что Ti/Ni без вставок имеет наибольшие переходные слои и быстрое затухание пиков. Вставки Si внутри периода (Ti/Si/Ni) или между периодами (Ti/Ni/Si) вызывают асимметрию профилей электронной плотности и распределения элементов. Оптимальной является структура Ti/Si/Ni/Si с минимальными переходными слоями и максимальной интенсивностью первого дифракционного пика, что свидетельствует о её перспективности для рентгеновской оптики, что особенно важно в связи с реализацией проекта источника СИ 4-го поколения с лазером на свободных электронах «СИЛА» [3].

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части проведения экспериментов. Синтез многослойных зеркал проведен при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-72-30029-П).

1. C. Schanzer, M. Schneider, P. Böni // J. Phys. Conf. Ser. 746 (2016).
2. R. Smertin, E. Antyushin, I. Malyshev et. al. // J. Appl. Cryst. 57, 5 (2024).
3. М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. // Кристаллография. 67, 5 (2022).

ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТАЛЬНЫХ ПЛАСТИНАХ ПОСЛЕ ДРОБЕУДАРНОЙ ОБРАБОТКИ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

И.Д. Карпов^{1,3}, В.Т. Эм^{1,3}, Е.П. Николаева², И.В. Сергеичев³, Б.С. Волосков³

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

² *Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск*

³ *Сколковский институт науки и технологий, Центр технологий материалов, Москва*

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.

РОЛЬ МЕТОДОЛОГИИ В ОПРЕДЕЛЕНИИ МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ДОПАНТОВ В КРУПНОМАСШТАБНЫХ КРИСТАЛЛАХ α -NiSO₄·6H₂O:Co

И.А. Каурова², Л.А. Арбанас^{1,2}, В.Н. Хрусталёв¹, В.А. Лазаренко³,
Г.М. Кузьмичёва²

¹ Российский Университет Дружбы Народов имени Патриса Лумумбы

² МИРЭА-Российский технологический университет

³ НИЦ «Курчатовский институт»

Допирование кристаллов – эффективный способ для направленной реализации новых свойств или модификации уже известных. Ключевая задача в этом процессе – контроль конечной концентрации допантов, которая практически всегда отличается от исходной в расплаве/растворе из-за *физико-химических* (отсутствие конгруэнтного плавления, неоднородность состава по объёму/секторам роста), *ростовых* (блочная структура, дефекты и особенности роста) и *методических* (число отражений; размер объекта) причин.

Цель работы – определение содержания ионов-допантов Co в выращенных из водных растворов ограненных кристаллах α -NiSO₄·6H₂O:Co (α -[Ni,Co]SH) и их распределение по образцу. Объекты исследования: макро- ($\sim 0.24 \times 0.24 \times 0.24$ мм³) и микрочасти ($\sim 0.15 \times 0.10 \times 0.03$ мм³) из секторов роста (101), (102), (001) α -[Ni,Co]SH с ионами Co²⁺ в растворе 0.36, 0.68, 1.0 вес.%. Съёмка образцов (100K) выполнена на лабораторном дифрактометре (*D*) (D8 QUEST PHOTON-III) и синхротроне (*S*) (станция Белок-РСА, КИСИ «Курчатов»).

При уточнении заселенности позиций Ni (программа *Shelxl*) в α -[Ni,Co]SH получены составы (*D*: $N \sim 1520$, $R_1/wR_2 \sim 0.015/0.040$; *S*: $N \sim 1100$, $R_1/wR_2 \sim 0.076/0.22$ (**101**), (**102**), $\sim 0.036/0.092$ (**001**)):

0.36 вес.%Co

D: [Ni_{0.910(3)}Co_{0.090}]SH (**101**) < [Ni_{0.939(3)}Co_{0.061}]SH (**102**) > [Ni_{0.893(3)}Co_{0.107}]SH (**001**).

0.68 вес.%Co

D: [Ni_{0.871(3)}Co_{0.129}]SH (**101**) < [Ni_{0.882(3)}Co_{0.118}]SH (**102**) < [Ni_{0.902(3)}Co_{0.098}]SH (**001**).

1.0 вес.%Co

D: [Ni_{0.868(3)}Co_{0.132}]SH (**101**) > [Ni_{0.846(4)}Co_{0.154}]SH (**102**) < [Ni_{0.936(3)}Co_{0.064}]SH (**001**).

S: [Ni_{0.985(4)}Co_{0.015}]SH (**101**) \approx [Ni_{0.984(4)}Co_{0.016}]SH (**102**) < [Ni_{0.989(4)}Co_{0.011}]SH (**001**).

Установлено уменьшение содержания Co в кристалле α -[Ni,Co]SH с увеличением его концентрации в растворе для сектора (001) и *vice versa* для секторов (101) и (102) (*физико-химические причины*), различное распределение Co по секторам роста с увеличением его содержания в растворе/кристалле (*ростовые причины*), разный состав по данным *D* и *S* (*методические причины*). Все это необходимо учитывать при интерпретации и сравнении экспериментальных результатов при определении реальных составов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Проект № FFSZ-2024-0003).

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ КСЕНОНА, ОБРАЗОВАННЫХ В КРЕМНИИ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПУЧКАМИ С ЭНЕРГИЯМИ 5 и 8 кэВ

Г.С. Киреев¹, О.В. Подорожний¹, А.В. Румянцев¹, А.Е. Иешкин²,
Д.К. Миннебаев², Н.И. Боргардт¹

¹ Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

² МГУ им. М.В. Ломоносова

Системы с фокусированным ионным пучком ксенона находят все большее применение в микроэлектронике благодаря высокой скорости распыления материала. После облучения подложки ксенон включается в нее в виде кластеров, изучение которых представляет большой практический интерес.

В работе подложка Si(001) облучалась пучками Xe^+ с энергиями 5 и 8 кэВ. Из нее были приготовлены тонкие фольги планарного сечения методом *in situ* lift-out на приборе FEI Helios NanoLab 650. Изображения кластеров и карты рентгеновского микроанализа были получены на приборе FEI Titan Themis 200 в режиме просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ).

На рис. 1а, б слева представлены ПРЭМ-микрофотографии, на которых кластеры имеют вид светлых областей, а справа – карты распределения атомов Хе, на которых видны скопления ксенона. Для выделения границ кластеров на изображениях (красные линии) проводилась их цифровая обработка с помощью разработанной программы, основанной на методе морфологических водоразделов. Анализ микрофотографий позволил выявить 1027 и 572 кластеров для случаев облучения ионами с энергиями 5 и 8 кэВ и построить гистограммы их распределений по размерам (рис. 1в, г). Распределения асимметричные с правыми хвостами, причем при энергиях 8 кэВ хвост более длинный благодаря наличию крупных кластеров с размерами до 6 нм, отсутствующих при энергиях 5 кэВ.

Значения модальных размеров d' , вычисленные исходя из предположения о логарифмически нормальном законе распределения по размерам (непрерывные зеленые линии на рис. 1в, г), а также средние размеры \bar{d} и средние квадратические отклонения σ свидетельствуют о том, что при энергиях 8 кэВ кластеры в среднем крупнее, и их размеры варьируются в большем диапазоне значений.

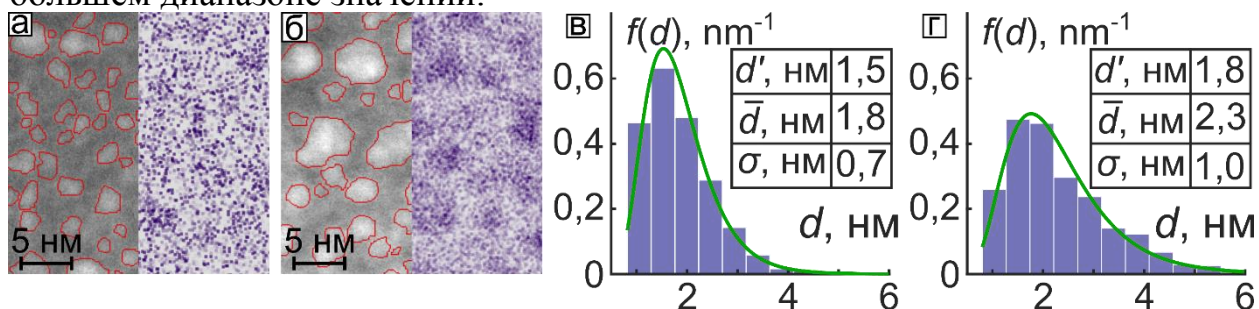


Рис. 1. ПРЭМ-микрофотографии кластеров Хе и карты распределения атомов Хе (а, б), гистограммы распределения кластеров по размерам (в, г). (а, в) – 5 кэВ, (б, г) – 8 кэВ

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДНОЙ ФАЗЫ ШЕВРЕЛЯ $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$

Г.Д. Комаров, А.М. Ионов, С.Г. Протасова, Р.Н. Можчиль, О.Г. Рыбченко

ИФТТ РАН, Московская область, Черноголовка

Тройные халькогениды молибдена - фазы Шевреля $\text{M}_x\text{Mo}_6\text{X}_8$ интересны уникальными физико-химическими свойствами (сверхпроводимость, каталитическая активность и др.[1]) Исследование электронной структуры фазы Шевреля $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ представляет интерес для понимания физико-химических свойств этих соединений. Образцы $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$, полученные методом ампульного синтеза, обладали кристаллической структурой $hR42$ и критической температурой сверхпроводящего перехода 14 К.

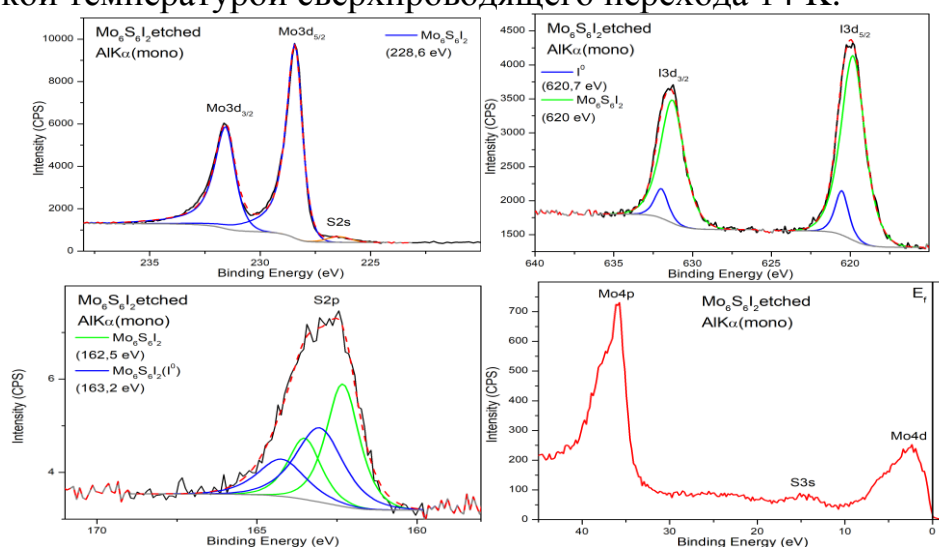


Рис. 1. РФЭС спектры фазы $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$, основных уровней и валентной зоны

Исследование электронной структуры проводилось методом РФЭС ($\text{AlK}\alpha(\text{mono})$ $h\nu = 1486,69$ эВ). В спектре наблюдаются характерные линии основных уровней $\text{Mo}3d_{5/2}$ (228,6 эВ), $\text{S}2p_{3/2}$ (163 эВ), $\text{I}3d_{5/2}$ (620 эВ) с присутствием интеркалированного йода. Спектр $\text{Mo}3d$ (рис.1) для $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ типичен для всех фаз Шевреля [2]. Уширенные, неразрешаемые $\text{S}2p$ состояния (162,5эВ и 163,2 эВ) можно объяснить изменением электронной плотности вследствие присутствия интеркалированного йода в структуре.

Валентная зона $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ образована $\text{Mo}4d$ состояниями вблизи уровня Ферми с максимумом в интервале 2-5 эВ и $\text{S}3s$ состояниями около 14 эВ. При прогреве образца $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ in situ в камере электронного спектрометра (до 500°C, 10^{-8} Торр) не происходило заметных изменений в структуре основных линий, отмечено удаление интеркалированного йода.

1. Peña, O. Chevrel phases: Past, present and future / O. Peña // Physica C: Superconductivity and its Applications. – 2015. – Vol. 514. – P. 95-112.
2. Electronic structure of the Chevrel-phase compounds $\text{Sn}_x\text{Mo}_6\text{Se}_{7.5}$: Photoemission spectroscopy and band-structure calculations / K. Kobayashi, A. Fujimori, T. Ohtani [et al.] // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 2001. – Vol. 63, No. 19. – P. 1951091-1951097.

ЭЛЕКТРОННАЯ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА 2D ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДА NbSe_2I_2

*Г.Д. Комаров, А.М. Ионов, С.Г. Протасова, Р.Н. Можиль, А.Н. Кузьмин,
А.Р. Пальниченко, О.Г. Рыбченко*

ИФТТ РАН, Московская область, Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д.2

Низкоразмерный халькогенид ниобия NbSe_2I_2 является перспективным соединением, представляющим интерес для применения в области полупроводниковой и ван-дер-ваальсовой электроники. Монокристаллы NbSe_2I_2 выращивались газотранспортным методом [1], с исходными материалами: Nb (чистота 99,8%), Se (полупроводниковая чистота) и I_2 в соотношении 1,40 г-ат Nb, 2,37 г-ат Se и 4,94 г-ат I. После вакуумирования ($P = 0,1$ Торр) и запайки ампулы помещались в температурный градиент 420-460°C. Через 120 ч. в низкотемпературной зоне вырастали серые металлоподобные пластинчатые кристаллы. Рентгеноструктурный анализ показал присутствие монокристаллов триклинной ($P\bar{1}$) и моноклинной фаз NbSe_2I_2 , легко расщепляемых при эксфолиации. Анализ электронной структуры NbSe_2I_2 методом РФЭС подтвердил полупроводниковый характер соединения, сверхпроводимости до 4.2K не обнаружено. После отжига в динамическом вакууме (0,1 мм рт.ст.) при температурах 200 и 300°C в течение 2-х часов сверхпроводимости также не обнаружено, однако отжиг образцов при 400°C (2ч) привел к сверхпроводимости при 7K. При деинтеркаляции йода происходит перестройка кристаллической структуры, формируются кристаллиты типа флейков (планарные с составом близким к NbSe_2) и столбчатые квазиодномерные кристаллы состава $\text{Nb}_3\text{Se}_{12}\text{I}$.

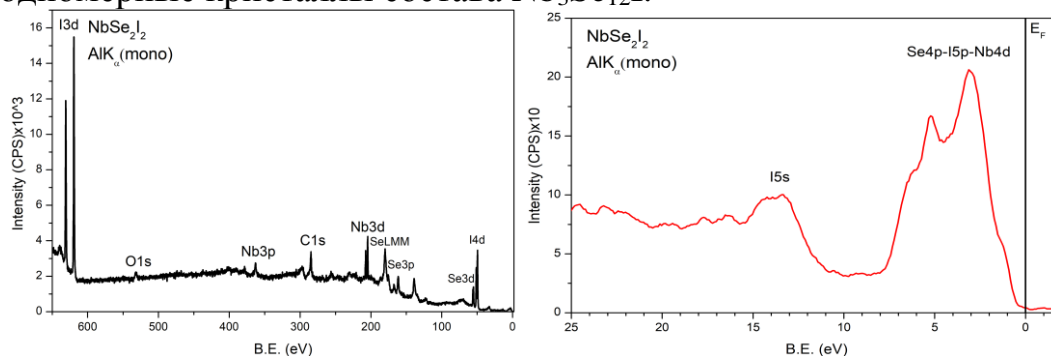


Рис.1 Обзорный РФЭС спектр и спектр валентной зоны NbSe_2I_2

Необычное поведение монокристаллов при отжиге и деинтеркаляции йода и селена представляет интерес для изучения перестройки кристаллических структур в халькогалогенидах ниобия. Следует также отметить, что при эксфолиации угол в плоскости $\gamma = 61,3^\circ$ делает NbSe_2I_2 перспективным объектом для формирования гексагональных ван-дер-ваальсовых гетерорешеток (путем введения деформации) и потенциального изменения их электронных свойств при создании муаровых сверхрешеток.

1. Exfoliable Transition Metal Chalcogenide Semiconductor NbSe_2I_2 / K. Qu, Yu. Zhang, Ch. Peng [et al.] // Inorganic Chemistry. – 2024. – Vol. 63, No. – P. 1119-1126.

ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА ТРЕХМЕРНОГО ПОЛЯ ОНДУЛЯТОРА НА ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ

Н.С. Клочков^{1*}, Н.В. Смоляков¹

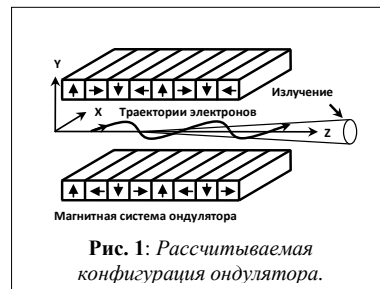
¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

knikse@ya.ru

Для генерации электромагнитного излучения в накопительных кольцах электронов самое широкое применение нашли ондуляторы на постоянных магнитах. Существует ряд компьютерных программ для расчетов магнитного поля в таких ондуляторах. Но эти программы, будучи универсальными, достаточно сложны, и их применение требует некоторой подготовки. Однако наиболее востребованный случай – это расчет плоского ондулятора на постоянных магнитах со стандартной схемой, предложенной более 40 лет назад в работах [1, 2]. Нами была написана компьютерная программа для такой наиболее часто встречающейся структуры ондулятора, рис. 1. При заданной геометрии ондулятора программа рассчитывает распределения его магнитного поля в зазоре между полюсами. Алгоритмы программы основаны на точных аналитических формулах, описывающих магнитное поле прямоугольного параллелепипеда [3]. Такой подход позволил резко повысить скорость расчета поля, достигая при этом высокой точности расчета (в рамках выбранной модели).

Входные параметры для расчета поля задаются посредством текстового файла. На выходе генерируется файл с картой магнитного поля ондулятора, а также рисуется график поля.

Эта программа будет очень полезна при конструировании ондуляторов для установки «СИЛА».



1. K. Halbach, Nuclear Instruments and Methods 169 (1980) p. 1-10.
2. K. Halbach, Nuclear Instruments and Methods 187 (1981) p. 109-117.
3. Вагин Д.В. и др. Вестник Московского университета, Серия 3. 2008, №6. С. 53-55.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МИКРОСКОПИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ (РЭМ, АСМ) В ИССЛЕДОВАНИЯХ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ГОРНЫХ ПОРОД ПРИ ДИНАМИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

А.Н. Кочанов¹, И.Ж. Бунин¹

¹Институт проблем комплексного освоения недр им. академика Н.В. Мельникова РАН

Экспериментальное изучение механизмов образования и развития трещин в геоматериалах (минералах, горных породах и рудах), является фундаментальной научной проблемой и является ключевым элементом геомеханики, физической мезомеханики и физики прочности. В рамках данной проблематики с использованием методов растровой электронной (РЭМ, микроскопы JEOL JSM-5910LV, JSM-6610LV) и атомно-силовой (АСМ, СММ-2000) микроскопии получены изображения поверхности разрушения горных пород с различными структурно-текстурным строением, составом и механическими свойствами, а также проанализированы отдельные фрагменты трещин, образовавшихся в образцах под действием интенсивной внешней нагрузки (рис.1). В результате проведенных исследований выявлены особенности микрорельефа и получены следующие оценки шероховатости (R_a) и фрактальной размерности (D_f) поверхности кварцита (твердость по шкале Мооса, $H=7$), гранита ($H=5-7$) и доломита (3.5–4): $R_a=115$ ($D_f=2.023$), 141 (2.015), 250 (2.05) соответственно. Установлено, что геометрические характеристики морфологических особенностей поверхности образцов на микроуровне связаны с параметрами зеренной структуры исследованных горных пород. Микрорельеф поверхности гранита (рис.1а) заметно более выражен по сравнению с образцом кварцита (рис.1б). Сложный характер поверхности разрушения (рис.1в) и особенности траекторий распространения трещин (прерывистость, волнистость, неровность берегов) свидетельствуют об их нестационарном (динамическом), скачкообразном росте с остановками на препятствиях и преодолением зон локализации микрповреждений, образующихся в вершинах трещин.

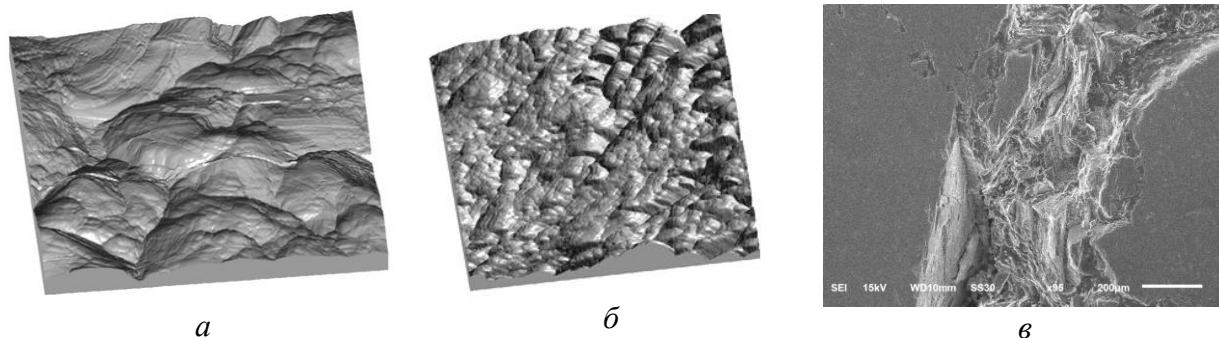


Рис.1. АСМ изображения размером 8×8 мкм поверхности и гранита (а) кварцита (б); фрагмент траектории трещины в граните, образовавшейся в результате взрывного воздействия (РЭМ, масштабная линейка 200 мкм) (в)

ПОЛИМОРФИЗМ ТОНКИХ ПЛЕНОК CDTE НА РАЗЛИЧНЫХ ПОДЛОЖКАХ

И.О. Кошелев, И.С. Волчков, П.В. Резникова, П.Л. Подкур, В.М. Каневский

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Теллурид кадмия (CdTe) относится к полупроводниковым соединениям и выделяется среди аналогов. CdTe имеет оптимальную ширину запрещенной зоны $E_g = 1,5$ эВ при $T = 300$ К, в связи с чем он может проявлять теоретическую эффективность фотоэлектропреобразования до ~32% при напряжении холостого хода более 1 В и плотности тока короткого замыкания более 30 мА/см².

Одним из применений тонких пленок на основе CdTe является детектирование рентгеновского излучения. Для данного применения можно использовать элементы на основе наноструктур. Примерами таких форм CdTe являются поликристаллические и эпитаксиальные пленки, выращенные на различных кристаллических подложках (Si, GaAs, Al₂O₃ и др.), а также подложках с проводящими слоями (FTO, ITO).

Тонкие пленки CdTe выращивали методом высоковакуумного термического распыления на подложках Si (111), Al₂O₃ (0001), силикатного стекла и FTO- и ITO-стекла. Используемые подложки Si, Al₂O₃, FTO- и ITO-стекла нагревались до ~310 °С. В аморфного силикатного стекла, использовался нагрев подложек до ~310 °С и до ~500 °С. Температура источника составляла 700°С. Время осаждения составляло 60 минут.

Полученные образцы тонких пленок CdTe исследовались методами энерго-дисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС), атомно-силовой микроскопии (АСМ), рентгенофазового анализа (РФА) и рамановской спектроскопии.

Используемыми методами произведена характеристика различий структур полученных. Определено, что при идентичных условиях на подложках из различных материалов возможно получение как вюрцитной, так и сфалеритной модификаций CdTe. Кроме того, контроль температуры позволяет получать высокоориентированные тонкие пленки с низким содержанием дефектов роста, таких как преципитаты по Те.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

СТРОЕНИЕ КОМПЛЕКСОВ НЕПТУНИЯ В ВОДНЫХ И ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРАХ ИЗ ДАННЫХ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

А.Д. Крот¹, Д.Н. Новичков¹, А.Л. Тригуб^{1,2}, П.И. Матвеев¹

¹ *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*

² *НИИЦ «Курчатовский институт»*

Нептуний является долгоживущим альфа-излучающим радионуклидом, который образуется в атомном реакторе и составляет значительную долю дозовой нагрузки высокоактивных отходов (ВАО). Для минимизации рисков для окружающей среды от захоронения ВАО, разрабатываются стратегии по выделению минорных актинидов (нептуний, америций и кюрий) из растворов ВАО с целью их последующей трансмутацией. Однако, легкость ОВР превращений нептуния и способность формировать устойчивые в условиях переработки ВАО соединения в трех степенях окисления IV, V, VI, а также в виде смешанновалентных форм, существенно осложняют контроль за его распределением в двухфазных системах.

Целью данной работы являлось установление строения комплексов и путей окислительно-восстановительных превращений нептуния в степенях окисления IV-VI в водных и органических растворах, релевантных условиям экстракционной переработки ВАО. Методом спектроскопии рентгеновского поглощения исследованы растворы комплексов нептуния (IV, V, VI) в азотной и хлорной кислотах, ацетонитриле, а также в экстракционных системах при выделении нептуния в исходных степенях окисления IV, V, VI из азотнокислых растворов диамидом 2,2'-бипиридин-2,9-дикарбоновой кислоты (**L**). Установлено, что нептуний(IV) не претерпевает ОВР-превращений в процессе экстракции и образует в органической фазе комплекс состава $[\text{LNp}^{\text{IV}}(\text{NO}_3)_4]$. Нептуний(V) не устойчив в органических растворах в присутствии азотной кислоты и окисляется как в экстракционных системах, так и в модельном органическом растворе комплекса в ацетонитриле. Строение комплекса в органической фазе по данным EXAFS спектроскопии наилучшим образом описывается формулой $[\text{LNp}^{\text{VI}}\text{O}_2(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$. При экстракции из исходного раствора нептуния(VI), валентная форма в органическом растворе сохраняется, однако, строение комплекса отлично от полученного при экстракции из раствора нептуния(V), а представляет собой ионные пары $[\text{LNp}^{\text{VI}}\text{O}_2(\text{NO}_3)]\text{Np}^{\text{VI}}\text{O}_2(\text{NO}_3)_3$ или $[\text{LNp}^{\text{VI}}\text{O}_2(\text{NO}_3)]_2\text{Np}^{\text{VI}}\text{O}_2(\text{NO}_3)_4$. Полученные результаты позволяют сформировать представление о механизмах экстракции нептуния в исходных степенях окисления IV-VI, а также демонстрируют новый подход к установлению строения комплексов актинидов в экстракционных системах с использованием синхротронного излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №23-73-30006.

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТНОГО ОКСИДА ПРИ ДИФФУЗИИ ЦИНКА В ПОДЛОЖКУ GaSb

М.В. Кузьмин¹, С.В. Сорокина¹, В.П. Хвостиков¹

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

Методом фотоэлектронной спектроскопии высокого разрешения с использованием синхротронного излучения исследованы структура и фазовый состав поверхности GaSb после формирования *p-n*-перехода диффузией Zn из газовой фазы. Показано, что количественное содержание цинка в образцах определяется свойствами слоя оксида на поверхности кристалла. В случае предварительного анодного окисления подложек [1,2] концентрация продиффундировавших атомов Zn увеличивается более чем в два раза по сравнению с образцами, покрытыми естественным окислом. Установлено, что эти атомы в основном находятся в связанном с кислородом состоянии. Также образование связей Zn-O приводит к существенному уменьшению концентрации сурьмы в приповерхностной области. В то же время удаление атомов галлия из образцов не происходит. В конечном счете, описанная модификация подложек GaSb путем *а)* выбора поверхностного слоя оксида и *б)* контролируемого внедрения атомов цинка приводит к уменьшению плотности состояний в запрещенной зоне, что способствует улучшению производительности полупроводниковых приборов и открывает пути дальнейшего совершенствования технологий.

1. H. Hasegawa, H.L. Hartnagel. J. Electrochem. Soc., 123 (5), 713 (1976). DOI: 10.1149/1.2132915.
2. O.V. Sulima, A.W. Bett, J. Wagner. Anodic oxidation of GaSb in acid-glycol-water electrolytes. Journal of The Electrochemical Society, 147 (5) 1910 (2000). DOI:10.1149/1.1393456.

СЛОИСТЫЕ ФОСФАТЫ КАЛЬЦИЯ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ БИОАКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ

Е.В. Кукуева¹, А.А. Тихонов², В.И. Путляев²

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

² *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*

Для восстановления функции костных тканей используют различные материалы. Костная ткань представляет собой композит на основе гидроксиапатита кальция $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (ГА) и белка коллагена с многоуровневой структурной организацией компонентов. Одним из перспективных материалов традиционно считается керамика на основе ГА, однако такой материал будет иметь низкую скорость резорбции в тканях организма и слабо способствует росту новой ткани. Поэтому одним из вариантов получения биорезорбируемых материалов является использование смесей более растворимых фосфатов кальция, например, трикальцийфосфата $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (ТКФ) и пирофосфата кальция $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (ПФК), ГА и ТКФ.

Основной трудностью при получении подобных бифазных материалов является получение мелкокристаллических порошков необходимого состава, которые будут затем использоваться при получении биокерамики. В настоящей работе был выбран метод получения двухфазной биокерамики, используя единый, специально подготовленный прекурсор. В качестве такого прекурсора был выбран октакальциевый фосфат $\text{Ca}_8(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (ОКФ), и его замещенная формы, в которой одна из HPO_4 -групп замещена на остаток дикарбоновой кислоты. Вариирование состава бифазных смесей позволило изменять свойства биокерамики на их основе.

При термической обработке октакальциевых фосфатов исходная морфология их кристаллов, которые представляют собой пластинчатые частицы, сохраняется. Это отражается на микроструктуре получаемой керамики, которая демонстрирует лучшее уплотнение, отличается меньшей пористостью и более однородным распределением компонентов по сравнению с керамикой, получаемой из механической смеси соответствующих фосфатов.

DEERFIT: ФИЗИЧЕСКИ И ХИМИЧЕСКИ ОБУСЛОВЛЕННЫЙ АНАЛИЗ XAS-СПЕКТРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ

*К.Д. Кулаев¹, Б.О. Проценко¹, М.С. Лифарь¹, Г.О. Асатуров¹,
Д.И. Куприяненко¹, Н.С. Чубков¹, Г.Д. Кочиев¹, А.А. Гуда¹, С.А. Гуда^{1,2},
М.А. Солдатов¹, А.В. Солдатов¹*

¹ *Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов
Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Сладкова, 178/242*

² *Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича
Южного федерального университета, 344090 Ростов-на-Дону, Мильчакова, 8-А*

Мы представляем DeepFit — подход глубокого обучения для физически и химически обусловленного определения атомной структуры по спектрам рентгеновского поглощения (XANES). Метод решает обратную задачу структурного анализа XANES [1], объединяя E(3)-эквивариантную нейронную сеть, обученную на базе tmXAS (67 000 теоретических спектров К-края 3d3d- и 4d4d-металлов), с квантово-химическими ограничениями. Нейросеть предсказывает спектры в форме $k^2\chi(k)$ по атомным координатам, а фреймворк оптимизации на основе аналитических градиентов позволяет проводить уточнение структуры, минимизируя отклонение от экспериментального спектра при сохранении химической релевантности структуры (через учет энергии системы). Валидация на комплексах 3d- (Cu, Co, Zn, Ni) и 4d-металлов (Rh) с известной рентгеноструктурной моделью демонстрирует количественное согласие. ROC-анализ (AUC=0.73) подтверждает способность DeepFit надежно дискриминировать правильные структуры среди химически правдоподобных альтернатив. Сочетание вычислительной эффективности, физической информированности и автоматизации делает DeepFit универсальным методом для количественного XANES-анализа, представляющим значительный шаг к созданию самоуправляемых аналитических систем в материаловедении и катализе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2025-509 от 30.05.2025 г.

1. Martini, A.; Guda, S.A.; Guda, A.A.; Smolentsev, G.; Algasov, A.; Usoltsev, O.; Soldatov, M.A.; Bugaev, A.; Rusalev, Yu.; Lamberti, C.; et al. PyFitit: The Software for Quantitative Analysis of XANES Spectra Using Machine-Learning Algorithms. *Computer Physics Communications* 2020, 250, 107064, doi:10.1016/j.cpc.2019.107064.

ПОРОШКОВАЯ ДИФРАКЦИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СКАНИРУЮЩЕГО 2D-ДЕТЕКТОРА НА СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» СИНХРОТРОНА «КИСИ-КУРЧАТОВ»

Е.С. Куликова, Р.Д. Светогоров

НИЦ «Курчатовский институт»

Рентгеновская порошковая дифрактометрия является основным методом получения атомной и микроструктуры поликристаллических материалов и находит широкое применения для решения задач в различных областях знаний от материаловедения и структурной химии до биологии, геологии и археологии. Станции по порошковой дифракции присутствуют на всех современных синхротронных источниках и являются чрезвычайно востребованными. Современные достижения метода порошковой дифракции на синхротронных источниках излучения обусловлены как характеристиками самого излучения, так и современными возможностями детекторных систем.

Для достижения высокого углового разрешения на рентгенограмме образца стандартного размера (200-300 мкм) при двумерной регистрации дифракционной картины необходимо установить значительное расстояние между образцом и детектором. Однако для большинства двумерных детекторов угловой диапазон оказывается сильно ограниченным, что затрудняет получение точной структурной информации об исследуемых объектах. Для преодоления этого ограничения на станции «Белок/РСА» применен принцип сканирующего двумерного детектора. Этот подход позволяет выполнять измерения как в нормальной геометрии (где детектор располагается перпендикулярно пучку синхротронного излучения), так и в наклонной, что способствует расширению углового диапазона дифракционной картины и улучшению точности определения структурных параметров.

Оптическая схема станции «Белок/РСА» включает в себя монохроматор с сагиттальным изгибом второго кристалла для фокусировки пучка в горизонтальной плоскости для получения максимальных значений интенсивности. Гониометр обеспечивает вращение исследуемого образца (помещаемого в специальную криопетлю или тонкостенный капилляр) вокруг горизонтальной оси ϕ , для обеспечения усреднения дифракционных картин по ориентациям образца.

К основным объектами изучения на станции можно отнести: металлоорганические каркасы (MOF), цеолиты, функциональные многокомпонентные сложные оксиды, сверхпроводящие материалы, катализаторы, композиты, сплавы, наночастицы, объекты культурного наследия.

КЛЕТКИ БАКТЕРИЙ КИШЕЧНОЙ ПАЛОЧКИ *E.coli* КАК ИСТОЧНИК БИОНАНОГИБРИДНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛ БЕЛКА Dps: СИНХРОТРОННЫЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Д.З. Куреши¹, С.Ю. Турищев¹, Е.А. Беликов¹, Е.В. Паринова¹, О.А. Чувенкова¹,
Р.Г. Чумаков², А.М. Лебедев², С.Ю. Требунских¹, Е.В. Преображенская¹,
В. Сиваков³, С.С. Антипов¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

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

³ Институт фотонных технологий, Йена, Германия

Набором высокоточных экспериментальных методов исследования морфологии, структуры, локального атомного и электронного строения изучены клетки бактерий кишечной палочки *E.coli* как источника бионаногибридного материала на основе молекул белка бактериоферритина Dps. Используемые методы включали сканирующую электронную микроскопию (SEM), рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию (XPS) в сочетании с ионным травлением, и с использованием высокоинтенсивного синхротронного излучения рентгеновскую фотоэмиссионную электронную микроскопию (PEEM) и спектроскопию ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES).

Показано что клетки бактерий кишечной палочки в состоянии суперпродукции белка могут выступать, без разрушения, источником бионаногибридного материала на основе молекул белка Dps с наночастицами на основе атомов железа в различном зарядовом состоянии Fe^{3+} и Fe^{2+} . Показана устойчивость клеток *E.coli* к воздействию сверхвысокого вакуума, электромагнитного синхротронного излучения ультрамягкого рентгеновского диапазона и высокого напряжения. Впервые получен спектр XANES от поверхности отдельной клетки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-00413 и поддержано Министерством науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

ТЕКУЩИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СТАНЦИИ «БЕЛОК/РСА» КУРЧАТОВСКОГО ИСТОЧНИКА СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ОБЗОР ЯРКИХ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫЕ В 2024/2025 ГОДАХ

В.А. Лазаренко¹, П.В. Дороватовский¹, Р.Д. Светогоров¹

1 НИИЦ «Курчатовский институт»

Lazarenko_VA@nrcki.ru

Монокристалльная рентгеновская дифракция остается самым широко используемым и востребованным методом для исследования кристаллических веществ различной сложности при решении задач структурной химии и биологии. Использование источника синхротронного излучения для решения задач такого типа дает возможность получать данные высокого качества и разрешения в наикратчайшее время.

Исследования в области структурной химии и биологии являются одним из этапов огромного количества научных разработок в современном мире, в связи с тем, что знание строения вещества помогает подтвердить правильность синтеза, а также дает возможность более качественно выполнять расчеты при изучении свойств вещества и их направленному изменению. Несмотря на ежедневное увеличение потребности в решении задач координационной химии и, соответственно, работы с малыми молекулами, количество синхротронных станций использующих метод монокристаллической дифракции на малых молекулах в мире достаточно невелико, что делает каждую из них уникальным научным инструментом.

Для того чтобы предоставить российским пользователям быстрый доступ к установке, способной проводить эксперименты такого типа и получать данные высокого разрешения и широкого спектра образцов, а также дать иностранным пользователям альтернативу, одна из станций источника синхротронного излучения НИИЦ «Курчатовского института» была оптимизирована под работу с кристаллическими образцами в потоковом режиме, что позволило ей стать не имеющей аналогов на территории России установкой такого уровня. [1]-[2]. На данный момент «Белок/РСА» позволяет исследовать структуры монокристаллов от простых органических соединений (элементарная ячейка с параметрами 5-15 ангстрем) до сложных макромолекулярных комплексов (параметры ячейки 100-200 ангстрем)

Во время доклада будут освещены текущие экспериментальные возможности станции сейчас и после апгрейда магнитной системы курчатовского источника синхротронного излучения, а также показаны яркие результаты, полученные за 2024/2025 года.

1. Lazarenko V.A., Dorovatovskii P.V., Zubavichus Y.V., Burlov A.S., Koshchienko Y.V., Vlasenko V.G., Khrustalev V.N., Crystals. 2017. V. 7. P 325-1-19.

2. Svetogorov R. D., Dorovatovskii P. V., Lazarenko V. A. Belok/XSA diffraction beamline for studying crystalline samples at Kurchatov Synchrotron Radiation Source //Crystal Research and Technology. – 2020. – Т. 55. – №. 5. – С. 1900184.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОГО СОСТАВА ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ ЛЕГИРОВАННЫХ ИТТРИЕМ И ЛАНТАНОМ МЕТОДОМ NEXAFS И ИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОНДЕНСАТОРАХ

Л.Л. Лев¹, А.Г. Черникова¹, А.С. Конашук², Р.Р. Хакимов¹, Р.Г. Чумаков³,
А.М. Лебедев³, Е.О. Филатова², М.Г. Козодаев¹, С.С. Зарубин¹,
Е.В. Коростылев¹, А.М. Маркеев¹, А.В. Зенкевич¹

¹ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Московская область

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Легирование пленок $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ (HZO) редкоземельными металлами в процессе роста тонких пленок методом атомно-слоевого осаждения существенно влияет на их структурные и функциональные свойства. В данной работе мы представляем данные о структурных свойствах легированных иттрием и лантаном поликристаллических пленок HZO, исследованных методом спектроскопии тонкой структуры рентгеновского поглощения (NEXAFS) на станции НАНОФЭС синхротронного источника “КИСИ-Курчатов” [1], с дополнительной характеристикой пленок Y:HZO методами рентгеноструктурного анализа (XRD) и просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ). В отличие от XRD и ПЭМ, анализ NEXAFS вблизи К-края (1s) поглощения кислорода позволяет однозначно различать орторомбическую (o-) и тетрагональную (t-) фазы, а также дает количественную информацию о фазовом составе. Кроме того, спектры поглощения вблизи M_3 -края ($3p_{3/2}$) циркония и К-края (1s) кислорода также предоставляют надежную информацию о наличии моноклинной (m-) фазы, даже в случае сильно текстурированных образцов.

Структурные данные дополнительно коррелируют с электрофизическими свойствами пленок Y:HZO и La:HZO, интегрированных в структуры конденсаторов, которые, как выяснилось, также зависят от концентрации легирующей примеси [2]. Это позволяет предположить, что тонкий баланс различных фаз в легированном HZO (выявленный методом NEXAFS) определяет функциональные свойства устройств. Несмотря на прогресс в количественной оценке фазового состава методом NEXAFS, однозначное прогнозирование электрофизического отклика в легированном HZO остается сложной задачей и требует операндо исследований структурного состава методом NEXAFS в работающих прототипах конденсаторных устройств для прямого наблюдения за явной структурной эволюцией в данном классе материалов при электрическом воздействии.

1. Lebedev A.M., Menshikov K.A. et al. J. Surf. Invest:X-Ray Synchrotron Neutron Tech. V. 15. P. 1039 (2021).

2. M.G. Kozodaev, A.G. Chernikova et al. J. Appl. Phys. V. 125. P. 034101 (2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА СОЕДИНИТЕЛЬНЫХ СЛОЕВ ФУНКЦИОНАЛ-ГРАДИЕНТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ И ВЫСОКОЛЕГИРОВАННОЙ СТАЛИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРОДИФРАКЦИИ НА ИСТОЧНИКЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.О. Лембиков¹, А. А. Белов¹ Е.К. Папынов¹

¹ *Дальневосточный Федеральный Университет*

В работе исследован фазовый состав соединительных слоев функционал-градиент материала на основе карбида кремния (SiC) и высоколегированной стали с применением метода микродифракционного рентгенофазового анализа на экспериментальной станции «Микрофокус» на источнике синхротронного излучения «Сибирь-2» НИЦ «Курчатовский институт». Размер сфокусированного пучка составил 30х30 мкм. Ввиду разницы длины волны между лабораторным прибором и источником синхротронного излучения, все данные были переведены в вектор рассеяния Q.

$$Q = 4\pi \sin\theta/\lambda \quad (1)$$

Соответствующие дифракционные данные (рис. 1) представлены в координатных осях: ось абсцисс “Q-вектор” и ось ординат “Шаг сканирования” — шаг рентгеновского пучка по поверхности образца.

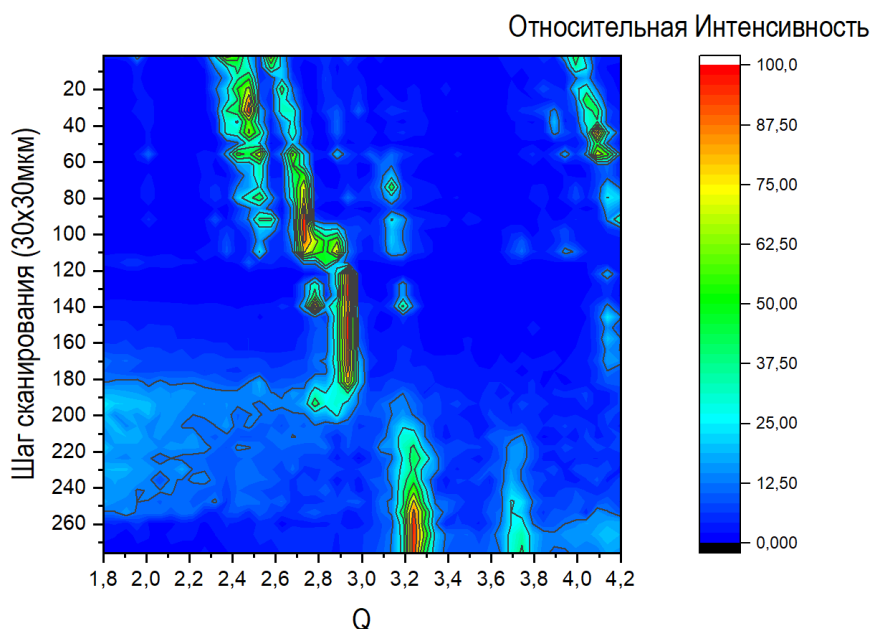


Рисунок 1 – Дифракционная картина для всей поверхности среза.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВОЗМОЖНОСТИ МОДЕРНИЗАЦИИ СПЕКТРОМЕТРА ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ МИФИ

В.С. Литвин^{1,2}, Д.А. Бучный¹, И.В. Мешков²

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва*

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

Спектрометр очень холодных нейтронов (ОХН) предназначен для измерений зависимостей полных сечений взаимодействия ОХН с веществом от энергии нейтронов. Данный метод позволяет определить структуру материала в нанометровом масштабе, аналогично МУРН. На установке было исследовано множество материалов, в т.ч. водородосодержащих [1]. Спектрометрия осуществляется в диапазоне 10^{-8} - 10^{-4} эВ по методу времени пролета на шестиметровой пролетной базе. Выделение ОХН из спектра реактора происходит с помощью механического прерывателя. Транспортировка потока нейтронов производится 8-м вертикальным дважды изогнутым (во взаимоперпендикулярных плоскостях) нейтроноводом из полированной стали.

Впервые проведено Монте-Карло моделирование работы установки с помощью пакета «McStas». Получены спектр и двумерное распределение нейтронов, а также расходимость пучка. Был также рассмотрен способ усиления интенсивности нейтронов с помощью конического концентратора, аналогичного используемым в ИЯИ РАН [2]. Моделирование показало, что использование концентратора позволит повысить интенсивность в 2-9 раз при апертуре 20 мм (рис. 1).

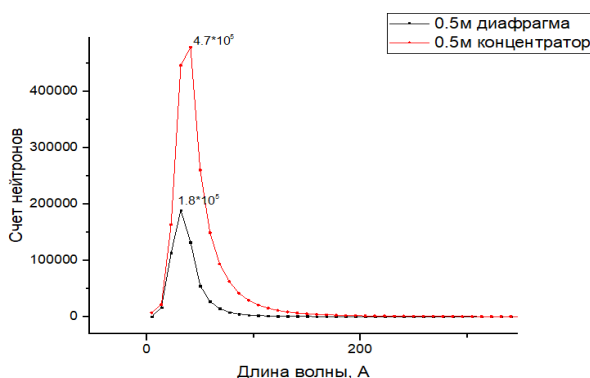


Рис. 1. - Спектры нейтронов на выходе нейтроновода без концентратора (черный) и с концентратором (красный).

1. S.P. Kuznetsov, I.L. Dubnikova, V.S. Litvin, et al., Acta physica Polonica. 5, 727 (2010).
2. А.А. Алексеев, Р.А. Садыков, Е.С. Клементьев, В.С. Литвин, и др., Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования. 3, 5 (2015).

СТРУКТУРА ДЕЙТЕРИДОВ НА ОСНОВЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СО СТРУКТУРОЙ ФАЗЫ ЛАВЕСА C14

С.А. Лушников¹, Т.В. Филиппова¹, С.В. Митрохин¹, С.С. Агафонов²

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

Для развития водородной энергетики являются перспективными интерметаллические соединения (ИМС) и сплавы металлов, которые позволяют безопасно и компактно хранить водород в химически связанном виде в металлгидридах [1]. Не меньший интерес представляет группа высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), которые обладают ценными свойствами для практического применения-высокой жаростойкостью, износостойкостью, коррозионной стойкостью и биосовместимостью с человеческим организмом [2]. Сейчас активно изучают взаимодействие высокоэнтропийных сплавов с водородом, изучают их физико-химические свойства и структуру гидридов на их основе [3, 4]. По строению большинство ВЭСов представляют собой ОЦК-решетку в узлах которой статистически распределены атомы Ti, Zr, V, Mn, Ni, Fe. Высокоэнтропийные сплавы AB₂ гексагональной фазы Лавеса C14 являются двухподрешеточными и содержат в узлах подрешетки А элементы с большим атомным радиусом (Ti, Zr, Hf, Ta), а в подрешетке В элементы с меньшим атомным радиусом (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni). В литературе довольно широко представлены работы по исследованию взаимодействия фазы Лавеса C14 с водородом, однако гидриды на основе высокоэнтропийных сплавов изучены реже. Из-за многокомпонентного состава металлической матрицы таких гидридов можно ожидать изменения их строения. Для этой цели в настоящей работе была изучена структура гидридов на основе многокомпонентных сплавов фазы Лавеса C14 Ti_{0.5}Zr_{0.5}CrFe, Ti_{0.5}Zr_{0.5}V_{0.5}Nb_{0.5}Fe_{0.5}Ni_{0.5}, Ti_{1.0}Cr_{1.1}V_{0.1}Cu_{0.1}Mn_{0.7} и Ti_{0.5}Zr_{0.5}V_{0.5}Cr_{0.5}Fe_{0.5}Ni_{0.5} методом дифракции нейтронов на дифрактометре «ДИСК» в Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт». Для снижения некогерентного рассеяния нейтронов использовали образцы с дейтерием. В структуре определили положение атомов металла и дейтерия, их позиционные параметры и заселенность. Установлено, что атомы дейтерия занимают позиции 24l и 12k₂, и в меньшей степени позиции 6h₁ и 6h₂.

Работа выполнена при поддержке проекта №122012400186-9 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

1. M. Hircher, V.A. Yartys, M. Baricco and al. //J. Alloys. Compd. 827, 153548 (2020)
2. A.A. Rempel, B.R. Gel'chinskii // Izvestiya. Ferrous Metallurgy. 63, 248 (2020)
3. C. Zlotea, M.A. Sow, G. Ek and al.// J. Alloys and Compd. 775, 667 (2019)
4. M. Nyga, G. Ek, D. Karlsson and al. //Int. J. Hydrogen Energy. 44, 29140 (2019)

БЕТА-ЯМР СПЕКТРОМЕТР НА РЕАКТОРЕ НИЯУ МИФИ

Д.В. Львов^{1,2}, Ф.С. Джепаров^{1,2}, А.Н. Тюлюсов^{1,2}, Й. Шмайснер^{1,2}

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

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

Суть метода бета ядерного магнитного резонанса (бета-ЯМР) заключается в циклическом создании в исследуемом образце поляризованных бета-активных ядер-зондов (например, при захвате ядрами образца тепловых поляризованных нейтронов) и измерении временной эволюции поляризации этих ядер путем измерения угловой (0° - 180°)-асимметрии их бета-излучения [1]. Бета-ЯМР спектрометр позволяет проводить неразрушающие исследования вещества и процессов в нем на пространственных масштабах от межатомных расстояний до нескольких нанометров. В частотно-временной области метод чувствителен к процессам, протекающим за времена от 10^{-5} с до 1 с и к магнитным и электрическим сверхтонким взаимодействиям с интенсивностью в интервале от 1 до 10^7 Гц. Этим методом изучали процессы радиационного дефектообразования в литий-, фтор- и серебро-содержащих кристалла, ядерной спиновой динамики и переноса ядерной поляризации в статически неупорядоченных средах [2].

Бета-ЯМР спектрометр работал на реакторе МИФИ в начале 2000-х годов до момента временной остановки реактора. После возобновления работы реактора в 2024 году актуальным становится вопрос о проведении модернизации бета-ЯМР спектрометра.

Для структурных исследований и изучения дефектообразования методом бета-ЯМР очень важно проводить измерения в широком температурном диапазоне и в больших магнитных полях порядка 10 Тл. Соответственно предполагается оснащение бета-ЯМР спектрометра сильным магнитом и криостатом, который должен поддерживать задаваемую температуру T на исследуемом образце в диапазоне $4\text{K} < T < 300\text{K}$ и контролировать её с заданной точностью. Образец будет помещен в низкотемпературный модуль бета-ЯМР спектрометра. Этот модуль должен изготавливаться с учётом физических особенностей методики бета-ЯМР.

1. F.S. Dzheparov, A.D. Gulko, D.V. Lvov, Applied Magnetic Resonance 52, 805 (2021) DOI: 10.1007/s00723-021-01334-1

2. F.S. Dzheparov, A.D. Gulko, et al., International Journal of Modern Physics A Vol. 37, No. 20n21, 2243008 (2022) DOI: 10.1142/s0217751x22430084

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ АГРЕГАТОВ НАНОЧАСТИЦ SiO_2 И ЦЕТИЛТРИМЕТИЛАММОНИЯ БРОМИДА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Н.С. Марченкова¹, А.П. Чистяков¹, К.В. Паламарчук¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Наночастицы (НЧ) кремнезема SiO_2 широко используются в качестве стабилизаторов эмульсий Пикеринга. Однако для данных НЧ характерна высокая гидрофильность, что может препятствовать их самосборке на межфазной границе. Для придания их поверхности гидрофобных свойств можно использовать различные методы модификации, в том числе физическую адсорбцию поверхностно-активных веществ (ПАВ).

В рамках данной работы была проведена модификация НЧ SiO_2 (L.HS-30, $C=0,14$ масс.%) катионным ПАВ цетилтриметиламмония бромидом $\text{C}_{19}\text{H}_{42}\text{BrN}$ (ЦТАБ) ($C=10^{-4}$ – 10^{-2} М) при pH 2. Об адсорбции молекул ПАВ на поверхность НЧ судили по концентрационной зависимости распределения размеров и дзета-потенциала НЧ, определенных методом динамического рассеяния света. Полученные данные были подтверждены методом малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) (станция БИОМУР «КИСИ-Курчатов»).

В результате обработки кривых МУРР с использованием модели сфер с оболочкой было показано, что при добавлении ПАВ в концентрации ниже критической концентрации мицеллообразования (ККМ) (10^{-4} М), система остается неизменной - не происходит адсорбции ПАВ на поверхность НЧ и агрегации. Добавление ПАВ с концентрацией выше ККМ (10^{-2} М) приводит к агрегации НЧ и адсорбции молекул ПАВ на их поверхность. Также были дополнительно охарактеризованы НЧ кремнезема - определен радиус инерции частиц, который составил примерно 8 нм, и их распределение по размерам.

Исследование выполнено за счет средств государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт».

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛУЧЕННЫХ И АДДИТИВНО ОКРАШЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ CaF_2 МЕТОДАМИ РФЭС И КР- СПЕКТРОСКОПИИ

*С.А. Маслова¹, Е.А. Пономарева¹, Ю.М. Ярмошенко¹, Ю.В. Корх¹,
А.Е. Ангервакс², А.И. Рыскин², М.Н. Сарычев³, В.Ю. Иванов³,
Ю.М. Жуков⁴, Т.В. Кузнецова^{1,3}*

¹ ИФМ УрО РАН, Екатеринбург

² УрФУ, Екатеринбург

³ Университет ИТМО, Санкт-Петербург

⁴ СПбГУ, Санкт-Петербург

Монокристаллы CaF_2 являются распространенным материалом в лазерной оптике для получения, обработки и хранения информации [1]. Для расширения оптического диапазона работы и оптимизации свойств кристаллов используются различные методы модификации кристаллической структуры. Облучение ускоренными электронами или аддитивное окрашивание могут быть использованы для формирования дефектов в ионных кристаллах. В данной работе были получены рентгеновские фотоэмиссионные спектры и спектры комбинационного рассеяния (КРС) образцов CaF_2 до и после модификации методами аддитивного окрашивания и облучения ускоренными электронами с различными дозами облучения.

В работе обсуждается изменение электронной структуры под действием облучения ускоренными электронами и аддитивного окрашивания. Электронное облучение может приводить к образованию коллоидных центров подобно аддитивному окрашиванию.

Рамановские спектры чистого CaF_2 демонстрируют характерный пик при 320 см^{-1} . Для окрашенных и облученных кристаллов основной пик становится шире с выраженным плечом при 329 см^{-1} . Кроме того, появляются дополнительные моды при $140, 217, 280$ и 413 см^{-1} , которые могут характеризовать появление соответствующих дефектов в модифицированных кристаллах. Для аддитивно окрашенного образца методом картирования было получено изображение коллоидного центра. Дополнительная линия $\text{Ca } 2p$ на РФЭС спектре подтверждает образование коллоидных центров, состоящих из атомов кальция. Установлено, что облучение массивных монокристаллов CaF_2 электронами с энергией 10 МэВ приводит к образованию дефектов в подрешетке фтора.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант №23-72-00067 <https://rscf.ru/project/23-72-00067/>.

1. Щеулин А.С. и др., Оптика и спектроскопия, 118, 542 (2015).

ГИДРИРОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК ГАДОЛИНИЯ С ФУНКЦИОНАЛЬНЫМ СЛОЕМ ИЗ НИОБИЯ И КАТАЛИТИЧЕСКИМ СЛОЕМ ИЗ ПЛАТИНЫ

*В.В. Матюхов¹, М.В. Макарова¹, Ю.А. Саламатов¹, В.В. Проглядо¹,
Е.А. Толмачёва¹, Е.А. Кравцов¹*

¹Институт физики металлов УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, д. 18, Екатеринбург

Контролируемое насыщение водородом тонких пленок и сверхрешеток на основе редкоземельных металлов является одним из способов управления их структурным и магнитным состоянием.

В данной работе, в качестве альтернативы ранее известным каталитическим слоям, способствующим диссоциации молекул водорода, рассматривается ниобий. Результаты гидрирования тонкой пленки гадолиния с функциональным слоем ниобия сравниваются с результатами гидрирования аналогичной пленки, но с каталитическим слоем из платины.

Гидрирование образца без каталитического слоя из платины проводилось при температурах от 190°C до 430°C. При гидрировании образцов с каталитическим слоем из платины варьировалось давление в диапазоне от 240 Па до 15 кПа. Произошедшие структурные изменения исследовались методами рентгеновской дифракции и рефлектометрии.

В работе представлены результаты гидрирования тонкой пленки гадолиния с каталитическим слоем из ниобия при разных температурах. Было выявлено, что при температуре 240°C происходит проникновение водорода в функциональный слой из ниобия с образованием NbH, а при температуре 255°C образуются гидриды GdH₂ и GdH₃. После полного перехода ниобия в гидрид при температуре 260°C, структурные свойства гадолиния и его гидридов не изменяются.

Для образца с каталитическим слоем из платины было выявлено, что уже в исходном состоянии присутствует дигидрид гадолиния GdH₂. Повышение давления до 295 Па приводит к полному переходу металлического гадолиния в дигидрид. При давлении в 320 Па в пленке помимо дигирида гадолиния образуется тригидрид гадолиния GdH₃. Дальнейшее увеличение давления приводит к полному переходу GdH₂ в GdH₃.

В результате работы были подобраны оптимальные условия гидрирования тонких пленок гадолиния с каталитическим слоем из ниобия или из платины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-12-20024).

КОНЬЮГАТЫ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ AgCu С КВЕРЦЕТИНОМ В КОЛЛАГЕНОВОЙ МАТРИЦЕ: СИНТЕЗ И СТРУКТУРА

Н.С. Мелёхина^{1,2}, А.В. Наумкин¹, А.С. Голубь¹, А.Ю. Васильков¹

¹Институт элементарноорганических соединений им. А.Н. Несмеянова

²Московский физико-технический институт

Разработка биосовместимых раневых покрытий с многофункциональным терапевтическим действием является важным направлением современной регенеративной медицины. Модифицирование биополимерных матриц наночастицами металлов открывает новые возможности для преодоления резистентности патогенных микроорганизмов к традиционным антимикробным средствам [1]. Впервые методом металлопарового синтеза получены биметаллические наночастицы AgCu и модифицированы материалы на основе коллагеновой матрицы (Coll) и кверцетина (Q) в качестве биоактивного компонента.

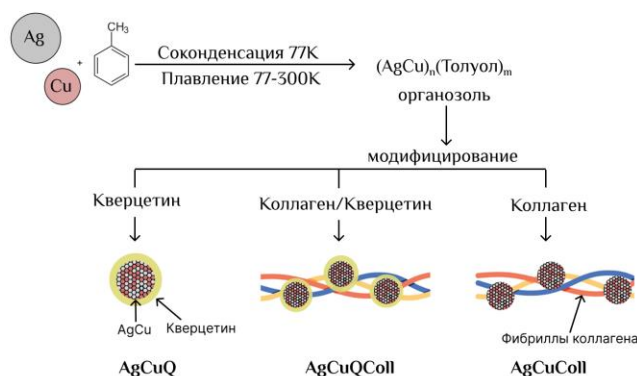


Рис. 1. Схема получения гибридных материалов, содержащих биметаллические наночастицы

Полученные композиты исследованы с использованием комплекса физико-химических методов, включая РФА, РФЭС, СЭМ-ЭДС и т.д. Установлено, что формирование композитов серебро-медь-кверцетин-коллаген сопровождается значительным уменьшением размеров металлических наночастиц: для серебра - с 5.0 до 2.6 нм, а для меди - с 8.2 до 4.0 нм.

Биметаллические наночастицы AgCu и их конъюгаты представляют собой твердый раствор с неупорядоченной кристаллической структурой, содержащий межатомные связи типа Ag-Cu, Ag-O-Cu и Ag-O-Cu-O-. Полученные композиты перспективны для создания эффективных материалов медицинского назначения с пролонгированным антимикробным действием.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №24-23-00220)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ЯДРА ЗЕМЛИ МЕТОДАМИ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А.В. Михеенков^{1,2}, В.Э. Валиулин^{1,2,3}, Н.М. Щелкачев^{1,2}, К.Д. Литасов²

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Внутреннее ядро Земли - одна из самых загадочных областей нашей планеты, его состав, структура и физические свойства в экстремальных условиях ($P \sim 350$ ГПа, $T \sim 5500$ К) являются предметом интенсивных дискуссий. Традиционные первопринципные (ab initio) методы требуют больших вычислительных затрат, что ограничивает масштаб и детализацию моделирования. Мы используем подход глубокого машинного обучения для построения точного межатомного потенциала внутреннего ядра Земли, основанного на данных ab-initio расчетов.

В нашем подходе исследуется многокомпонентная система, из hcp решетка Fe с примесями Ni и легких элементов (Si, S, O, C, H) методами молекулярной динамики с помощью построенного нейросетевого межатомного потенциала. Были получены ключевые характеристики внутреннего ядра Земли, такие как: плотность, коэффициент диффузии, радиальные функции распределения, скорость звука, сдвиговый модуль и модуль всестороннего сжатия. Эти результаты отлично согласуются со стандартной сейсмологической моделью PREM. Мы обнаружили, что в то время, как Fe, Ni, Si и S образуют стабильную кристаллическую решетку, легкие элементы (C, H и в некоторой степени O) проявляют диффузию, подобную жидкости. Таким образом, внутреннее ядро земли является суперионным кристаллом. Кроме того, модули упругости и скорости звука согласуются с передовыми сейсмическими экспериментальными данными.

Таким образом, развитый подход, основанный на методе глубокого машинного обучения, обеспечивают точность, сравнимую с ab initio расчётами, но с несопоставимо меньшими вычислительными затратами, открывая новые возможности для детального термодинамического моделирования сложных многокомпонентных соединений, в том числе ядер экзопланет.

НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛАСТИН, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ МЕТОДОМ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

М.М. Мурашев¹, В.Т. Эм¹, И.Д. Карпов¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

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.

Исследования выполнены с использованием уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» НИЦ «Курчатовский институт».

ОТ КАПЛИ ДО ПУЧКА: ИИ-ОТБОР КРИСТАЛЛОВ

*Д.Д. Мусин^{1,2}, В.А. Коржов¹, В.А. Шишков¹, К.В. Тихонова¹, А.С. Устинова¹,
М.А. Марченкова^{1,2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Южный федеральный университет

Подготовка кристаллов, готовых для установки на рентгеновский пучок, остаётся узким местом структурной биологии: качество дифракции на рентгеновских установках (в т. ч. синхротронных) напрямую определяется совершенством внутренней структуры и размером кристаллов, а ручной просмотр тысяч изображений капель делает цикл «от постановки до пучка» долгим и субъективным [1]. Мы решаем эту проблему за счёт сочетания точного температурного контроля непосредственно в камере и автоматической детекции кристаллов методами глубокого обучения: создаём компактную термостатируемую платформу и обучаем ансамблевый классификатор, который переводит отбор из режима «вручную и задним числом» в быстрый и воспроизводимый отбор перспективных условий в реальном времени под рентгеноструктурный анализ [2, 3].

На экспериментальных данных сформирован собственный массив из 9 915 изображений (модель: лизоцим, метод сидячей капли), выполнена ручная бинарная разметка «кристалл/не кристалл». Предобработка включает обрезку области капли и перевод в градации серого для повышения устойчивости к бликам и вариациям освещения.

Алгоритмическая часть — ансамбль свёрточных нейронных сетей (ResNet50, DenseNet121, Inception-v3, Xception). На валидации получены метрики: общая точность 94,6 %, мера гармоничности $\approx 0,96$, полнота 95,8 %, прецизионность 97,1 %: система уверенно находит даже небольшие кристаллы при низком уровне ложных срабатываний. Такой уровень чувствительности и прецизионности позволяет экономить человеко-часы и снижать долю пустого времени на установке [4].

Отобранные кристаллы, готовые для установки, направляются на рентгеноструктурный анализ, включая синхротронный пучок, что повышает вероятность получения качественных дифракционных данных с первой попытки.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. A. McPherson, J.A. Gavira, Acta Cryst. F, 70, 2, 2–20 (2014)
2. A.E. Bruno, P. Charbonneau, J. Newman et al., PLOS ONE, 13, 6, e0198883 (2018)
3. J.P. Astier, S. Veessler, Cryst. Growth Des., 8, 3, 952–958 (2008)
4. F. Wiewel, J. Krieger, M. Leibnitz et al., Acta Cryst. D, 80, 7, 820–829 (2024)

АВТОМАТИЧЕСКИЙ ВЫБОР МОДЕЛИ И БЫСТРЫЙ ПЕРВИЧНЫЙ АНАЛИЗ МУРР-ДАННЫХ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Д.Д. Мусин^{1,2}, П.В. Конарев^{1,2}, М.А. Марченкова^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Южный федеральный университет

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) — ключевой метод для определения размеров и формы наночастиц: наиболее информативна низкоугловая часть кривой, где «читаются» габариты и обводы частиц, а при больших углах проявляются детали контраста и оболочек. В типовом конвейере данные приводят к единому масштабу, вычитают фон, контролируют качество и далее сопоставляют с физическими моделями формы. Такой анализ традиционно требует экспертизы и времени, особенно когда приходится выбирать между несколькими близкими форм-факторами [1].

Мы представляем протокол автоматического выбора геометрической модели по данным МУРР. Сырые кривые проходят специально подобранный препроцессинг: пороговая фильтрация шумовых «хвостов», логарифмирование интенсивности, стандартизация, логарифмическая выборка по q , а также интегральная нормализация, выравнивающая вклад разных участков профиля. Далее свёрточная нейросеть обучает компактное латентное представление кривой рассеяния, и поверх него лёгкий классификатор автоматически выбирает оптимальную модель из набора сфер/эллипсоидов/цилиндров и их core-shell-вариантов [2]. Такой двухступенчатый дизайн снижает субъективность выбора модели, повышает точность на синтетических наборах и устойчивость к шуму. Он также лучше переносится между конфигурациями приборов, если обучение вести совместно на нескольких q -диапазонах и уровнях шума [3].

Метод нацелен на быстрый старт дальнейшего параметрического подбора (fit) и на поддержку пользователя без глубокой специализации в МУРР: вместо ручного перебора форм-факторов система предлагает правдоподобную модель-кандидат с учётом особенностей данных и настройки эксперимента [4].

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. N. Monge, A. Deschamps et al., Acta Cryst. A, 80, 3, 202–212 (2024)
2. H. He, C. Liu et al., iScience, 23, 8, 100906 (2020)
3. D.S. Molodenskiy, D.I. Svergun et al., Structure, 30, 7, 900–908 (2022)
4. D. Franke, C.M. Jeffries et al., Biophysical Journal, 114, 11, 2485–2492 (2018)

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛСВЯЗЫВАЮЩИХ БЕЛКОВ СЕМЕЙСТВА S100 С ИЗОЛИРОВАННЫМИ МОДЕЛЯМИ КЛЕТОЧНЫХ МЕМБРАН

*Л.Р. Муфтахова¹, А.В. Рогачев¹, Н.Н. Новикова¹, А.Л. Тригуб¹,
К.В. Николаев^{1,2}, М.Е. Пермякова³, А.А. Вологжанникова³, С.Е. Пермяков³,
С.Н. Якунин¹*

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

² *Московский физико-технический институт, Долгопрудный*

³ *Институт биологического приборостроения с опытным производством РАН, ФИЦ
ПНЦБИ РАН, Пущино*

Белки S100 – самое крупное семейство суперсемейства кальций-связывающих белков «EF-руки», несущих кальций-связывающий домен, состоящий из двух α -спиралей и Ca^{2+} -связывающей петли между ними. Некоторые из белков S100 также содержат отдельные Zn^{2+} -связывающие центры. Функционирование белков S100 как внутри клеток, так и вне клеток предполагает наличие их множественных контактов с жирными кислотами и липидными мембранами в различной форме. Связывание ионов Ca^{2+} приводит к изменению структуры белков S100, как правило, влияющее на их сродство к партнерам по связыванию, включая растворимые регуляторные белки, ферменты, рецепторные/мембранные белки, нуклеиновые кислоты и липиды, что объясняет участие белков S100 во множестве физиологических процессов в норме и патологии.

Представленная работа посвящена изучению взаимодействия рекомбинантных форм белков S100B/S100P человека с модельными фосфолипидными мембранами разной геометрии и состава, а также роли ионов Ca^{2+} и Zn^{2+} в этом процессе. На станции «Ленгмюр» Курчатовского источника синхротронного излучения (г. Москва) проведены экспериментальные исследования структурной реорганизации моделей клеточных мембран под действием белков S100, влияния ионов металлов на процесс взаимодействия белков S100 с липидными мембранами, а также изучение изменений металлсвязывающих свойств белков S100 при этих взаимодействиях. В качестве модели клеточных мембран использованы липидные монослои, сформированные на поверхности водной субфазы в ленгмюровской ванне. Использован комплекс взаимодополняющих высокопрецизионных рентгеновских методик: двумерная дифракция рентгеновского излучения в скользящей геометрии, метод стоячих рентгеновских волн, рентгеновская абсорбционная спектроскопия.

Работа поддержана грантом РНФ № 25-14-00223

ЭВОЛЮЦИЯ СОСТАВА, СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С $M = \text{Co}, \text{Ni}$ ТИПА МВТС(С2) В ПРОЦЕССЕ «ДЕГИДРАТАЦИЯ – ГИДРАТАЦИЯ»

А.Г. Муштаков^{1,2}, Н.А. Анистратов¹, Г.М. Кузьмичева², Р.Д. Светогоров^{2,3},
Е.В. Храмов^{2,3}, В.А. Лазаренко^{2,3}, И.А. Каурова², Е.Б. Маркова¹

¹Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы

²МИРЭА – Российский технологический университет

³НИЦ «Курчатовский институт»

Металлоорганические координационные полимеры (МОКП) на основе переходных металлов известны благодаря широкому спектру применений (сенсоринг, катализ, адсорбция), обусловленных, прежде всего, возможностью изменения формального заряда (ФЗ). Судя по литературным данным, МОКП с одинаковым линкером и ионами Co и Ni имеют одинаковые составы, изоструктурны [1] и демонстрируют практически аналогичные свойства *ex situ* [2]. Тем не менее, несмотря на одинаковую электроотрицательность и электронное строение, у Co^{2+} и Ni^{2+} разная поляризующая способность (бóльшая у Ni^{2+}) и два спиновых состояния у Co^{2+} . Кроме того, в большинстве случаев, исходные и реальные составы монокристаллов отличаются. Цель работы – установление роли Co и Ni в реализации состава и строения фаз $[\text{M}_3(\text{BTC})_2(\text{H}_2\text{O})_{12}]$.

Игольчатые кристаллы (размер ≤ 4 мм) бензол-1,3,5-трикарбоксилатов Co и Ni ($[\text{M}_3(\text{BTC})_2(\text{H}_2\text{O})_{12}]$ - далее CoBTC и NiBTC; $(\text{BTC})^{3-} = \text{C}_6\text{H}_3(\text{COO}^-)_3$), получены при аналогичных условиях (сольвотермальный синтез из $\text{M}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и H_3BTC в смеси диметилформамида, этанола и воды) с пр. гр. С2 и одинаковыми составами $[\text{Co}^{2+}_{2.93(1)}(\text{BTC})^{3-}_{1.95}(\text{H}_2\text{O}_w)_{11.94(4)}]$ и $[\text{Ni}^{2+}_{2.94(2)}(\text{BTC})^{3-}_{1.96}(\text{H}_2\text{O}_w)_{11.96(4)}]$ (станция РСА/Белок; программа *Shelxl*), но отличными от исходного и от измельченных в порошок (станция РСА/Белок; метод Ритвельда): $[\text{Co}^{2+}_{2.71(2)}(\text{BTC})^{3-}_{1.81}(\text{H}_2\text{O}_w)_{11.14(4)}]$ и $[\text{Ni}^{2+}_{2.93(4)}(\text{BTC})^{3-}_{1.95}(\text{H}_2\text{O}_w)_{11.12(6)}]$. Еще больше отличий между CoBTC и NiBTC выявлено методом рентгенографии (порошковый дифрактометр) в цикле «дегидратация-гидратация» *ex situ* и методом EXAFS *in situ* (станция СТМ): перманентная пористость у CoBTC, различные процессы/стадии температурной трансформации образцов (разложение дегидратированного аморфного NiBTC после гидратации) и локального окружения Co и Ni от октаэдра до тетраэдра с разным числом открытых и закрытых активных центров. Эти различия между CoBTC и NiBTC, Co^{2+} и Ni^{2+} оказали влияние и на функциональные свойства: термическая и химическая стабильность, превосходство адсорбционных (CH_4 , H_2 , H_2O) и антимикробных свойств выявлена у CoBTC, а характеристики каталитических свойств выше у NiBTC.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № FSFZ-2024-0003.

1. Yaghi O. M., Li H., Groy T. L. J. Am. Chem. Soc. 118 (38), 9096-9101 (1996).
2. Sun X. et al. J. Mol. Struct. 1322, 140549 (2025).

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ АНАЛИЗ МИКРОРЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТЕЙ РАЗРУШЕНИЯ ОДНОНАПРАВЛЕННЫХ КОМПОЗИТОВ ПО СОПРЯЖЕННЫМ ДАННЫМ СЭМ И КОНФОКАЛЬНОЙ ЛАЗЕРНОЙ МИКРОСКОПИИ

Е.И. Наконечный¹, А.В. Хохлов²⁻⁴, С.Н. Галышев⁴, Б.И. Атанов⁴, В.И. Орлов⁴

¹ МГУ имени М.В. Ломоносова (физический факультет), Москва

² НИИ механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

³ НИИГрафит (Росатом), Москва

⁴ Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипяна РАН, Черноголовка

Разработаны и апробированы методика и алгоритмы совместной автоматизированной обработки и анализа электронной и конфокальной лазерной сканирующей микроскопий (СЭМ и КЛСМ) поверхностей разрушения однонаправленных композитов со сложным рельефом. Программный комплекс (ПК) позволяет определять широкий набор характеристик микроструктуры, полезных для оценки прочности, механизмов разрушения и их моделирования [1]: контуры волокон, распределение их размеров и площадей, неоднородность распределения волокон (их объемной доли) по поперечному сечению, статистическое распределение длин выдернутых волокон, контуры и размеры кластеров, площади рельефа матрицы и оголенных волокон. Ключевая идея – совместная обработка данных двух взаимодополняющих методов микроскопии и анализ поверхностей разрушения обеих половин образца. Это позволяет восстанавливать недоступную из-за большого перепада высот на поверхности разрушения информацию по комплементарным снимкам, повышать точность распознавания структурных элементов и надежность вычисления характеристик. Предложены критерии выбора локального отсчетного уровня при определении длины и площади боковой поверхности выдернутых волокон и критерии определения кластеров.

Отработка и верификация ПК проводилась на нескольких сериях снимков поверхностей разрушения углеалюминиевой проволоки с матрицей из технически чистого алюминия или сплава Al-0.5Bi, непрерывно армированной углеродными волокнами [1,2]. Проволока изготовлена в ИФТТ РАН, ее диаметр – 300 мкм, объемная доля волокон – около 60%. Разработанный ПК позволяет получить ценную информацию для понимания строения и моделирования поведения однонаправленных композитов и полезен как инструмент контроля качества в процессе их производства.

1. Хохлов А.В., Наконечный Е.И., Галышев С.Н., и др. Анализ распределения длин выдернутых волокон на поверхностях разрушения композитов с алюминиевой матрицей, непрерывно армированной углеродными волокнами, по данным СЭМ и КЛСМ // *Авиационные материалы и технологии*. 2026. №1

1. Хохлов А.В., Галышев С.Н., Атанов Б.И., В.И. Орлов. Влияние расслоения материалов с низкой сдвиговой прочностью на процесс разрушения и результаты испытаний на трехточечный изгиб // *Физическая мезомеханика*. 2025. Т.28, №2, с.13-43.

ВАЛЕНТНОЕ СОСТОЯНИЕ КАТИОНОВ MN/CR/CO/CU В МНОГОЭЛЕМЕНТНЫХ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ПИРОХЛОРАХ

*С.В. Некипелов^{1,2}, Н.А. Жук², О.В. Петрова¹, Д.В. Сивков¹, К.А. Бакина¹,
Р.Н. Скандаков¹, В.О. Рутковский¹, У.С. Третьякова^{1,2}, Е.А. Степучев^{1,2},
А.М. Лебедев³, Р.Г. Чумаков³, В.Н. Сивков¹*

¹ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

²Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина

³НИЦ «Курчатовский институт»

Мультиэлементные высокоэнтропийные пирохлоры в зависимости от химического состава перспективны в качестве диэлектриков, смешанных и ионных проводников, фотокатализаторов процессов окисления. При этом их физико-химические свойства существенно меняются при допировании 3d-атомами, в особенности при мультиэлементном допировании. Кроме того всегда остается открытым вопрос о характере, позиции внедрения в матрицу пирохлора и о валентном состоянии (эффективном заряде) атомов-допантов,

В представленной работе показаны результаты исследования методами XPS-спектроскопии электронного состояния и характера межатомных взаимодействий атомов 3d-металлов в впервые синтезированных по керамической технологии многоэлементных высокоэнтропийных $\text{Bi}_{2-x}\text{Cr}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}(\text{Co/Cu})_{1/3}\text{Nb}_2\text{O}_9$ - Δ ниобатах висмута со структурой пирохлора. Все измерения были проведены на станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий [1]. Параметры XPS спектров $\text{Bi}4f$, $\text{Nb}3d$, $\text{Co}2p$, $\text{Cu}2p$, $\text{Mn}2p$, $\text{Cr}2p$ для смешанных пирохлоров сопоставляются с параметрами оксидов переходных элементов в различных степенях окисления. Для сложных пирохлоров наблюдается характерный сдвиг $\text{Bi}4f$ и $\text{Nb}3d$ спектров в область меньших энергий на величину 0.1-0.2 и 0.6-0.65 эВ соответственно. По данным XPS $\text{Co}2p$, $\text{Cu}2p$, $\text{Mn}2p$, $\text{Cr}2p$ спектров катионы кобальта и марганца находятся в смешанном зарядовом состоянии, преимущественно, имеют эффективный заряд +2 (Co) и +3 (Mn), спектр $\text{Cr}2p$ представляет суперпозицию спектров от ионов хрома в зарядовом состоянии +3,+4,+6, $\text{Cu}2p$ спектры соответствует зарядовому состоянию катионов меди +2.

Исследование выполнено в рамках госзадания Коми НЦ УрО РАН (№125020501562-1), а также при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках Соглашения № 075-15-2025-455 от 26.05.2025 г.

1. A. M. Lebedev, K. A. Menshikov, et al. , Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 15, 1039 (2021).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ОПОРНОГО СЛОЯ ГАДОЛИНИЯ В РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА ПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ Q- ДИАПАЗОНАХ

Е.С. Никова¹, Ю.А. Саламатов¹, Е.А. Кравцов^{1,2}

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

2 Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург

На текущий момент актуальной задачей нейтронной рефлектометрии является фазовая проблема. Её суть состоит в том, что в эксперименте измеряют интенсивность отражения, которая является квадратом модуля комплексной функции, называемой амплитудой отражения. Информация об аргументе этой функции (который имеет физический смысл величины изменения фазы волны при отражении) теряется, и это препятствует однозначной интерпретации эксперимента.

На основе метода, предложенного в работах [1, 2], был разработан метод опорного слоя гадолиния и применен для исследования магнитных металлических структур на времяпролетных рефлектометрах в q -диапазоне $(0 - 0.05) \text{ \AA}^{-1}$ [3]. Структурные параметры исследуемых образцов были уточнены с помощью алгоритма Левенберга-Марквардта. Для применения модельно независимых методов, например, уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко, амплитуда отражения должна быть известна в широком диапазоне, как минимум при $q \sim 0.1 \text{ \AA}^{-1}$.

Основная проблема применения метода опорного слоя гадолиния состоит в том, что получить три рефлектометрические кривые, перекрывающиеся на широком q -диапазоне, простым подбором углов падения сложно. Было принято решение разбить весь q -диапазон на несколько перекрывающихся участков. В каждом получить рефлектометрические кривые при трех различных углах падения первичного пучка. Далее по этим данным определить модуль и фазу амплитуды отражения и сшить полученные результаты. Данным методом была исследована магнитная система типа Fe/Cr/Fe с опорным слоем. Спектры отражения нейтронов были измерены на многоцелевом рефлектометре (MR) нейтронного источника CSNS (China Spallation Neutron Source).

Анализ экспериментальных данных показал, что предлагаемый метод позволяет определить амплитуду отражения на достаточно широком q -диапазоне.

Работа выполнена в рамках государственного задания для ИФМ УрО РАН, при финансовой поддержке Минобра РФ (Соглашение № 075-15-2022-830 от 5 июня 2025 г.).

1. C.F. Majkrzak, N.F. Berk, U.A. Perez-Salas. *Langmuir*. 19, 7796 – 7810. (2003).
2. V.O. de Haan, A.A. van Well, P.E. Sacks, S. Adenwalla, G.P. Felcher. *Phys.* 221, 524. (1996).
3. E. S. Nikova, Yu. A. Salamatov, E. A. Kravtsov, V. V. Proglyado, V. D. Zhaketov, M. A. Milyaev, *J. Surface Investigation* 16, 939 (2022).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ ЛИТИЙ-ИОННОГО АККУМУЛЯТОРА ДЛЯ СИНТЕЗА МАХ-ФАЗЫ НА ОСНОВЕ МАРГАНЦА МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ

С.Г. Николаева¹, И.А. Лихачев¹, К.В. Бардуханов²

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

² *Дальневосточный федеральный университет*

Одним из элементов, который может быть выделен в процессе переработки литий-ионных аккумуляторов (ЛИА), является марганец (Mn). Этот металл может стать основой для синтеза новых материалов, таких как МАХ-фаза Mn_3AlC . Кристаллическая структура марганцевых МАХ-фаз состоит из чередующихся слоев магнитного металла М, неметалла Х (С или N), разделенных прослойками атомов элемента А (Al, S, Ga и др.).

После выщелачивания катодного литий-марганцевого материала состав выделенного диоксида марганца показал его фазовую чистоту и содержание примесей в аморфной форме. Рентгено-дифракционный анализ состава продукта спекания выделенного диоксида марганца с углеродом и алюминием в инертной среде аргона позволил обнаружить целевую МАХ-фазу Mn_3AlC и корунд Al_2O_3 . На дифрактограмме присутствуют также характерные максимумы примесных фаз: остаточного исходного графита и Mn_7C_3 . Для перевода МАХ-фазы в форму МХ был использован метод селективного травления с помощью HF. Фазовый состав материала после травления представляет собой Al_2O_3 , С, Al_4C_3 , и соответствующих МХ - Mn_7C_3 и Mn_5C_2 .

Рентгено-дифракционный анализ в совокупности с другими методами структурного и морфологического анализа позволили разработать метод комплексной переработки ЛИА, обеспечивающий выделение марганца и синтез МАХ-фазы Mn_3AlC . Было доказано успешное формирование МАХ-фазы Mn_3AlC , представляющей интерес в контексте получения МХ для электрохимических применений. Полученные результаты позволяют увеличить экономическую эффективность обращения с отработавшими ЛИА ввиду получения потенциально востребованных высокотехнологичных функциональных материалов на основе марганца.

НОВЫЕ МОРФОМЕТРИЧЕСКИЕ И РЕНТГЕНОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ТКАНЕЙ СУСТАВОВ ПРИ ПОМОЩИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.И. Омельченко, О.И. Баум, В.Е. Асадчиков, И.Г. Дьячкова, Д.А. Золотов, В.В. Волков, П.М. Конарев, А.А. Калоян, К.М. Подурец

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к поиску новых методов диагностики и лечения заболеваний суставов, связанных с разрушением хрящевой и костной ткани. В связи с распространенностью заболеваний суставов [1] представляется актуальной разработка новых морфометрических и рентгенологических методов для изучения тканей суставов. В докладе представлены результаты исследования сустава животного, пораженного остеоартритом.

Структура суставной ткани, пораженной артритом, изучалась с помощью гистологии замороженных срезов декальцинированной ткани, оптической поляризационной микроскопии и рентгеновской томографии на установке Медиана Курчатовского центра синхротронных исследований. Элементный состав и структура образцов интактной и пораженной хрящевой ткани изучался с помощью рентгено-флюоресцентного анализа (РФА), проведенного на источнике рентгеновского излучения лаборатории Рефлектометрии и малоуглового рассеяния Курчатовского комплекса «Кристаллография и фотоника». Молекулярная структура соединительной ткани сустава изучалась методом МУРР.

Оптическая микроскопия хрящевой поверхности пораженного сустава показала на структурные изменения ткани различной степени в области поражения: А- уменьшение толщины хрящевой пластинки, В - изъязвление хрящевой пластинки вплоть до кости, Г-вырастание остеофитов из костной ткани, Д – приживление фрагментов разрушенного хряща на поверхности здорового. Гистологические исследования замороженных срезов декальцинированных образцов пораженного хряща, проведенного при помощи поляризационной микроскопии, показали на неоднородность распределения хрящевой ткани с вкраплениями кости. Неоднородность плотности поврежденного хряща наблюдалась также при рентгеноскопии срезов. С помощью РФА измерено распределение элементов по глубине хрящевой пластинки, показывающее на увеличение нехарактерных для хряща Са и Fe. Методом МУРР обнаружено отличие структуры соединительной ткани в месте поражения от интактной ткани, состоящей из коллагена II

При помощи рентгеновской томографии поврежденной хрящевой ткани, проведенной на источнике синхротронного излучения выявлена структура хряща и кости в пространстве под поврежденной хрящевой поверхностью.

Обнаружено образование микротрещины в кости под поверхностью поврежденного хряща.

На Рис.1 показана томограмма образца хряща сустава, пораженного остеоартритом.

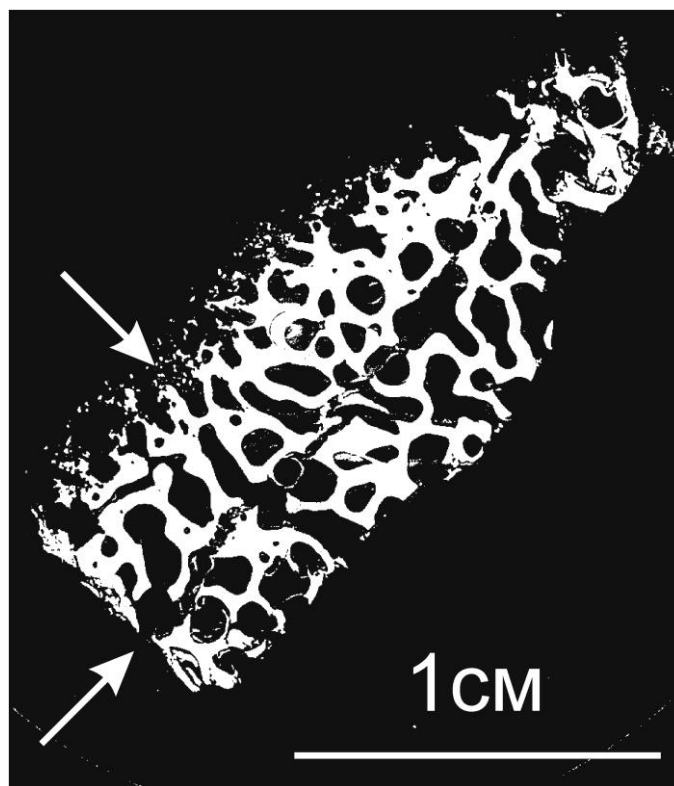


Рис.1. Томографический срез образца хряща сустава, поражённого остеоартритом. Вверху видна изъязвленная поверхность хряща с проросшими остеофитами, внизу – пористая структура кости с расположенной под хрящом трещиной.

Объемная реконструкция проекций рентгеновских изображений позволяет наблюдать внутреннюю структуру хряща и кости в области сустава, пораженного остеоартритом. Повреждение кости в области мыщелка коленного сустава берцовой кости, возможно, явилось причиной развития остеоартрита животного.

Исследование методом рентгеновской томографии выполнены с использованием уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения КИСИ-Курчатов» НИЦ «Курчатовский институт».

Работа выполнена в рамках Государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Woolf A. D., Pfleger B., (2003). Burden of major musculoskeletal conditions. Bulletin of the World Health Organization, 81 (9), 646 - 656. World Health Organization. <https://iris.who.int/handle/10665/269026>

СИНТЕЗ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Pt(II) И Pd(II) С ГОМОЛОГАМИ ПИРИДИНА — ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

М.В. Панина^{1, 2}, И.А. Якушев¹

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

² *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва*

Карбоксилатные комплексы металлов платиновой группы представляют собой перспективный класс соединений, в частности, в качестве прекурсоров новых функциональных материалов [1]. Классический метод получения углеродных нанотрубок (УНТ), модифицированных наночастицами платины или палладия, заключается в использовании в качестве предшественников простых неорганических солей. В рамках данной работы была предложена альтернативная схема, заключающаяся в использовании молекулярных ацетатных комплексов в качестве прекурсоров каталитически активных наноматериалов.

Модификация разработанных ранее методов [2, 3] в настоящей работе позволила расширить лигандный ряд и получить ацетатные комплексы Pt(II) и Pd(II) с общей формулой $[L_2M(OOCMe)_2]$ ($L = Py, 2-Pic, 4-Pic, 3,4-Lut, 3,5-Lut$; $M = Pt, Pd$) (рис. 1). Кристаллические структуры комплексов были установлены методом рентгеновской дифракции монокристаллов с использованием синхротронного излучения. Допирование УНТ (рис. 2) было проведено в мягких условиях, используя методы пропитки и восстановления.

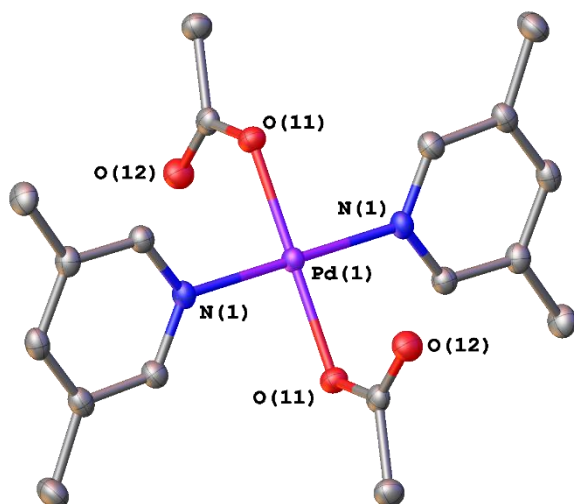


Рис. 1. Кристаллическая структура $[(3,5-Lut)_2Pd(OOCMe)_2]$

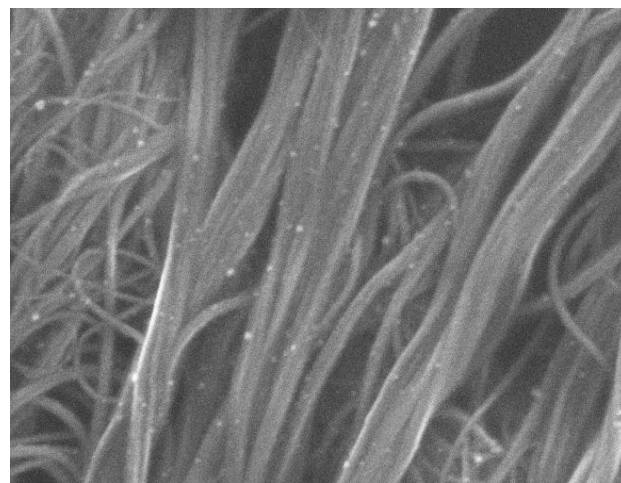


Рис. 2. СЭМ изображение ОУНТ/ $[(3,5-Lut)_2Pd(OOCMe)_2]$

1. S. Wang et al., ACS Appl. Mater. Interfaces. 12429, 6 (2014).
2. A. S. Popova et al., Mend. Commun. 576, 32 (2022).
3. M. V. Panina et al., Mend. Commun. 808, 34 (2024).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕГРАДАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ НЕТКАНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИКСОВ НА ИХ МОРФОЛОГИЮ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА С ПОМОЩЬЮ IN SITU РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Т. Д. Пацаев^{1}, К.Ю. Базылева¹, А.М. Азиева¹, Д.А. Кириллова¹,
Т. Е. Григорьев^{1,3}, Р. В. Шариков¹, Н.А. Шарикова¹, Д.А. Волков¹,
Е.В. Ястремский², А.Л. Васильев^{1,2}*

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

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

³МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. В.М. Ломоносова, Москва

Искусственные материалы с высокой удельной поверхностью и высокой пористостью, в частности, волокнистые матриксы, обеспечивают эффективное прикрепление клеток и возможность диффузии питательных веществ необходимы в регенеративной медицине. Выбор материала и морфологии внеклеточного матрикса обусловлен индивидуальными характеристиками заменяемого органа или ткани, что часто требует заданных химических и физических свойств [1]. Матриксы на основе волокнистых нетканых материалов могут различаться диаметром волокон, степенью пористости, плотностью упаковки, взаимной ориентацией волокон. Все эти параметры определяют механические свойства материала [2], которые, в свою очередь, оказывают значительное влияние на интеграцию в организм при имплантации тканеинженерной конструкции [3]. Для использования матриксов с оптимальными механическими свойствами необходимо подробное изучение их поведения под нагрузкой.

В представленной работе методом растровой электронной микроскопии в режиме естественной среды (ЕРЭМ) проведен *in situ* анализ механических характеристик нетканых матриксов на основе полилактида (ПЛА) с модификацией коллагеном и хитозаном при одноосных нагрузках. Кроме этого, проведены анализ и визуализация формирования разрывов волокон нетканых полимерных матриксов на основе ПЛА при его частичной деградации в культуральной среде при длительной инкубации с одновременной фиксацией механических напряжений.

1. Karamanos N.K., Theocharis A.D. et al., The FEBS journal. 288, 24 (2021).
2. Ali M.A., Advanced Materials Research. 1163 (2021).
3. Aghazadeh M.R., Delfanian S. et al., Polymers. 14, 8 (2022).

МОНОКРИСТАЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В РАСШИФРОВКЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ Te(IV) С ТЕТРАЭТИЛАММОНИЕМ

С.М. Писарев¹, А.О. Лембиков¹, В.И. Немтинов¹, А.В. Шурыгин¹

¹ Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

Благодаря интенсивной люминесценции ионы с электронной конфигурацией s^2 (например, Sb^{3+} и Te^{4+}) служат основой для высокоэффективных люминофоров, они широко используются в производстве люминесцентных ламп, а также в качестве катодо- и рентгенолюминофоров. Комплексные соединения Te(IV) состава A_2TeHal_6 (где А - органический или неорганический катион, Hal = Cl, Br, I) представляют собой перспективный класс материалов для оптоэлектроники и люминофоров. В частности, высокий потенциал демонстрируют комплексы с катионами тетраэтиламмония. Для направленного дизайна и синтеза новых материалов данного класса критически важно понимание корреляции между их структурой в кристаллической решётке и наблюдаемыми люминесцентными свойствами.

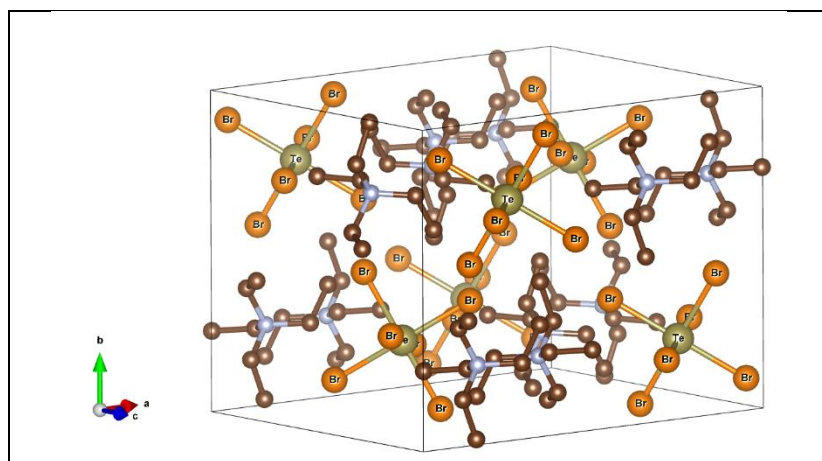


Рисунок 1. Кристаллическая структура Te(IV) с тетраэтиламмонием

Исследование оптических свойств кристаллов выявило, что при охлаждении от 300 К до 100 К их окраска изменяется от яркой желто-зеленой до бесцветной. Данные монокристалльной рентгеноструктурной дифракции показали, что координационный октаэдр вокруг атома Te(IV) является искаженным. Проведение температурных экспериментов на станции «РСА/Белок» позволило определить структуры двух соединений при различных температурах и установить зависимость их геометрических параметров от температуры.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0014).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ, ОБЛУЧЁННОГО ИОНАМИ КСЕНОНА НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

О.В. Подорожний, А.В. Румянцев, Н.И. Боргардт

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Пучки ионов инертных газов, например ксенона, широко применяются в современных микро- и нанотехнологиях для обработки поверхностей и формирования структур. Особый интерес представляет исследование аморфизованного ионным воздействием слоя, включая изучение процесса формирования кластеров, образованных имплантированными ионами, а также структуры границы между кристаллическим и аморфным материалом.

В данной работе проводилось моделирование облучения монокристаллического кремния Si ионами ксенона Xe^+ с энергией 8 кэВ и дозой около 10^{16} см^{-2} методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS. Поскольку в эксперименте между последовательными падениями ионов проходит достаточно времени для релаксации части точечных дефектов в нарушенной области образца, то для обеспечения такой релаксации при моделировании облучённая структура выдерживалась при 1150 К в течение 2,5 нс. Полученные атомарные позиции использовались для расчёта высокоразрешающих электронно-микроскопических изображений, которые сравнивались с экспериментальной микрофотографией (Рис. 1а), вычисления на их основе корреляционных функций $r(x)$, ширины переходной области w_{sim} между *c*-Si и *a*-Si, а также для изучения процесса образования и роста кластеров имплантированного Хе в динамике с шагом дозы $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Из приведённого на Рис. 1б изображения видно, что даже кратковременная релаксация в течение $t = 0,5$ нс приводит к значительному уменьшению w_{sim} от 3,2 до 1,9 нм, что лучше совпадает с экспериментальным значением $w_{exp} = 1,6$ нм [1]. При $t = 2,5$ нс w_{sim} достигает величины 1,7 нм и в дальнейшем почти не меняется, что можно объяснить реализацией всех релаксационных процессов, возможных при заданной температуре. Отметим, что релаксация не оказывает значительного влияния на кластеры Хе.

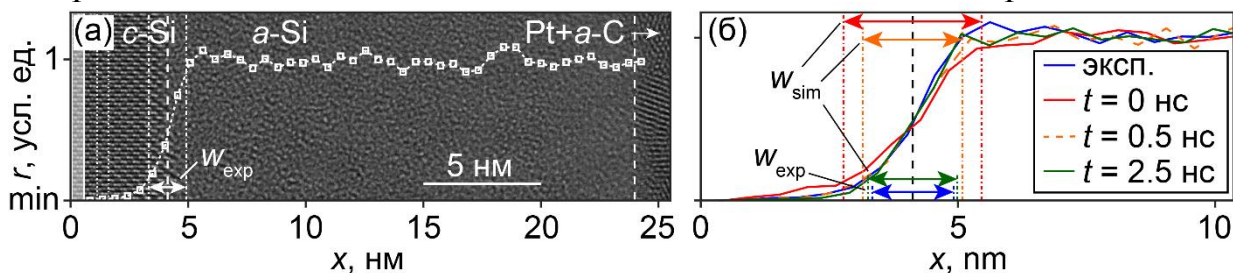


Рис. 1. Экспериментальное изображение [1] (а), профили функций $r(x)$ в переходной области между *a*-Si и *c*-Si в зависимости от длительности термической релаксации (б)

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ КАРБОКСИПЕПТИДАЗЫ Т С АНАЛОГАМИ ПРИРОДНЫХ СУБСТРАТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ QM/MM-МЕТАДИНАМИКИ

Д.Д. Подшивалов¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт»

Исследование фермент-субстратных комплексов является актуальной задачей. Высокую значимость имеют исследования взаимодействия ферментов именно с природными субстратами. Получение трехмерной структуры комплексов активных ферментов с природными субстратами экспериментальными методами затруднено из-за активности и высокой специфичности фермента к субстрату. В данной работе было проведено моделирование реакции карбоксипептидазы Т с аналогами природных субстратов и валидация промежуточных состояний с помощью рентгеноструктурных данных.

Ключевым результатом исследования стало моделирование начальной стадии гидролиза пептидной связи для субстратов AlaAlaAlaPhe, AlaAlaAlaLeu и AlaAlaAlaArg. Применение QM/MM-метода в сочетании с метадиной [1,2] позволило детально изучить протекание реакции, катализируемой карбоксипептидазой Т для субстратов различной природы. В качестве коллективных переменных были выбраны параметры, характеризующие разрыв пептидной связи и перенос протона. Восстановленные поверхности свободной энергии реакции позволили выявить ключевые промежуточные состояния и переходные комплексы, включая тетраэдрический интермедиат, стабилизированный координацией с ионом цинка. Сравнение с данными трехмерной структуры комплексов с аналогами переходных состояний соответствующей природы подтвердило корректность моделирования ключевой стадии реакции.

Данный подход к моделированию представляет универсальную платформу для предсказательной энзимологии, особенно для металлозависимых ферментов. Он позволяет прогнозировать субстратную специфичность и каталитическую активность, что перспективно для направленного дизайна биокатализаторов и фармакологической оптимизации.

1. J.F. Dama, M. Parrinello, G.A. Voth, Phys. Rev. Lett. 112 (2014).
2. PLUMED consortium, Nat. Methods 16 (2019) 670–673.

***IN SITU* ОТРАЖАТЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА АТОМАРНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ В УСЛОВИЯХ ТРАВЛЕНИЯ, СУБЛИМАЦИИ И ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА СЛОИСТЫХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕТАЛЛОВ**

С.А. Пономарев¹, Д.И. Роголо¹, Д.В. Щеглов¹, А.В. Латышев^{1,2}

¹ ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск

Слоистые халькогениды металлов рассматриваются в качестве материальной основы перспективных устройств микроэлектроники, фотоники и фотовольтаики, поскольку сочетают свойства полупроводников, металлов и диэлектриков с предельно малой толщиной молекулярных слоёв и устойчивостью к деформациям на изгиб. Многообещающие свойства халькогенидов металлов и устройств на их основе продемонстрированы экспериментально во многочисленных работах на отщеплённых от объёмного кристалла чешуйках, однако актуальной проблемой создания полупроводниковых приборов массового производства является невозможность выращивания тонких плёнок халькогенидов металлов с высоким структурным совершенством. Методы эпитаксиального роста не исключают образования в процессе роста различных дефектов и формирования полиморфных модификаций с одинаковым стехиометрическим составом, но с отличающейся кристаллической структурой. Некоторые дефекты формируются на гетерогранице в процессе зарождения и роста первых слоев. Поэтому информация о начальных стадиях роста слоистых халькогенидов металлов – а именно о взаимодействии металлов и халькогенов с кристаллической подложкой, зарождении островков и дальнейшего роста пленки – является предельно важной для разработки способов выращивания качественных ван-дер-ваальсовых гетероструктур в промышленных масштабах. Для решения таких задач востребованы *in situ* методы, которые позволяют в режиме реального времени диагностировать процессы на поверхности: изменение структуры и морфологии поверхности при адсорбции атомов, их диффузии и взаимодействия между собой и с подложкой.

В данной работе показаны возможности уникального метода *in situ* отражательной электронной микроскопии (ОЭМ) для изучения процессов на поверхности ван-дер-ваальсовых и классических полупроводниковых подложек. Представлены результаты недавних исследований процессов на поверхностях Si(111) и Bi₂Se₃(0001) при адсорбции In, Sn и Se в широком диапазоне температур, а также эпитаксиальном росте слоистых халькогенидов металлов SnSe₂ и In₂Se₃.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 19-72-30023 с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ ErFe_2Mn_x ($x = 0; 0,2$) МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А. Пономарева¹, Р.Г. Чумаков², Е.Г. Герасимов^{1,3}, Н.В. Мушников^{1,3},
Т.В. Кузнецова^{1,3}

¹ ИФМ УрО РАН, Екатеринбург

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва

³ Уральский федеральный университет, Екатеринбург

Редкоземельные интерметаллиды RT_2T_x (R – редкоземельный элемент, T , T' – переходные металлы) с кристаллической структурой типа MgCu_2 (фаза Лавеса $C15$, пространственная группа $Fd\bar{3}m$) активно исследуются благодаря своим магнитным свойствам и особенностям электронной структуры. Уникальные характеристики позволяют рассматривать их в качестве перспективных функциональных материалов с гигантской магнитострикцией, большим магнитосопротивлением и магнитокалорическим эффектом [1-4].

Целью данной работы является исследование d - и f - состояний элементов, а также их влияние на формирование электронной структуры редкоземельных интерметаллидов ErFe_2Mn_x ($x = 0; 0,2$). Метод резонансной фотоэмиссионной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в качестве источника фотонов позволяет выделить вклады редкоземельного и переходных металлов в валентную зону, в частности исследовать локализацию $4f$ -электронов эрбия, $3d$ -электронов железа и марганца. Измерение фотоэмиссионных спектров проводится на станции НаноФЭС ККСНИ НИЦ «Курчатовский институт».

В результате анализа фотоэмиссионных спектров получены зависимости формы спектров валентных зон от энергий фотонов вблизи краев поглощения внутренних уровней эрбия, железа и марганца. Исследованы процессы прямого и двухступенчатого выхода фотоэлектронов, упругого и неупругого каналов распада этих состояний с испусканием высокоэнергетических электронов за счет внутриатомного кулоновского взаимодействия. Появление второго переходного металла и его концентрация влияют на интенсивность $4f$ -состояний редкоземельного элемента в валентной полосе, что подтверждает необходимость определения d - f взаимодействий в подобных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-72-00067).

1. J. L. Wang, C. Marquina, et al., Phys. Rev. B. 73, 094436 (2006).
2. E. G. Gerasimov, N. V. Mushnikov, et al., J. Alloy. Compd. 680, 359-365 (2016).
3. A. M. Bartashevich, E. G. Gerasimov, et al., J. Alloy. Compd. 923, 166360 (2022).
4. A. A. Inishev, E. G. Gerasimov, et al., J. Alloys Compd. 968, 172186 (2023).

МОНОКРИСТАЛЬНАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В РАСШИФРОВКЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ХЛОРИДОВ И БРОМИДОВ Te(IV) С ПИРИДИНОМ

Е.А. Пономарева¹, А.О. Лембигов¹, В.И. Немтинов¹, А.В. Шурыгин¹

¹ Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

Проводимые поисковые исследования по разработке полупроводниковых фотоэлектрических модулей на основе комплексов Te(IV), Sb(III), Bi(III), Ti(IV), Pb(II), Sn (IV) и других с перовскитовой структурой подтверждает высокую актуальность и значимость. К подобному классу соединений относятся комплексные соединения Te(IV) состава A_2TeHal_6 (где А - органический или неорганический катион, Hal=Cl, Br, I). Комплексы ионов Te(IV) с пиридином являются перспективными материалами для оптоэлектроники и люминофоров. Понимание взаимосвязи между их кристаллической структурой и спектрально-люминесцентных свойствами критически важно для направленного синтеза новых материалов

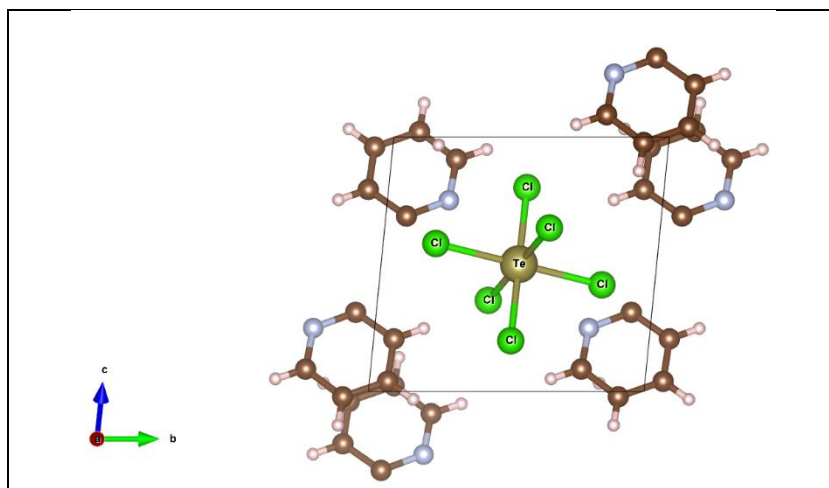


Рисунок 1. Кристаллическая структура Te(IV) с тетраэтиламмонием

По данным монокристалльной дифракции было обнаружено, что оба комплекса изоструктурны, октаэдр Te(IV) является искаженным. Хлоридный комплекс проявляет люминесценцию при 77 К в виде широкой полосы с максимум 700 нм соответствующую $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ -переходу иона теллура, а для бромидного комплекса люминесценция при 77 и 300 К отсутствует. Проведение температурных экспериментов на станции РСА/Белок позволило установить структуру двух соединений при различной температуре и выявить зависимости.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

ВЫСОКОПРЕЦИЗИОННАЯ СИНХРОТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОСИСТЕМЫ Fe-Pt, СИНТЕЗИРОВАННОЙ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

А.Н. Пригородова (Попова)¹, Н.С. Захаров¹, А.Н. Шмаков²

¹ *1* Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН, Кемерово

² *2* ЦКП СКИФ, Институт катализа СО РАН, Новосибирск

Одной из ключевых задач современного материаловедения является выявление зависимости фазового состава наноструктурированных систем (НС) от условий синтеза. В данном исследовании для решения этой задачи, помимо традиционных методов (лабораторный РФА, ПЭМ ВР), была применена высокоточная дифракция на синхротронном излучении (СИ), что позволило получить беспрецедентно точные данные о фазовом составе и термической эволюции НС Fe-Pt. Методом совместного восстановления в водной среде, синтезированы два типа НС Fe-Pt из сульфата железа(II) и сульфата аммония-железа(III) в качестве прекурсоров железа. Широкий угловой диапазон дифракционных данных СИ с исключительным разрешением и отношением сигнал/шум являются решающими факторами для:

- подтверждения данных о фазовом составе, полученных на лабораторном дифрактомете;
- прецизионного определения параметров элементарной ячейки, что критически важно для расчета содержания железа в твердых растворах;
- получения данных в широком диапазоне обратного пространства, необходимого для последующего построения атомной функции радиального распределения (PDF-анализ) при изучении локальной структуры.

Дифракционные эксперименты на СИ однозначно подтвердили фундаментальное различие в фазовом составе НС Fe-Pt. Для системы на основе Fe(II) данные СИ зафиксировали сложный гетерогенный фазовый состав, в то время как для системы на основе Fe(III) была установлена высокая степень гомогенности основного ГЦК твердого раствора с параметром решетки $3.8970 \pm 0.0009 \text{ \AA}$. Нагрев образцов *in situ* с контролем в реальном времени выявил кардинально разное поведение систем. В гетерогенной НС на основе Fe(II) наблюдается полная фазовая сегрегация с образованием крупных кристаллов Pt. В то же время, в гомогенной НС, полученной из Fe(III), происходит контролируемое фазовое превращение в мелкодисперсную двухфазную систему (ГЦК твердый раствор + интерметаллид $\text{Fe}_{21}\text{Pt}_{79}$ со структурой $L1_2$). Таким образом, применение высокоточной синхротронной дифракции позволило подтвердить структурные модели и количественно установить влияние предшественника на фазовый состав и термическую стабильность.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-13-00356, <https://rscf.ru/project/23-13-00356/>.

БЫСТРЫЙ РЕНТГЕНОВСКИЙ ЗАТВОР НА ОСНОВЕ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО МОНОХРОМАТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АДАПТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ

А.И. Проценко¹, В.А. Коржов¹, И.И. Петров¹, Я.А. Элиович¹

¹ Курчатовский Комплекс «Кристаллография и Фотоника»

На станции ПРО синхротронного источника «КИСИ-Курчатов» был установлен прототип двухкристального монохроматора на основе адаптивных элементов рентгеновской оптики (АЭРО), предназначенный для реализации методик времяразрешающей рентгеновской спектроскопии поглощения (QuickXAS).

В асинхронном режиме работы монохроматора вместо непрерывного монохроматического пучка генерируются рентгеновские импульсы. В данной работе исследованы достижимые временные параметры импульсов: длительность и частота повторения, для оценки возможности их практического применения, например в методиках pump-probe.

Получены минимальные длительности импульсов (рис. 1): 9.1 мкс в гармоническом режиме осцилляций АЭРО, что сопоставимо с существующими механическими рентгеновскими шаттерами, и 482 мс в трапецевидном режиме осцилляций АЭРО.

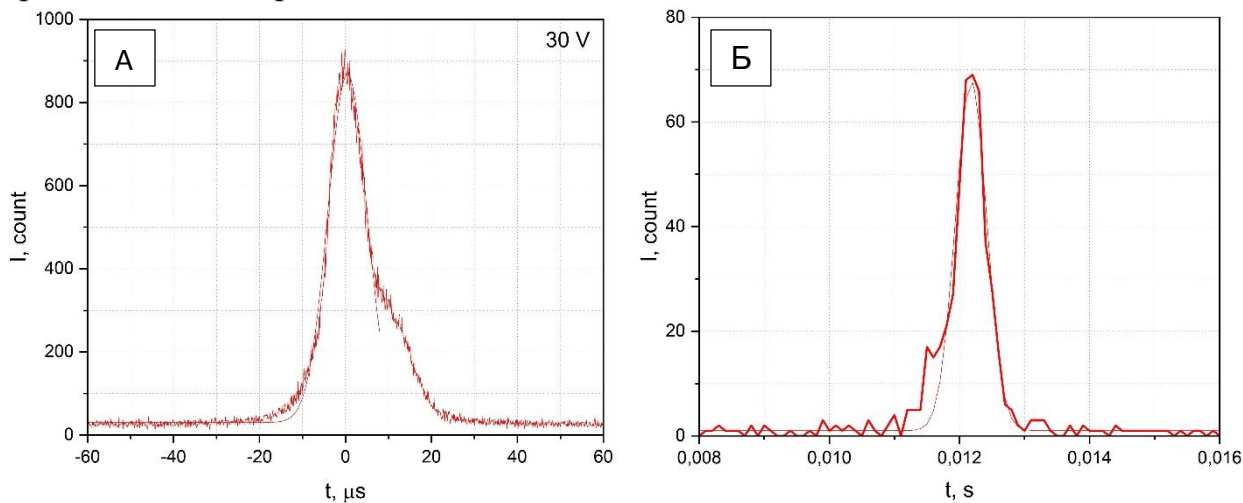


Рисунок 2 – Рентгеновские импульсы, полученные в А) гармоническом режиме управления АЭРО, Б) трапецевидном режиме управления АЭРО.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СВИНЦА ПОСЛЕ АДсорбЦИИ НА СЛОИСТОМ ДВОЙНОМ ГИДРОКСИДЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА EXAFS

В.Л. Рассторгуев¹, Н.П. Иванов¹, С.С. Савин², А.Л. Тригуб²

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Для оптимизации процесса получения сорбционного материала необходимо понимать механизм взаимодействия сорбента с сорбатом. Классические лабораторные методы исследуют преимущественно поверхность образца и дают недостаточно информации о механизмах взаимодействия, в то время как синхротронные методы исследований позволяют заглянуть вглубь материала и с высокой точностью получить информацию о связях атомов друг с другом в исследуемом материале. Методом EXAFS можно получить спектры поглощения в области края поглощения, с помощью которых можно оценить координационные сферы вокруг определённого атома и установить не только окружение, но и расстояния от исследуемого до окружающих. Для слоистого двойного гидроксида Zn-Al, насыщенного свинцом, были получены EXAFS-спектр и wavelet-преобразованное изображение (рис.1).

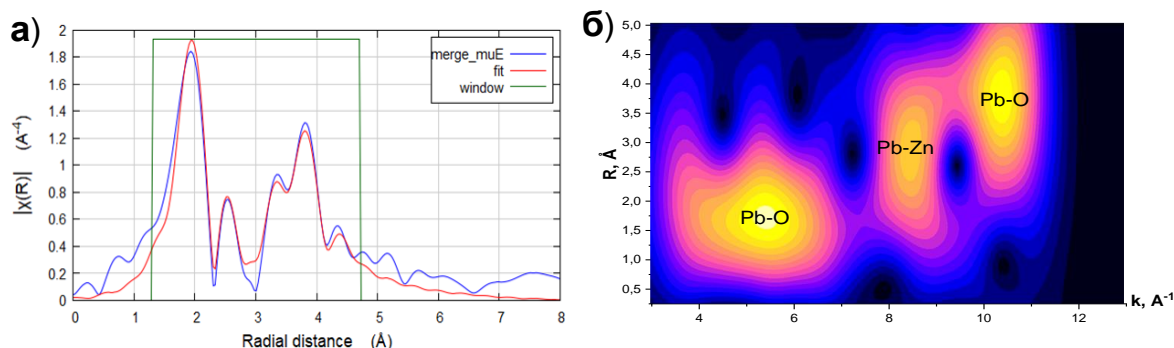


Рисунок 3 – Теоретический и экспериментальный спектр k-края цинка в R-пространстве (а) и Wavelet-преобразование экспериментального спектра

R-фактор для спектра составил 0,0225, что говорит о высокой степени точности подобранной модели. Из результатов для первой координационной сферы установлено, что только 51-52% свинца адсорбируется на СДГ, а из результатов второй – только 37%. Все остальные пути рассеивания относятся к фазе Pb(OH)Cl.

Работа выполнена в рамках Государственного Задания Министерства науки и высшего образования № FZNS-2024-0013.

ВЫЯВЛЕНИЕ МОДУЛЯЦИЙ МЕЖПЛОСКОСТНЫХ РАССТОЯНИЙ КОРОТКОПЕРИОДНОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ $\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y/\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

*A. P. Решетняк¹, P. Л. Волков¹, Н. И. Боргардт¹, M. J. Hernández²,
M. A. Pampillon², B. J. García²*

¹ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград*

² *Electronics and Semiconductors Group (ElySe), Department of Applied Physics, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain*

Короткопериодные сверхрешетки (КПСР), содержащие эпитаксиальные слои, такие как $\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y$ и $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$, применяются в оптоэлектронике и фотоэлектрических приложениях. Для характеристики выращенных слоев используется просвечивающая электронная микроскопия, которая позволяет изучать вариации межплоскостных расстояний анализируемых слоев.

Образец КПСР $(\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y)_m/(\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x)_n$ с параметрами $x = 0,04$, $y = 0,17$ и $m/n = 6/18$, заданными при росте, выращивался на подложке Si(001) с буферным слоем GaP методом химически-пучковой эпитаксии на установке Riber СВЕ32. Тонкая фольга приготавливалась на электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650 и исследовалась на просвечивающем электронном микроскопе Titan Themis 200.

На рис. 1а показано светлопольное изображение, демонстрирующее структуру КПСР. Для высокоразрешающего изображения, полученного методом просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ), был построен усредненный профиль интенсивности вдоль оси y (рис. 1б). Из рис. 1в и 1г видно, что значения $d_{\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y}$ и $d_{\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x}$ различаются в исследуемых слоях. Путем измерения величин l_1 и l_2 между тремя соседними максимумами были вычислены средние значения межплоскостных расстояний в слоях $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ и $\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y$, равные 0,2705 нм и 0,2769 нм соответственно.

Таким образом, получение и обработка высокоразрешающих ПРЭМ-изображений позволили оценить вариации межплоскостных расстояний в соседних слоях сверхрешетки вдоль направления ее роста.

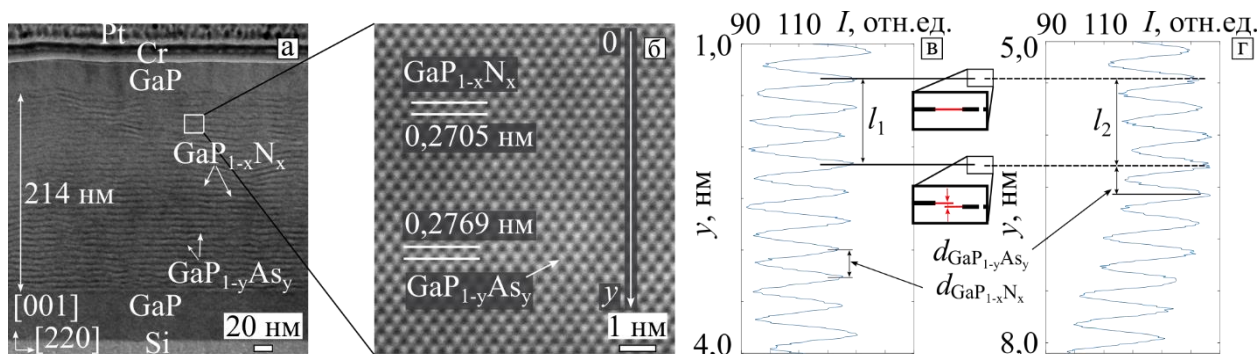


Рис. 1. Светлопольное (а) и высокоразрешающее ПРЭМ изображения КПСР (б), профили интенсивности для слоев $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ и $\text{GaP}_{1-y}\text{As}_y$ сверхрешетки (в, г)

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ Si и SiO₂ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ В КРАЕВОМ РЕЖИМЕ

А.В. Румянцев, Н.И. Боргардт

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Метод фокусированного ионного пучка (ФИП) является эффективным инструментом для формирования микро- и наноструктур. Одним из его недостатков является имплантация атомов пучка в материал образца. В [1] было показано, что для Si данный эффект можно минимизировать с использованием стратегии построчного сканирования в краевом режиме воздействия пучка за счет происходящего при этом вторичного распыления атомами, выбитыми ионным пучком с почти вертикальной боковой стенки. В данной работе этот процесс сравнивается для подложек Si и SiO₂ путем расчетов методом Монте-Карло (МК) в пакете RustBCA [2].

Поскольку вычисления показали, что форма профилей получаемых при распылении Si и SiO₂ практически идентична, в двух случаях МК-моделирования использовался профиль, полученный для Si с параметрами, приведенными в [1]. На Рис. 1а, б показаны траектории, участвующих в процессе распыления Si (а) и SiO₂ (б) частиц, а также их распределения вдоль оси x . В обоих случаях значительное число атомов распыляется вдали от места воздействия ФИП. Коэффициенты вторичного распыления находились как число атомов, распыленных левее точки $x=-0.2$ мкм и составили $Y^{(s)}_{Si}=2.0$ и $Y^{(s)}_{SiO_2}=2.4$, что сравнимо с соответствующими значениями для нормального падения первичного пучка. Таким образом, эффективность вторичного распыления для SiO₂ сопоставима с Si, несмотря на меньшую массу атомов О.

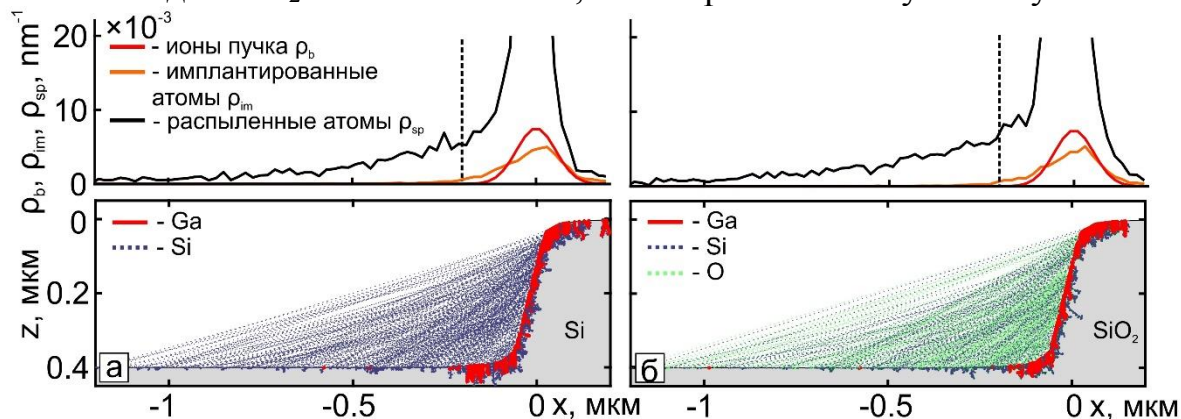


Рис. 1. Изображения распыляемой поверхности Si (а) и SiO₂ (б) с траекториями ионов Ga, выбитых атомов Si и О (внизу). Распределения участвующих в процессе частиц (вверху).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 23-19-00649).

1. Rumyantsev A. V., Borgardt N. I., Volkov R. L. Nanoscale. 17, 21141 (2025).
2. Drobny J. T., Curreli D. J. Open Source Softw. 6, 3298 (2021).

ОПТИЧЕСКАЯ СХЕМА СТАНЦИИ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОБЛАСТИ И ЕЕ РЕАЛИЗАЦИЯ В ТНК ЗЕЛЕНОГРАД

С.С. Савин¹, А.А. Велигжанин¹, А.Л. Тригуб¹, Р.Г. Чумаков¹, Е.Е. Сурикова¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Предложена оптическая схема станции спектроскопии, функционирующей в мягком рентгеновском диапазоне, и ее реализации в рамках федеральной научно-технической программы, предполагающей модификацию ТНК Зеленоград и его ввода в эксплуатацию для решения актуальных задач отечественной литографии.

Современные литографические технологии с высоким пространственным разрешением предусматривают использование излучения в области экстремального ультрафиолета. Это требует создания новых инструментов, способных обеспечить высокое разрешение и достаточный поток фотонов на образце для эффективного исследования химического состава материалов, критически важных для литографических процессов. В качестве такого инструмента выступает специализированная станция спектроскопии поглощения в мягком рентгеновском диапазоне.

Характеристики предложенной оптической схемы: разрешение $E/\Delta E > 1500$, поток $\Phi > 7.5 \cdot 10^{11}$, ф/с/100мА, площадь пучка $S = 0.2153 \cdot 0.0165$.

В качестве основных экспериментальных методов на станции предполагается использование методов спектроскопии рентгеновского поглощения полного, частичного электронного и флуоресцентного выхода, а также рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Энергетическое разрешение и поток фотонов для доступного спектрального диапазона излучения представлены на рисунке.

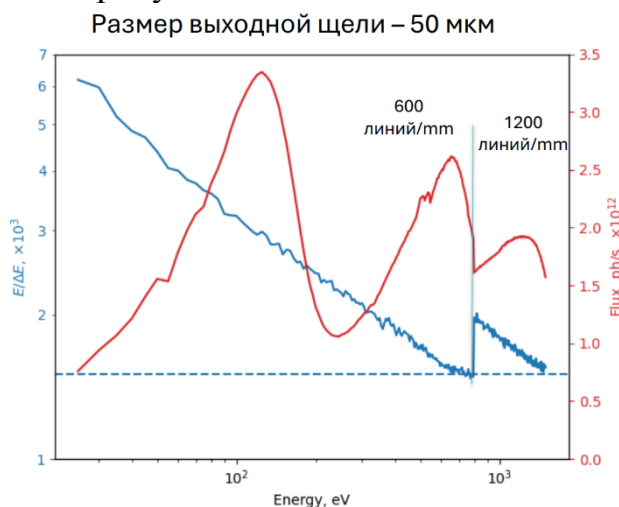


Рисунок – Распределение потока (красным) и разрешения (синим) в фокальной плоскости установки

ФРАГМЕНТАЦИЯ ЛОКАЛЬНОГО АТОМАРНОГО ОКРУЖЕНИЯ С ЦЕЛЮ ЯВНОГО УЧЕТА ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СПЕКТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

С.С. Савин¹, А.Л. Тригуб¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Методология явного учета тепловых колебаний при моделировании спектров рентгеновского поглощения в EXAFS-диапазоне в первом приближении показывает свою эффективность для уранил-карбонатных комплексов $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$. В основе методики лежит фрагментация локального атомарного окружения на отдельные группы атомов. Применение молекулярно-динамических методов к фрагментам позволяет существенно снизить количество независимых варьируемых параметров, участвующих в выражении EXAFS и достичь высокого уровня сходимости (рисунок 1).

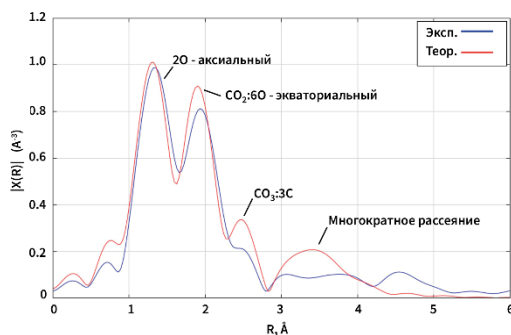


Рисунок 4 – Теоретический и экспериментальный EXAFS-спектры $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$

Явный учет смоделированного теплового движения атомов локального окружения требует оптимизации пересчета волновых функций фотоэлектронов, зависящих от длины звеньев путей рассеяния и углов между ними. Изменение углов в трехкратном пути рассеяния требует пересчета фазы фотоэлектронной волны, в то время как при сохранении углов достаточно использовать коррекцию на измененную длину полного многократного пути рассеяния (рисунок 2, 3).

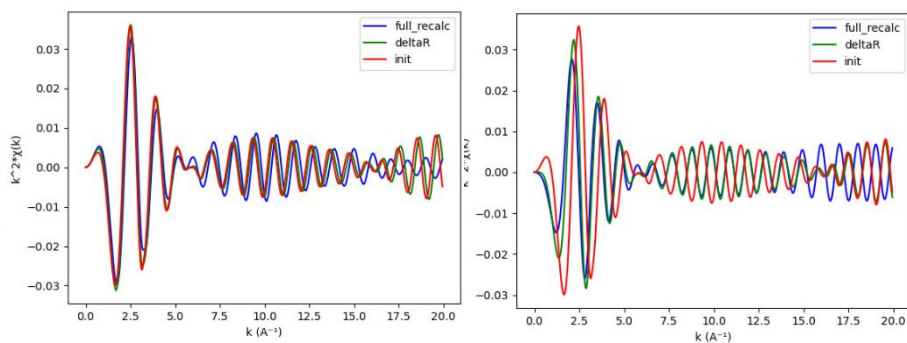


Рисунок 5 – Многократный путь рассеяния Me-O-C. Слева: углы Me-O-C изменены, справа: углы Me-O-C сохранены. Фаза функции, пересчитанной полностью (синим) и с помощью введения коррекции на изменение межатомного расстояния (зеленым), отличаются в первом случае и совпадают во втором.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ИСХОДНЫХ И ОБЛУЧЕННЫХ В РАСПЛАВЕ ПОЛИМЕР-ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ ПТФЭ/ПОБ И ПТФЭ/ПЭЭК

Н.В. Садовская, В.Н. Баранова, А.С. Авилов

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Недостатки политетрафторэтилена (ПТФЭ) связаны с его высокой ползучестью, низкой износостойкостью. Для улучшения механических и трибологических свойств получают композиты с различными порошковыми наполнителями (углеволокно, стекловолокно, кокс, бронза и др.). Однако, изделия, изготовленные из таких композитов, имеют достаточно высокую пористость и низкую прочность. В последние годы частичному решению этих проблем способствует создание полимер-полимерных композитов ПТФЭ/ПОБ и ПТФЭ/ПЭЭК. Полимеры ПОБ (полиоксибензоил) и ПЭЭК (полиэфирэфиркетон) являются высокоэффективными полимерами, устойчивыми к экстремальным температурным и механическим нагрузкам. Кроме того, ранее нами было показано [1], что гамма-облучение в расплаве композитов ПТФЭ с порошковыми наполнителями приводит к значительному улучшению их свойств, при этом определяющую роль играло изменение надмолекулярной структуры ПТФЭ.

Целью работы является характеристика надмолекулярной структуры композитов ПТФЭ/ПОБ и ПТФЭ/ПЭЭК до и после воздействия гамма-излучения при температуре выше температуры плавления кристаллитов ПТФЭ.

Морфологию надмолекулярной структуры исходных и облученных гамма-квантами ^{60}Co дозой 200 кГр композитов ПТФЭ/ПОБ и ПТФЭ/ПЭЭК исследовали методом растровой электронной микроскопии. Использовали растровый электронный микроскоп высокого разрешения с холодным автоэмиссионным катодом JSM 7500F фирмы JEOL (Япония). Исследования проводили в режиме низкоэнергетических вторичных электронов. При ускоряющем напряжении 5 кВ разрешение составляло 5 нм.

Показано, что после гамма-облучения надмолекулярная структура полимера ПТФЭ претерпевает кардинальные изменения: происходит переход от ламеллярной к фибриллярной с центрально симметричной упаковкой фибрилл, при этом частицы ПОБ и ПЭЭК становятся центрами структурообразования, смачиваемость частиц значительно улучшается, пористость снижается, плотность возрастает.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». Авторы выражают искреннюю благодарность ООО «НПП «Арфлон» за предоставленные для исследования образцы.

1. Н.В. Садовская, А.Ю. Обвинцев и др. Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 1. 91. (2016).

СИНТЕЗ И МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА НА НАНОЧАСТИЦАХ МЕТАЛЛОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

*Ю.А. Саламатов¹, Е.А. Кравцов¹, Ю.В. Корх¹, Ю.С. Поносов¹,
М. А. Уймин¹, В.В. Матюхов¹*

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620137*

Одним из широко используемых видов наноматериалов являются нанокристаллические порошки, которые получают практически из любых твёрдых веществ.

В настоящей работе исследуются морфологические свойства графена, синтезированного на нанопорошках никеля, сапфира и их смеси. Показано наличие зависимости этих свойств от метода получения наночастиц и их размеров. Определены условия синтеза, позволяющие получить графеновые оболочки с высоким структурным совершенством.

Размеры наночастиц Ni и Al₂O₃ варьировались в интервале от 15 до 25 нм и были получены методом газофазного синтеза. Графеновое покрытие было получено методом химического осаждения из газовой фазы. Образцы исследовались методом рамановской спектроскопии.

Нанопорошки использовались как в насыпном, так и в спрессованном виде. При высоких температурах порошок никеля спекался. Чтобы предотвратить данный эффект использовалась смесь наночастиц Ni-NiO с наночастицами сапфира (Al₂O₃) в соотношении 1:3. Но рентгеновские и магнитометрические данные указывают на формирование фазы Ni₃Al в такой смеси во время синтеза графена. Причины появления данной фазы пока не до конца ясны. Установлено, что полностью инертным в отношении никеля является разбавитель из порошка наноалмаза. Порошок оксида алюминия может быть использован для других металлов (Fe, Co), т.к. в этих случаях «паразитных» фаз обнаружено не было.

На металлических наночастицах образуется однослойный или двухслойный, практический бездефектный графен, что подтверждается результатами рамановской спектроскопии. На диэлектрических наночастицах Al₂O₃ наблюдается высокая плотность дефектов графена, что соответствует результатам, полученным для графена на планарной сапфировой подложке [1].

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (тема «Спин», № 122021000036-3).

1. H.J. Song, M. Son, C. Park, et al. // *Nanoscale*. 2012. Vol. 4. P. 3050–3054

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЫСУШИВАНИЯ НА СОСТАВ НАНОЧАСТИЦ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ XPS И XANES

*С.И. Сальков¹, С.С. Титова¹, Л.А. Осминкина², У.А. Цурикова², Р.Г. Чумаков³,
А.М. Лебедев³, Ю.С. Какулия¹, Е.А. Беликов¹, А.А. Синельников¹, Е.В. Паринова¹,
О.А. Чувенкова¹, С.Ю. Турищев¹*

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва

Кремниевые наночастицы могут применяться в качестве носителей для адресной доставки лекарств. Наночастицы пористого кремния (PSi NPs) обладают развитой поверхностью. Свойства PSi NPs во многом определяются, в том числе способом подготовки наночастиц. Для использования в биомедицине важным остается повторяемость и контроль элементного и структурного состава синтезируемых структур.

Для получения информации об элементном составе объектов с развитой поверхностью использовался метод РФЭС на спектрометре Specs, оснащенный полусферическим анализатором Phoibos 150 с монохроматическим источником рентгеновского Al K α излучения (1486.7 эВ), в НИЦ "Курчатовский институт" (г. Москва). Энергетическое разрешение составляло 0.1 эВ, глубина анализа ~ 3 нм. В работе представлены полученные в результате исследований обзорные спектры и спектры остовных уровней (Si 2p, C 1s, O 1s) в высоком разрешении.

Получены спектры XANES (X-ray adsorption near edge structure – ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения) на станции НАНОФЭС синхротрона «КИСИ -Курчатов». Глубина информативного слоя составляла ~ 5 нм для Si L_{2,3} спектров. Полученные данные представлены в сопоставлении с информацией о эталонных объектах.

Благодарности: исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-12-00413 и поддержано Министерством науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2025-455 в части методических вопросов синхротронных исследований.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ В СМЕКТИЧЕСКИХ МНОГОСЛОЙКАХ: ПЕРЕХОД ОТ КИНЕМАТИЧЕСКОГО К ДИНАМИЧЕСКОМУ РЕЖИМУ РАССЕЯНИЯ

В.В. Самсонов^{1,2}, Б.И. Островский^{1,3}

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

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

³Институт физики твёрдого тела, РАН, Черноголовка

Брэгговские зеркала, традиционно изготавливаемые на основе периодических структур из неорганических материалов, обеспечивающих высокую отражательную способность, являются важным элементом рентгеновской оптики. Свободно подвешенные смектические плёнки (СПСП) жидких кристаллов (ЖК) также могут рассматриваться как кандидаты для использования в рентгеновских оптических компонентах. С использованием эластомеров СПСП могут приблизиться по своим отражательным характеристикам к традиционным неорганическими зеркалам, при этом обладая уникальной гибкостью и возможностью тонкой настройки свойств.

В данной работе исследуются свойства многослойных периодических структур, ЖК плёнок. В качестве объекта рассматривается СПСП многослойка из 80-ти слоёв материала 4О.8. Результаты анализа данных, полученных с помощью синхротрона, показали, что практически вся кривая отражательной способности, включая первый порядок дифракции, может быть аппроксимирована с помощью модели, основанной на кинематической теории дифракции. То есть толщина такой плёнки (около 220 нм) оказывается недостаточной для проявления динамических эффектов.

В настоящей работе исследуется переход от кинематического к динамическому режиму рентгеновской дифракции на примере СПСП. Развивается подход, основанный на сравнении полуширин первых брэгговских пиков, рассчитанных в рамках двух теорий. На основе этого подхода выведен аналитический критерий, определяющий минимальное число слоёв, при котором для точного описания отражательных свойств требуется переход к динамической теории. Используя структурные параметры, полученные путём аппроксимации экспериментальных данных, были проведены численные эксперименты с большим диапазоном слоёв, подтвердившие справедливость критерия. Полученные результаты подчеркивают перспективность применения СПСП в рентгеновской оптике и вносят вклад в понимание границ применимости кинематической и динамической теорий дифракции.

Детали исследования опубликованы [1] и будут представлены на конференции. Исследование было поддержано грантом Российского научного фонда № 23-12-00200. Авторы выражают благодарность Константину Николаеву и Сергею Якунину за их вклад в проект.

1. V.V. Samsonov, K.V. Nikolaev, B.I. Ostrovskii and S.N. Yakunin (2025). J. Appl. Cryst. 58, <https://doi.org/10.1107/S1600576725008076>.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ $RFe_{11}Ti$ ($R = Y, Gd$) МЕТОДАМИ МАГНИТООПТИЧЕСКОЙ И МАГНИТНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Л.А. Самсонова¹, С.Д. Сметанникова¹, А.И. Синкевич¹, Е.М. Семенова¹,
А.М. Гусева¹

¹ Тверской государственный университет, Тверь

С развитием современной электроники, а также зеленой энергетики, появился запрос на высокоэнергоемкие постоянные магниты на основе функциональных материалов с уменьшенным количеством редкоземельного элемента в составе, или полным его отсутствием. В связи с этим возрос интерес к соединениям системы $RFe_{11}Ti$ (R – РЗМ) с кристаллической структурой типа $ThMn_{12}$.

Структурные и магнитные свойства обозначенных соединений достаточно подробно изучены в литературе. Они обладают относительно высокими значениями температуры Кюри и намагниченности насыщения [1], а также имеют магнитокристаллическую анизотропию типа «легкая ось» при комнатной температуре с положительной первой константой магнитокристаллической анизотропии $K_1 > 0$ для практически всех соединений системы. Не смотря на это, исследованию магнитной доменной структуры данных соединений уделено мало внимания в научной литературе.

В данной работе проведено комплексное исследование микромагнитной структуры соединений $YFe_{11}Ti$ с немагнитным ионом иттрия, а также $GdFe_{11}Ti$. Магнитная доменная структура исследована методом магнитооптического эффекта Керра на оптическом металлографическом микроскопе *Neophot 30*, а также методом магнитно-силовой микроскопии, реализованном на базе сканирующего зондового микроскопа *SolverNext (NT-MDT)*.

На основе полученных экспериментальных изображений магнитной доменной структуры был проведен качественный и количественный анализ. На базе магнитооптических и магнитно-силовых изображений были рассчитаны микромагнитные параметры средней ширины доменов и поверхностной плотности энергии доменных границ [2].

Не смотря на то, что для обоих соединений на базисной плоскости выявляется доменная структура с конфигурацией «звездочек», характерной для высокоанизотропных одноосных магнетиков, закономерности формирования приповерхностных структур различны для соединения с иттрием и гадолинием. Анализ особенностей формирования приповерхностных структур проведен в рамках традиционного подхода фрактальной геометрии, а также в рамках авторского метода анализа полей рассеяния и расчета параметра вложенности структуры.

1. G. C. Hadjipanayis, et al., Engineering 6, 141 (2020).
2. R. Bodenberger, A. Hubert, Phys. Status Solidi (a) 44, K7 (1977).

КОРРЕКЦИЯ НЕЛИНЕЙНОСТИ СЧЁТА ЕДИНИЧНЫХ ФОТОНОВ ДЕТЕКТОРА НА БАЗЕ ПЗС-КАМЕРЫ ДЛЯ ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

А.И. Сафонов¹, С.Н. Якунин¹, К.В. Николаев¹

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Использование сверхъярких источников синхротронного излучения с микро- и нано-фокусировкой позволяет проводить локальные исследования малых (наноразмерных) объектов для трехмерной диагностики и картирования объектов. Наиболее прогрессивным подходом к проведению таких исследований, в том числе с временным разрешением, является съемка «рентгеновского кино», то есть покадровая экспозиция.

Одним из наиболее перспективных методов локальной диагностики слоистых и трёхмерных структур является бессканирующий подход к методу коселевских стоячих рентгеновских волн (СРВ). Такая реализация метода СРВ предполагает сбор данных под скользящими углами с помощью детектора, обладающего одновременно высокими пространственным и энергетическим разрешениями.

Представленный в работе алгоритм реализует позиционно-чувствительный энергодисперсионный анализатор, что делает возможным проведение таких экспериментов с использованием двумерных рентгеновских ПЗС-камер. С целью потоковой постановки экспериментов бессканирующим методом коселевских СРВ были усовершенствованы и оптимизированы алгоритмы сбора и обработки данных позиционно-чувствительных энергодисперсионных детекторов.

Для повышения эффективности счёта и точности измерений, а также сокращения длительности проведения экспериментов был разработан алгоритм восстановления флуоресцентных спектров. Алгоритм основан на теореме о свёртке и зависимости размеров фотонно-индуцированных зарядовых облаков от количества экспонируемых фотонов и позволяет устранить искажения в количестве отсчетов в каналах детектора. Показано, что применение разработанного алгоритма на порядок уменьшает длительность экспозиции для набора данных

Апробация разработанного программно-аппаратного комплекса осуществлялась на реальном флуоресцентном сигнале слоистых систем W-Ti-W.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК ИЗ РАБОЧИХ ПЛАЗМЕННЫХ РАЗРЯДОВ ТОКАМАКА Т-15 МД

Н.Ю. Свечников¹, И.И. Архипов^{1,2}, С.А. Грашин¹, Р.Г. Чумаков¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

²ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва

Методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на станции НАНОФЭС (НИЦ КИ) проведены исследования электронной структуры продуктов эрозии первой стенки токамака Т-15 МД, т.е. тонких (≤ 10 нм) аморфных углеводородных пленок $\text{CH}_x\text{-Me}$ (примеси), переосажденных из плазменных рабочих Н-разрядов в кампании октябрь–декабрь 2024 г. Пленки осаждались на 6 зондов – из нерж. стали (SS), W и Si. Зонды были размещены в двух противоположных сечениях, № 2 (снаружи плазменного тора) и №12 (внутри).

Получены отличия данных спектров от спектров из первой кампании Т-15 МД [1]. Так, отмечено уменьшение в пленке 12W примесей оксидов Fe2p до 6.4 ат.%, относительно C1s), Cr2p до 1.5 ат.%, при росте эрозии вольфрама W4f до 14 ат.%, относительно 9.5 ат.% в [2]. Наблюдались примеси K2p (2.7 ат.%) и Na1s (6.7 ат.%), как примеси W от радиационно-стимулированной десорбции из W-подложки. Спектры валентной зоны 4-х тонких пленок имели ненулевую плотность электронных состояний $\text{DOS } E_F > 0$. Это указывает на сильную эрозию, создающую примесную проводимость, приводящую к локальным пробоям. Пленки 2Si и 2W были диэлектриками с шириной запрещенной зоны 2.1 и 2.7 эВ, соответственно, и имели низкую долю примесей Fe2p и Cu2p.

Тонкие пленки 12SS, 2SS характеризуются слабой адсорбцией CH_x на подложке из нерж. стали и высокой долей $\text{Csp}^3 \approx 0.9$. Напротив, наблюдается заметная адсорбция в 2Si, 2W. В интерфейсе 12SS, 12W и 12Si были обнаружены фазы карбидов FeC, WC, SiC, соответственно.

Полученные результаты указывают на важность спектроскопического контроля структуры пленок, что позволяет следить за стабильностью и изменением плазменных условий, а также способствуют тестированию материалов для ТЯ реактора в рамках программы ИТЭР.

1. И.И. Архипов, Р.Х. Залавутдинов, С.А. Грашин, Н.Ю. Свечников, Р.Г. Чумаков, А.В. Лукашевич. Материалы XXVIII международной конференции «Взаимодействие плазмы с поверхностью». Москва, 30-31 января 2025 г.: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2025, 93 с. С.24.

2. V.G. Stankevich, N.Y. Svechnikov, B.N. Kolbasov. Symmetry, **15**, 623 (2023).

СТРУКТУРА ОЛИГОПЕПТИДАЗЫ В В КРИСТАЛЛИЗАЦИОННЫХ РАСТВОРАХ

*В.Ю. Свечникова^{1,2}, Ю.В. Кордонская¹, П.В. Конарев^{1,2}, Г.С. Петерс¹,
А.В. Власкина¹, Д.Е. Петренко¹, Т.В. Ракитина^{1,3}, М.А. Марченкова^{1,2}*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Южный федеральный университет

³ Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и
Ю.А. Овчинникова РАН

Олигопептидаза В (OpV) – это двухдоменная трипсиноподобная пептидаза, выделенная из паразитических простейших и бактерий.

Два домена OpV, соединенные шарнирным типом, представляют собой каталитический α/β -гидролазный домен, содержащий каталитический и субстрат-связывающий центры, и β -пропеллерный домен, который закрывает каталитический домен, ограничивая доступ к активному центру крупных белковых субстратов [1]. В каталитически-неактивной (открытой) конформации, домены и остатки каталитической триады разобщены. В промежуточной конформации наблюдается сближение доменов без сборки каталитической триады, в каталитически-активной (закрытой) – домены сближены, и каталитическая триада собрана.

В результате молекулярно-динамического моделирования была оценена стабильность ряда мономерных структур OpV: открытая, промежуточная (PDB ID: 7zjz) и закрытые (PDB ID: 7uwr, 8ono) конформации, а также модель, полученная из (8ono) с помощью Sreflex (Rc), в которой α/β домен частично разупорядочен. Открытая форма с течением времени переходит в более компактную (7zjz) с последующим восстановлением в размерах. Наибольшая стабильность показана для моделей 8ono и Rc.

В результате анализа кривых малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) для белка *в буферном растворе* с высоким уровнем достоверности ($\chi^2=2.85$) определено, что экспериментальные данные соответствуют модели *открытой конформации* OpV. Напротив, *в кристаллизационном растворе* кривые МУРР наилучшим образом описываются моделями *частично разупорядоченной* (Rc, $\chi^2=6$) и *закрытой* (7uwr, $\chi^2=17$) конформаций, в то время как остальные структуры показали значительно худшее совпадение ($\chi^2=22-60$).

Показано, что осадитель закрывает форму фермента, что дает возможность молекуле кристаллизоваться. Подвижность отдельных участков доменной структуры является препятствием для каталитической активности фермента даже при относительно высокой «закрытости» его конформации.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. V. Fülöp, Z. Böcskei, et al., Cell J., 94 (1998).

МАГНИТНАЯ ВЯЗКОСТЬ И ЭФФЕКТ ТЕРМИЧЕСКОГО НАМАГНИЧИВАНИЯ В СПЛАВАХ $Gd_{1-x}Sm_xCo_3Cu_2$

Е.М. Семенова, В.Е. Севрюков, А.Ю. Карпенков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», Тверь

В работе представлены результаты комплексного экспериментального исследования микроструктуры и магнитных свойств образцов сплавов $Gd_{1-x}Sm_xCo_3Cu_2$ ($x=0,1-0,9$) с различным содержанием самария и гадолиния. Исходные сплавы были получены из высокочистых материалов методом индукционной плавки в атмосфере аргона и после выплавки были подвергнуты гомогенизирующему отжигу при $1050^{\circ}C$ в течение 4 часов. Магнитные измерения выполнялись в открытой магнитной цепи методом вибрационного магнитометра в полях до 2,5 Тл на образцах сферической формы вдоль «оси легкого намагничивания». Исследования микроструктуры выполнены методами оптической, электронной и атомно-силовой микроскопии.

Ранее [1] было показано, что в сплавах $Gd_{1-x}Sm_xCo_3Cu_2$ в результате отжигов формируется высококоэрцитивное состояние, которое обеспечивается регулярной микроструктурой и реализуется по механизму задержки смещения доменных границ на структурных неоднородностях. Максимальная коэрцитивная сила 0,94 Тл была достигнута на составе $Gd_{0,6}Sm_{0,4}Co_3Cu_2$. [1] Однако, так же как на интерметаллидах $SmCo_3Cu_2$ [2], на образцах рассматриваемых сплавов проявляется магнитная вязкость (последствие).

В данном исследовании анализируется магнитная вязкость в сплавах $Gd_{1-x}Sm_xCo_3Cu_2$ при их перемагничивании в обратных магнитных полях, близких по значению к коэрцитивной силе образцов. Магнитное последствие выражается в убывании намагниченности с течением времени при воздействии неизменного внешнего и/или собственного размагничивающего магнитного поля. Обсуждается взаимосвязь магнитной вязкости со структурным состоянием сплавов и их локальными микромагнитными параметрами. Показано, что в рассматриваемых сплавах, размагниченных в обратном поле, обнаруживается эффект термического намагничивания.

Исследования выполнены на оборудовании ЦКП ТвГУ при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

1. Севрюков В.Е., и др. // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия. 5, 2350501 (2023).
2. Espina-Hernández J. H. et al. //Advanced Materials Research. 68, 12-20 (2009).

РАСЧЕТ СИСТЕМЫ ОХЛАЖДЕНИЯ ФОКУСИРУЮЩЕГО РЕНТГЕНОВСКОГО ЗЕРКАЛА ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

А.А. Сенкевич, Р.Г. Чумаков

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

На сегодняшний день наиболее перспективными источниками синхротронного излучения являются вставные устройства – вигглеры и ондуляторы, дальнейшее развитие которых привело к созданию лазеров на свободных электронах (ЛСЭ). Излучение ЛСЭ обладает малой угловой расходимостью, однако, исследуемый образец может находиться в нескольких сотнях метров от источника, что приводит к необходимости использовать фокусирующую оптику. Поскольку такое излучение характеризуется экстремально высокими мощностями, только зеркала полного внешнего отражения за счет малых углов падения могут взаимодействовать с ним. Но из-за импульсного характера работы лазера для оптики, взаимодействующей с таким излучением, со временем возможна деградация рабочей поверхности за счет остаточных деформаций. Поэтому разработка рациональной системы охлаждения зеркала становится актуальной задачей.

В представленной работе выполнялся комплексный расчет системы охлаждения разрабатываемого зеркала. В частности, было выполнено моделирование пучка излучения ЛСЭ, получены его параметры и проведена трассировка лучей, что позволило определить профиль распределения плотности мощности на поверхности зеркала. Найден оптимальный угол падения рассчитанного излучения, на основе чего определены параметры рентгеновского зеркала – оптимальный материал покрытия, радиусы кривизны рабочей поверхности. Для полученного распределения плотности поглощенной мощности было проведено моделирование нестационарного поля температуры и выполнен расчет термических деформаций. Описанные инженерные расчеты были проведены для двух типов систем охлаждения – водяного и криогенного. Для полученных данных выполнен сравнительный анализ величин термических деформаций, на основании чего был определен оптимальный вариант системы охлаждения.

РАЗВИТИЕ АППАРАТНОЙ БАЗЫ СТЕНДА РЕФЛЕКТОМЕТРИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА РЕАКТОРЕ ИР-8

*Е.О. Серов¹, П.С. Савченков^{1,2}, А.В. Рогачев¹,
А.И. Калюканов¹, В.И. Боднарчук^{1,3,4}, А.В. Белушкин^{1,3,5}*

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

³Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

⁴Государственный университет «Дубна», Дубна

⁵Казанский федеральный университет, Казань

Проведена комплексная модернизация стенда рефлектометрии поляризованных нейтронов «НЕПТУН», расположенного на пятом горизонтальном экспериментальном канале реактора ИР-8. Ключевые усовершенствования включают замену монохроматора, модификацию оптической схемы, усиление защиты и внедрение системы автоматизации.

Существенной модернизации подвергся узел монохроматора: медный кристалл Cu(111) был заменён на HOPG(002). В системе позиционирования были заменены приводы и добавлена ось юстировки. Модернизация позволила повысить точность позиционирования и ускорить процесс юстировки кристалла относительно полихроматического пучка нейтронов.

В оптическую схему добавлены две регулируемые нейтронные диафрагмы. Были разработаны и созданы новые узлы поляризатора и образца, обеспечивающие ориентацию суперзеркал (образцов) по трём осям. Для снижения фонового излучения на позиционно-чувствительном детекторе создан экранированный пролётный канал от образца до детектора, состоящий из борированной резины и листового кадмия.

Одним из наиболее значимых улучшений стала интеграция аппаратуры стенда (позиционно-чувствительный детектор, электромеханические позиционеры, спин-флиппер) в единую систему управления на базе автоматической системы управления TANGO. Это позволило проводить длительные эксперименты в полуавтоматическом режиме с оперативной обработкой данных в реальном времени.

В докладе будут представлены результаты модернизации и новые экспериментальные возможности установки.

РЕНТГЕНОВСКИЕ И СИНХРОТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАФИТИЗИРОВАННЫХ БИОМАТЕРИАЛОВ

*В.Н. Сивков¹, О.В. Петрова¹, Д.В. Сивков¹, К.А. Бакина¹, Р.Н. Скандаков¹,
В.О. Рутковский¹, У.С. Третьякова^{1,2}, Е.А. Степучев^{1,2}, А.М. Лебедев³,
Р.Г. Чумаков³, С.В. Некипелов^{1,2}*

¹ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

²Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина

³НИЦ «Курчатовский институт»

Моноуглеродные соединения, такие как графит, графен, многостенные углеродные нанотрубки, широко используются для получения новых наноструктурированных материалов. Альтернативой нанотрубкам являются графитизированные природные биоматериалы, которые имеют разветвленную архитектуру с большой площадью внешней поверхности, изучение которых является задачей биомиметики — современного научного направления по заимствованию природных структур и реализации их в виде оригинальных материалов путем термической обработки в инертных средах. Так графитизация губчатого каркаса морских губок в аргоне при температурах до 1200°C приводит к образованию трехмерной нанопористой структуры турбостратного графита, которая оказалась перспективной для формирования композиционных материалов для создания катализаторов химических процессов [1]. Проведенные нами исследования различных видов биоматериалов показали, что альтернативой морским губкам является ягель, или так называемый «олений мох» («reindeer moss»), широко распространенный на территории России, который графитизируется в процессе термической обработки с сохранением исходной 3D структуры с большой пористостью и площадью поверхности, стойкой к агрессивным средам, механическим и термическим воздействиям. В докладе обсуждаются результаты NEXAFS и XPS исследований с использованием синхротронного излучения канала НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и нанотехнологий [2] и проводится сравнительный анализ структуры спектров наноразмерных моноуглеродных соединений и графитизированных биоматериалов, а также нанокомпозитов на их основе.

Исследование выполнено в рамках госзадания Коми НЦ УрО РАН (№125020501562-1), а также при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках Соглашения № 075-15-2025-455 от 26.05.2025 г

1. I. Petrenko, A.P. Summers et al., *Sci. Adv.* 5 (2019) eaax2805.
2. A. M. Lebedev, K. A. Menshikov, et al. , *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 15, 1039 (2021).

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВОДОРОДНОГО НАСОСА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

*М.В. Синяков^{1,2}, Д.Д. Спасов^{1,3}, М.В. Меншарапов¹, С.В. Нагорный¹,
Н.А. Иванова⁴, Б.В. Иванов⁵*

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

² Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

³ Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт»

⁴ АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского»

⁵ Институт ядерной физики, 050032 Казахстан, г. Алматы, ул. Ибрагимова, 3/1.

В условиях систем топливного цикла термоядерного синтеза может применяться электрохимический водородный насос (ЭВН) на основе протонообменной мембраны (ПОМ). В рамках работы исследованы структурные свойства и электрохимические характеристики облученной мембраны как ключевого элемента ЭВН с ПОМ. Четыре образца мембраны Aquivion® E98-15S были подвергнуты воздействию тормозного рентгеновского излучения с поглощенной дозой в диапазоне от 5 ± 1 Гр (согласно предыдущему исследованию [1]) до 5000 ± 100 Гр.

Показано, что с увеличением поглощенной дозы происходило снижение электропроводности мембран, указывая на меньшую протонную проводимость образовавшихся групп. При исследовании эффективности ЭВН с облученной и исходной мембранами в условиях повышенных температур и атмосферном давлении было выявлено незначительное различие в плотностях тока при 0.5 В, которое не превышало 5%. Однако при давлении 0.03 МПа эффективность ячейки ЭВН с облученными мембранами значительно снизилась вследствие ее пониженной способности удерживать воду и более интенсивного высыхания.

Полученные результаты демонстрируют возможность применения ЭВН с ПОМ в условиях радиационного воздействия термоядерного синтеза в различных режимах эксплуатации. Однако при интеграции ЭВН в термоядерные системы необходимо учитывать проблему высыхания мембраны в условиях низких давлений, поскольку длительное радиационное воздействие снижает влагоудерживающую способность мембраны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания № FSW-2023–0014 (Соглашение № 075-03-2023-383 от 18 января 2023 г.) в сфере научной деятельности на 2023–2025 гг.

1. Ivanova N. A. et al. Features of Electrochemical Hydrogen Pump Based on Irradiated Proton Exchange Membrane //Membranes. – 2023. – Т. 13. – №. 11. – С. 885.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ОБЪЕМНЫХ ОБРАЗЦОВ ВЫСОКО- И НИЗКОАНИЗОТРОПНЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ МАГНИТНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

С.Д. Сметанникова¹, А.И. Синкевич¹

¹ *Тверской государственный университет, Тверь*

Магнитная доменная структура (ДС) является индикатором магнитного состояния объекта. В случае объемных одноосных магнетиков, конечная конфигурация ДС может быть предсказана на основе экспериментального опыта и существующих аналитических моделей. В то же время, описание комплексности итоговой поверхностной структуры остается неполным. В настоящем исследовании предложен анализ закономерностей формирования поверхностной ДС на основе экспериментальных данных, полученных с помощью метода магнитно-силовой микроскопии (МСМ) на образцах высоко- и низкоанизотропных магнетиков.

Экспериментальное исследование методом МСМ было реализовано на базе сканирующего зондового микроскопа *SolverNext (NT-MDT)* в полуконтактном режиме. В этом случае сигнал, регистрируемый магнитным зондом, отражает поля рассеяния, создаваемые ДС образца на определенной высоте подъема. Получение серии МСМ изображений с варьирующейся высотой подъема зонда над образцом и ее последующий цифровой анализ позволяет не только реконструировать МСМ изображение на поверхности образца, но и проследить путь формирования структуры от глубины до поверхности, а также количественно оценить комплексность итоговой поверхностной ДС. Подобный метод цифрового анализа описан в работе [1].

Традиционно, комплексность ДС также оценивается методами фрактальной геометрии. Для каждого МСМ изображения из высотной серии была рассчитана фрактальная размерность с помощью цифровой бинаризации и метода подсчета коробок [2].

На основе проведенного количественного анализа были получены зависимости комплексности ДС и фрактальной размерности от высоты подъема зонда над образцом для высоко- и низкоанизотропных магнетиков. Идентичная форма полученных зависимостей демонстрирует схожесть закономерностей формирования ДС для различных соединений.

1. A. I. Sinkevich, S. D. Smetannikova, E. M. Semenova, *Micron* 199, 103911 (2025).
2. Y. Xing, et al., *J. Mater. Res. Technol.* 15, 745 (2021).

ФОКУСИРОВКА ЭЛЕКТРОНОВ В ОНДУЛЯТОРЕ С ПЕРИОДОМ 27 ММ

Н.В. Смоляков

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Актуальность этой работы возникла в связи с работой над проектом лазера на свободных электронах «СИЛА». В настоящее время ведутся интенсивные конструкторские и технологические работы по производству ондулятора на редкоземельных магнитах со стандартной плоской конфигурацией Halbach, восемь магнитов на период [1]. Длина периода 27 мм, ширина каждого магнитного блока 45 мм, высота - 14 мм, полный минимальный зазор между полюсами 12 мм. Число периодов в ондуляторе равно 58, то есть длина регулярной магнитной части ондулятора равна 1566 мм. В окрестности медианной плоскости ондулятора его магнитное поле сильно неоднородно в направлениях, ортогональных оси ондулятора Z. Амплитуда поля ондулятора растет в вертикальном направлении (ось Y) и уменьшается вдоль горизонтальной оси X по мере приближения к краям магнитных полюсов. Поэтому плоский ондулятор имеет положительную вертикальную фокусировку, а в горизонтальной (медианной) плоскости - отрицательную дефокусировку [2]. Это надо принимать во внимание при проектировании лазера на свободных электронах. Для расчета ряда параметров магнитного поля Halbach-ондулятора были написаны две компьютерные программы.

В данной работе рассмотрено фокусирующее воздействие такого ондулятора на релятивистский электронный пучок. Дифференциальные уравнения движения электрона в трехмерном синусоидальном магнитном поле ондулятора решались не стандартным методом усреднения по быстрым осцилляциям траектории электрона (сглаженное приближение), а аналитически с помощью теории возмущений вплоть до кубических слагаемых включительно по всем малым величинам. Для расчетов по этим более точным и сложным формулам написана компьютерная программа. Также написаны компьютерные программы, численно решающие методом Рунге-Кутты уравнения движения электрона в трехмерном поле ондулятора. Получено хорошее взаимное согласие результатов. Вместе с тем в ряде случаев эти новые результаты противоречат результатам, полученным в рамках сглаживающего приближения. Так, обнаружена критическая зависимость горизонтального фокусного расстояния от начального угла входа электрона в ондулятор. Различия значительные, вплоть до противоположного знака фокусирующих добавок к поперечным компонентам скорости электрона.

1. Halbach K. Nuclear Instr. Meth. 1981. V. 187. P. 109.
2. Barkov L. M. и др. Nuclear Instr. Meth. 1978. V. 152. P. 23.

СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА μ -ОКСОМОСТИКОВОГО ДИМЕРА ЖЕЛЕЗА (III) НА ОСНОВЕ ЛИГАНДА N,N'-ЭТИЛЕНБИС(3-МЕТОКСИ-САЛИЦИЛИМИНА)

Н.Г. Спицына¹, М.А. Благоев¹, А.С. Лобач¹, Г.В. Шилов¹

¹ ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка

Для исследователей в области катализа комплексы железа на основе саленового лиганда являются привлекательной альтернативой драгоценным металлам благодаря низкой токсичности и возможности легко их модифицировать [1]. В работе получен μ -оксомостиковый димер железа (III): $3[(\mu\text{-O})\{\text{Fe}^{\text{III}}(\text{3OMe-Salen})\}_2] \cdot 12\text{H}_2\text{O} \cdot 4\text{CH}_3\text{OH}$ (**1**), где salen = N,N'-этиленбис(3-метокси-салицилальдиминат), который охарактеризован комплексом физико-химических методов анализа. Синтез комплекса проводился в метаноле при нагревании в присутствии метилата натрия, как показано на рис. 1.

Комплекс **1** кристаллизуется в моноклинной пространственной группе *P2₁*. Асимметричная единица включает три независимых димера $[(\mu\text{-O})\{\text{Fe}^{\text{III}}(\text{3OMe-Salen})\}_2]$, различающихся углом поворота хелатных циклов относительно друг друга, 12 молекул воды и 3 молекулы метанола (рис. 1). Параметры элементарной ячейки при 100 К: $a=12.9283(3)$ Å, $b=12.4424(3)$ Å, $c=48.0825(12)$ Å; $\alpha=\gamma=90^\circ$, $\beta=90.140(2)^\circ$; $V=7734.48$ Å³. Средние длины связей Fe-N и Fe-O указывают на Fe(III) со $S=5/2$. Угол Fe(1)-O(1)-Fe(2) лежит в диапазоне $149.33\text{--}151.60^\circ$, тогда как расстояние между соседними ионами железа составляет ~ 3.4 Å. Методом рентгено-фазового анализа подтверждена однофазность поликристаллического образца **1**.

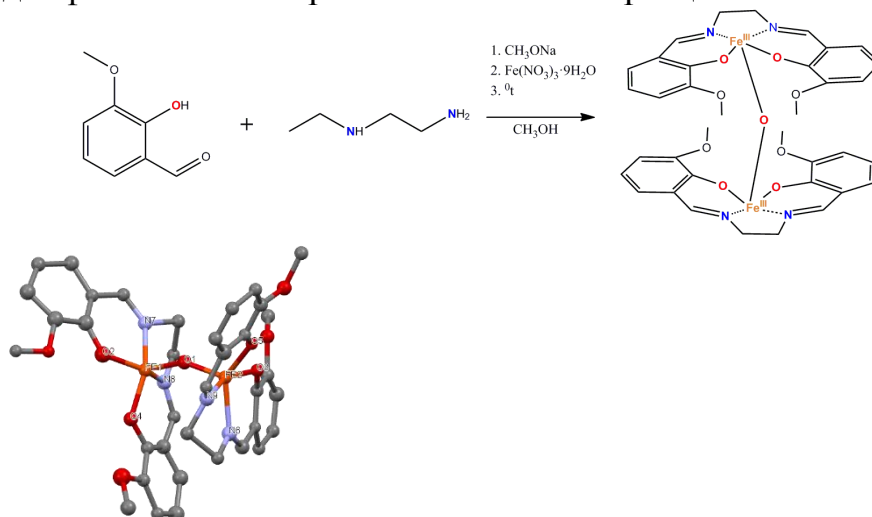


Рисунок 1. Слева: Схема синтеза комплекса **1**. Справа: Молекулярная структура димера в **1** при 100 К.

Работа выполнена по теме Государственного задания, № гос. Регистрации 124013100858-3. При выполнении работы использовалась приборная база ЦКП ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

1. T. M. Hood, S. Lau, et al., *ACS Catal.* 11841, 13, (2023).

СТРУКТУРНАЯ ГОМОЛОГИЯ В РЯДУ RF_3 ($R = \text{La-Lu}$) ПО ПАРАМЕТРУ ГОМОЛОГИЧНОСТИ «КАТИОННЫЕ ПОЛИЭДРЫ»

Е.А. Сульянова¹, Б.П. Соболев¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт»

Полученные с использованием синхротронного излучения прецизионные структурные данные для $^{61}({}^{58}\text{Ce}_{0.5}{}^{64}\text{Gd}_{0.5})\text{F}_3$ – «псевдо $^{61}\text{PmF}_3$ » [1] впервые открыли возможность изучить полный гомологический ряд из 16 RF_3 (без ScF_3) по «параметру гомологичности» – координационным полиэдрам R^{3+} и прецизионным межатомным расстояниям ($R\text{-F}$) в них. Лантаноидное сжатие приводит в $\beta\text{-HoF}_3$ к достижению минимального расстояния $(\text{F-F})_{\text{min}}$, которое не изменяется на участке ряда $R=\text{Ho-Lu}$ [2]. Эмпирический радиус аниона F^- составляет $(\text{F-F})_{\text{min}}/2 = 1.2539(16) \text{ \AA}$ [2].

Изменения типа структуры и координационных катионных полиэдров изучены при стандартных параметрах состояния (изобарно-изотермический разрез $P = 1 \text{ атм.}$, $T=293 \text{ К}$ полной T -х квази-системы “ $\text{LaF}_3\text{-LuF}_3$ ” [3]).

Координационное число (КЧ) R^{3+} в RF_3 принято равным 9. Объем полиэдра R^{3+} с КЧ=9 изменяется в ряду RF_3 ($R=\text{La-Lu}$) непрерывно. Отношение объема, занимаемого полиэдрами, к объему пустот между полиэдрами во всех $t\text{-RF}_3$ одинаково. Данная величина во всех $\beta\text{-RF}_3$ также одинакова, но больше, чем в $t\text{RF}_3$, на 5.6 %.

Морфотропное превращение $t \rightarrow \beta$ (при охлаждении) – сдвиговой фазовый переход 1 рода мартенситного типа, при котором происходит аномальное увеличение (на 5.6 % к меньшему) объема пустот между полиэдрами с КЧ=9.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт».

1. E.A. Sulyanova, B.P. Sobolev, et al., CrystEngComm. 25, 4238 (2023).
2. B.P. Sobolev, E.A. Sulyanova. Int. J. Mol. Sci. 24, 17013 (2023).
3. B.P. Sobolev. J. Solid State Chem. 312, 123163 (2022).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОННОГО РАДИУСА t - И β -«псевдо $^{61}\text{Pm}^{3+}$ » С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОЛНОЙ ЭМПИРИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИОННЫХ РАДИУСОВ ДЛЯ ТУГОПЛАВКИХ ФТОРИДОВ MF_m ($m=1, 2$) И RF_3 ($R = \text{Sc, Y, La-Lu}$)

Е.А. Сulyanova¹, Б.П. Соболев¹, Р.Д. Светогоров¹, Е.С. Куликова¹

¹НИЦ «Курчатовский институт»

Лантаноидное сжатие R^{3+} ($R = ^{58}\text{Ce}-^{71}\text{Lu}$) вызывает в RF_3 смену типа структуры LaF_3 (t) для $R = \text{Ce-Nd}$ на $\beta\text{-YF}_3$ (β). Полиморфный переход $t \rightarrow \beta$ (при охлаждении) сопровождается аномальным уменьшением плотности на $\sim 3.8\%$ [1].

Применение метода структурно-химического моделирования [2] и использование синхротронного излучения [1] позволило установить диморфизм $^{61}({}^{58}\text{Ce}_{0.5}{}^{64}\text{Gd}_{0.5})\text{F}_3$ – «псевдо $^{61}\text{PmF}_3$ » – и обосновать новую структурную классификацию RF_3 с t - и β - PmF_3 в структурной подгруппе B диморфных RF_3 .

Определение радиуса катиона «псевдо $^{61}\text{Pm}^{3+}$ » завершило разработку внутри согласованной системы радиусов катионов R^{3+} и аниона F^- в RF_3 [3]. Такая система радиусов нужна для анализа зависимостей от лантаноидного сжатия тонкой структуры и свойств RF_3 , химического родства RF_3 , прогноза фазовых диаграмм систем $\text{RF}_3\text{-}R'\text{F}_3$ и анализа изоморфизма в них, роста кристаллов $R_{1-x}R'_x\text{F}_3$ (и более сложных), анализа кластеров (обогащенных R^{3+} нанометровых «фаз»), определяющих свойства большого класса нестехиометрических флюоритовых наноструктурированных кристаллов ($M_{0.5-x}R_{0.5+x}\text{F}_{2+2x}$ с $M = \text{Li, Na, K}$ и $M_{1-x}R_x\text{F}_{2+x}$ с $M = \text{Ca, Sr, Ba, Cd}$) и изучения других вопросов химии, кристаллохимии и физики фторидных материалов с участием RF_3 .

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. E.A. Sulyanova, B.P. Sobolev, et al., CrystEngComm. 25, 4238 (2023).
2. B.P. Sobolev, E.A. Sulyanova. CrystEngComm. 24, 7602 (2022).
3. B.P. Sobolev, E.A. Sulyanova. Int. J. Mol. Sci. 24, 17080 (2023).

ПРИМЕНЕНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПОЛИМОРФНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В «ПСЕВДО $^{61}\text{PmF}_3$ » С АНОМАЛИЕЙ ПЛОТНОСТИ

Е.А. Сульянова¹, Б.П. Соболев¹, Р.Д. Светогоров¹, Е.С. Куликова¹

¹НИЦ «Курчатовский институт»

Со времени последнего исследования в 1967 г. [1] извлеченного из Манхеттенского ядерного реактора PmF_3 о структуре и свойствах этого члена химического семейства из 17 трифторидов редкоземельных элементов (РЗЭ – R) не было сведений. Переходное положение PmF_3 между структурными подгруппами A (LaF_3 - NdF_3) и B (PmF_3 - GdF_3) при его недоступности (радиоактивный распад) на долгие годы оставляло незавершенной структурную классификацию RF_3 и химическую классификацию 120 систем RF_3 - $R'\text{F}_3$ [2].

Методом рентгеноструктурного анализа *in situ* впервые установлена кристаллическая структура высокотемпературной t - (тип LaF_3) и низкотемпературной β - (тип Fe_3C) модификаций $^{61}({}^{58}\text{Ce}_{0.5}{}^{64}\text{Gd}_{0.5})\text{F}_3$ – «псевдо $^{61}\text{PmF}_3$ » вблизи температуры полиморфного превращения (ПП) $-148 \pm 5^\circ\text{C}$ [3].

Дифракционные данные высокого разрешения для мелкокристаллического β -«псевдо $^{61}\text{PmF}_3$ » получены при -148 и $+20^\circ\text{C}$ на станции Белок/РСА «КИСИ-Курчатов» с использованием длины волны 0.75 \AA . Дифракционные данные для монокристалла t -«псевдо $^{61}\text{PmF}_3$ » получены на рентгеновском дифрактометре XtaLAB Synergy-DW (Rigaku, Япония) с использованием излучения $\text{Ag-K}\alpha$.

Структурный механизм ПП $t \rightarrow \beta$ (при охлаждении) в «псевдо PmF_3 » заключается в растяжении решетки кристалла на 13 % в направлении $\langle 010 \rangle$ и сжатии в направлениях $\langle 100 \rangle$ (0.8 %) и $\langle 001 \rangle$ (0.9 %). Аномальное увеличение объема $\Delta V/V$ «псевдо PmF_3 » при ПП $t \rightarrow \beta$, рассчитанное из структурных данных [3], составило 3.8 %.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. F. Weigel, V. Scherer. *Radiochimica Acta*. 7(1), 50 (1967).
2. B.P. Sobolev. *J. Solid State Chem.* 298, 122079 (2021).
3. E.A. Sulyanova, B.P. Sobolev, et al., *CrystEngComm*. 25, 4238 (2023).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Р.В. Сундеев^{1,2,3}, А.В. Шалимова², А.А. Велигжанин⁴

¹ РТУ МИРЭА, Москва

² ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», Москва

³ НИТУ «МИСиС», Москва

⁴ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Металлические аморфные сплавы, представляют значительный теоретический и практический интерес как функциональные сплавы с особыми свойствами. Наиболее известными и изученными материалами этого класса являются сплавы на основе железа, кобальта и никеля. Функциональные свойства этих материалов структурно чувствительны, и, следовательно, сильно зависят от способов формирования структур. Использование комбинации различных современных методов исследования: электронной микроскопии, стандартной рентгеновской дифракции, рентгеновской дифракции в синхротронном излучении с пространственным разрешением и получением функций радиального распределения атомов может оказаться эффективным способом исследования изменения локальной структуры, а именно, параметров ближнего атомного порядка материала в ходе экстремальной деформации. Изучение ближнего атомного порядка является важной и актуальной задачей, разрешение которой необходимо для более глубокого понимания физических процессов протекающих на различных стадиях формирования кристаллической фазы в ходе кручения под высоким давлением (КВД) аморфных материалов и дальнейшей деформационной аморфизации.

В работе исследовали аморфные сплавы на основе Fe: $\text{Fe}_{83-x}\text{Ni}_x\text{B}_{17}$ ($x = 25, 29, 33$) в виде ленты шириной 8 мм и толщиной 25 мкм, изготовленные методом закалки из жидкого состояния (ЗЖС). Ленты деформировали КВД при 6 ГПа при температуре кипения жидкого азота (77К) до деформации, соответствующей одному полному обороту подвижной наковальни ($\epsilon = 4$). Методом EXAFS в синхротронном излучении установлено, что КВД при 77 К приводит к изменению локальной атомной структуры вокруг атомов железа (к разрушению локального ближнего порядка, к повышению средних координационных чисел и к снижению среднего расстояния между парами атомов различного типа в первой координационной сфере). Изменения локальной атомной структуры вокруг атомов никеля не обнаружено. Обнаружено, что КВД при 77 К способствует образованию «идеального» аморфного состояния без заметных признаков ближнего упорядочения (корреляции в расположении атомов), что соответствует возрастанию свободной энергии относительно состояния после закалки из расплава.

ОСОБЕННОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ОБОГАЩЕННЫХ ГЕРМАНИЕМ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

*С.И. Супельняк, Е.Б. Баскаков, Е.Н. Коробейникова, В.Г. Косушкин,
В.И. Стрелов*

*Отделение «Лаборатория космического материаловедения – Калуга «Курчатовского
комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»*

Солнечные батареи на основе GaAs демонстрируют высокие показатели фотоэлектрического преобразования, но из-за высокой стоимости производства являются нишевой технологией, предназначенной для таких высокопроизводительных приложений как космическая энергетика [1]. Одним из способов снижения стоимости таких фотопреобразователей является использование подложек $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, обогащенных германием, обладающих близким к GaAs периодом решетки.

В настоящей работе методом вертикальной направленной кристаллизации получен твердый раствор $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0,6$ ат.%) [2]. Результат исследований распределения Si вдоль оси роста кристалла и в нескольких поперечных сечениях подтверждает получение твердого раствора. Установлено, что содержание Si меняется скачкообразно в диапазоне от 0,05 до 1,62 ат.%. При этом наблюдается выравнивание средней концентрации кремния до 0,17 ат.% на длине от 12 до 33 мм от дна кристалла. Содержание Si в нескольких поперечных сечениях лежит в диапазоне от 0 до 2,5 ат.%. При этом в средней части слитка можно выделить область шириной 3 мм, симметричную относительно оси слитка, со средней концентрацией кремния на уровне 0,18 ат.%.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». В части электронной микроскопии работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» КККиФ НИЦ «Курчатовский институт».

1. K. L. Schulte, S. W. Johnston, et al., Joule. 7, 7 (2023). Т. 7. – №. 7. – С. 1529-1542.
2. С. И. Супельняк, Е.Б. Баскаков и др., Письма в ЖТФ. 51, 14 (2025).

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ МОНОХРОМАТОРА С ПЛОСКИМИ ДИФРАКЦИОННЫМИ РЕШЕТКАМИ ДЛЯ МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ДИАПАЗОНА

Е.Е. Сурикова¹, Р.Г. Чумаков¹

¹ НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Монохроматоры с дифракционными решетками являются ключевыми компонентами каналов синхротронного излучения, обеспечивая селекцию энергии фотонов с высокой спектральной разрешающей способностью в диапазоне вакуумного ультрафиолета и мягкого рентгеновского излучения. В работе рассматривается монохроматор с плоскими дифракционными решетками для диапазона энергий 5–1000 эВ.

На основе аналитических зависимостей для дифракционных решеток и зеркал [1,2] разработана математическая модель, включающая автоматизированный расчет углов падения и дифракции в зависимости от энергии. Данный подход был реализован в пользовательском коде для программы XRT [3], что позволило проводить моделирование с учетом перестройки геометрии монохроматора. Такая модификация открывает возможность оптимизации всей линии вывода излучения — от выбора параметров зеркал до расположения выходных щелей. В результате были получены спектральные характеристики, представленные на рисунке 1.

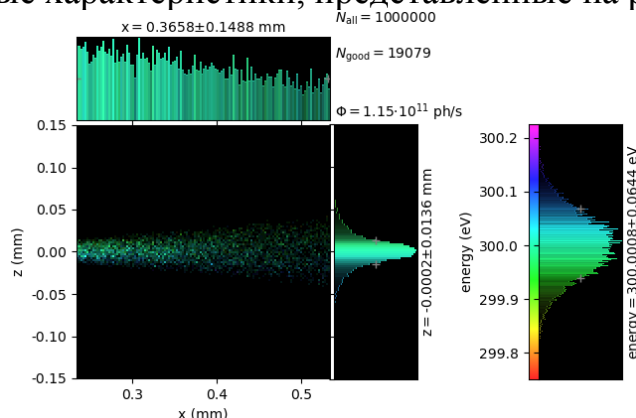


Рис. 1. Спектральные характеристики излучения после прохождения выходной щели

Результаты моделирования включают расчет спектральных характеристик и оценку разрешающей способности при различных конфигурациях. Полученные данные будут использованы при проектировании и конструировании монохроматора для канала вывода излучения на КИСИ-Курчатов, на ТНК Зеленоград и в рамках проекта «СИЛА».

1. Petersen H. The plane grating and elliptical mirror: a new optical configuration for monochromators // Optics Communications. 1982. T. 40. №. 6. P. 402-406.
2. Sjoblom P., Todorescu G. and Urpelainen S. Understanding the mechanical limitations of the performance of soft X-ray monochromators at MAX IV laboratory // Synchrotron Rad.. 2020. №27. P. 272-283.
3. Klementiev K., Chernikov R. Powerful scriptable ray tracing package xrt // Advances in computational methods for X-ray optics III. SPIE, 2014. T. 9209. p. 60-75.

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА, УПРАВЛЯЕМОГО АДАПТИВНЫМ ЭЛЕМЕНТОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ

А.И. Терентьева¹, И.И. Петров², Я.А. Элиович²

¹ *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова*

² *НИЦ «Курчатовский институт»*

Рентгеновские исследования являются актуальным и развивающимся направлением современной науки. Одним из хорошо изученных ранее инструментов для проведения времяразрешающих исследований, является элемент адаптивной рентгеновской оптики (АЭРО). Переход на АЭРО обусловлен необходимостью преодоления ограничений традиционных механических систем и достижением высокой скорости, точности и стабильности управления параметрами рентгеновского пучка [1].

В работе [2] было показано, что рентгенооптический кристалл при подаче электрического сигнала отклоняется на определённый угол, что позволяет управлять положением рентгеновского пучка. Для дальнейшего развития концепции монохроматора на основе АЭРО и решения проблемы, связанной с небольшим смещением точки засветки на образце, установленном после АЭРО — что особенно критично для экспериментов с высокой локальностью — было предложено детально изучить пространственное смещение пучка, управляемого адаптивным элементом. В частности, определить положение точки фокусировки и исследовать характер её смещения.

В данной работе на лабораторном источнике рентгеновского излучения проведён анализ смещения пучка, управляемого АЭРО, при различных параметрах подаваемого электрического сигнала. По полученным данным определены положения точки фокусировки и выявлена закономерность смещения этой точки в сторону монохроматора с ростом амплитуды напряжения управляющего сигнала. Полученные результаты позволяют проводить рентгенодифракционные исследования с высоким пространственным разрешением путем точной установки образца в найденную точку фокусировки.

1. Y. A. Eliovich, A. E. Blagov, et al., Crystallography Reports. 67, 1041 (2022)

2. А. Е. Благов, А. С. Быков и др. Приборы и техника эксперимента. 5, 109 (2016)

РЕАЛИЗАЦИЯ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ С ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ ЧАСТИЧНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ВЫХОДА

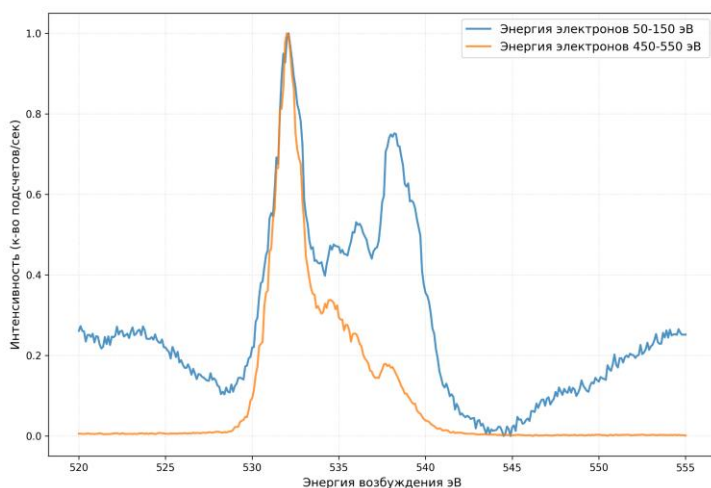
Р.П. Тонковид^{1,2}, Р.Г. Чумаков¹

¹ НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва

Впервые на Курчатовском источнике синхротронного излучения реализован метод спектроскопии поглощения в мягком рентгеновском диапазоне с детектированием частичного электронного выхода (РЕУ). Анализ тонкой структуры спектров поглощения (NEXAFS), как известно, позволяет детально исследовать химический состав, электронную структуру и морфологию поверхностей [1]. Ключевое преимущество метода РЕУ — исключительная поверхностная чувствительность (3-5 нм), достигаемая селективным детектированием вторичных электронов.

Целью работы являлась разработка и внедрение этой методики на станции наноФЭС КИСИ. Был создан программно-аппаратный комплекс, который управляет детектором, подавая регулирующие напряжения на электроды, и регистрирует сигнал. Связь блока управления с компьютером пользователя организована по клиент-серверной схеме. Методика интегрирована в комплекс станции и используется одновременно с реализованными ранее полным электронным (ТЕУ) и флуоресцентным (TFY) выходами. Это позволяет проводить совмещенные измерения, получая взаимодополняющую информацию и сокращая время эксперимента.



Эффективность метода подтверждена при исследовании образцов диоксида олова (SnO_2). Сравнение спектров выявило значимые различия в поверхностном и объемном составе, свидетельствующие о градиенте свойств в приповерхностной области, чего невозможно обнаружить другими методами станции (Рис.1).

Рис. 1. SnO_2 , К-край поглощения О. Спектры поглощения, измеренные методом РЕУ для разных селективных диапазонов.

1. Nefedov A., Wöll C. Advanced applications of NEXAFS spectroscopy for functionalized surfaces // Surface Science Techniques. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2013. — С. 277-303.

GPU УСКОРЕНИЕ ПОДГОНКИ EXAFS СПЕКТРА ЭВОЛЮЦИОННЫМ АЛГОРИТМОМ

А.Л. Тригуб¹, А.А. Мякишев^{2,1}

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Московский физико-технический институт, Москва

Метод дальней тонко структуры рентгеновского спектра поглощения (EXAFS) уже давно зарекомендовал себя как структурный метод, позволяющий определять локальную атомарную структуру неупорядоченных сред или определять искажения ближнего порядка в кристаллических средах около поглощающего атома в зависимости от физического или химического воздействия. Стандартный анализ спектров EXAFS, основанный на варьировании параметров координационных сфер во многих случаях затруднителен или является мало информативным. Альтернативой этому подходу является эволюционный алгоритм, в котором структурная модель задана не в виде независимых координационных сфер, а как набор декартовых координат. В результате оптимизации получают набор декартовых координат, что позволяет получить более полную структурную информацию, в сравнении с посферной подгонкой спектра. Одной из проблем данного подхода это необходимость включения в расчет минимум несколько сотен поглощающих атомов, для построения ансамбля атомов, имитирующих тепловые колебания. В данной работе представлены возможности программного обеспечения созданного при помощи языка программирования Python с использованием библиотеки JAX, которая позволяет легко адаптировать вычисления на GPU. На Рис.1 показан график затрачиваемого времени на 1 итерацию для программы EvAX [1] и созданного ПО без использования GPU и с GPU. Первые результаты показали, что использование GPU позволяет ускорить вычисление примерно в 200 раз.

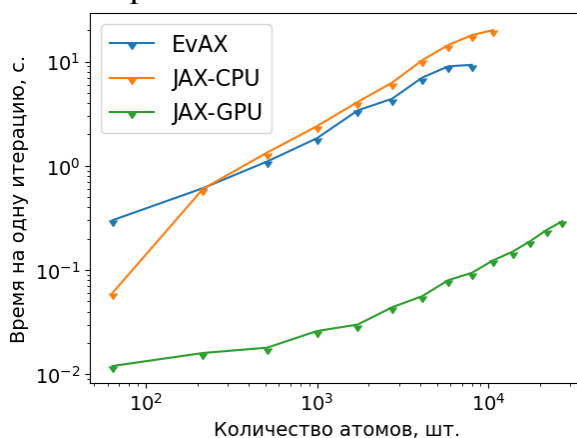


Рис. 1. Зависимость времени, затрачиваемое на 1 итерацию, от количества атомов в расчете.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЙ В Те- СОДЕРЖАЩЕМ РАСПЛАВЕ СОЛИ

И.Н. Трунькин¹, П.Н. Ивлиев¹, М.А. Абрамов¹, В.В. Игнатьев¹, А.И. Суренков¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Никелевые сплавы с различной концентрацией основных элементов: Мо и Cr, с различными легирующими добавками (Y, Nb, Ti, Al и/или Sc) активно рассматриваются в качестве кандидатных конструкционных материалов (КМ) для жидкосолевых реакторов (ЖСР). Одним из продуктов деления в топливной соли ЖСР является Те, который негативно действует на конструкционный материал, вызывая теллуровую межкристаллитную коррозию (МКК). В испытаниях КМ в расплав солей добавлялся этот элемент и после испытаний в течение 300, 1000, 3000 или 5000 часов образцы разрывались и исследовались.

С помощью растрового двухлучевого электронно-ионного микроскопа (РЭМ) Helios 600 были отработаны методы исследования площадок разрывов и поверхностей шлифов сплавов после разрывов.

Исследовались области по границе и по телу зерна и измерялась длина проникающих трещин. Выявлены различия в параметрах МКК между различными сплавами и зависимость МКК от времени испытаний. Пример одной из поверхностей по которой анализировалась МКК приведен на рис. 1

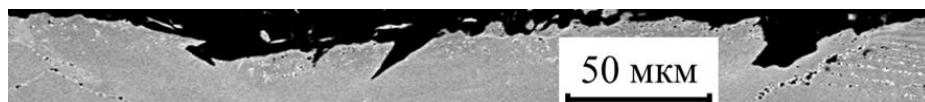


Рис. 1. РЭМ изображение в режиме обратно-рассеянных электронов сплава ХН62М

Методом энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭРМ) установлено изменение состава приповерхностной области, обнаружены различные включения основных и примесных элементов сплава. В Y-содержащих образцах обнаружены частицы интерметаллида Y-Te на глубине более 10 мкм от поверхности и обеднение приповерхностной области по Cr на глубину более 10 мкм, что отмечается картах ЭРМ рис. 2.

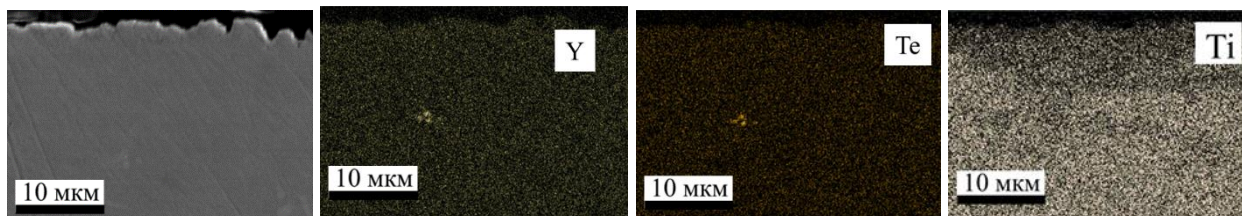


Рис. 2. Карты ЭРМ распределения элементов в коррозионном слое для сплава ХН80МТБ

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ВЫСОКОУНИВЕРСАЛЬНЫЙ НЕЙТРОННЫЙ ДИФРАКТОМЕТР ДЛЯ РЕАКТОРА ИРТ НИЯУ МИФИ

А.Н. Тюлюсов^{1,2}, Ф.С. Джепаров^{1,2}, Д.В. Львов^{1,2}, Й. Шмайснер^{1,2}

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В концепциях наполнения приборных парков нейтронных центров реактора ПИКе основное внимание уделяется достаточно специализированные установки, например проект парка установок реактора ПИК [1, 2].

Однако, на фоне большим числа плюсов такого подхода, его очевидным минусом будет невозможность отрабатывать новые методы, новые схемы экспериментов.

Таким образом возникает необходимость высокоуниверсального прибора, позволяющий реализовать большой набор схем экспериментов — с различным числом кристаллов, разные длины волн, рефлексы, диапазоны углов (за счет кристаллов разного совершенства) даже на относительно низкочастотном реакторе Атомного центра НИЯУ МИФИ.

Предлагаемый дифрактометр может использоваться как в пользовательском режиме, так и для тестирования и оптимизация схем экспериментов при их планировании, а также для разработки новых установок других нейтронных центров, имея в виду в первую очередь реактор ПИК.

Основой проекта предлагается взять Универсальный нейтронных дифрактометр ИТЭФ-МИФИ [3], с учетом его модернизации. Дифрактометр должен содержать в своей конструкции четырехкристальный блок монохроматизации, два гониометра, детектирующую систему, узел образца, вибро- и термозащиту. Также необходимы коллекция кристаллов, достаточная обширная для организации широкого круга спектрометрических схем, дополнительное оборудование для варьирования условий на образце.

1. А. И. Курбаков, А. М. Балагуров, И. В. Голосовский, И. А. Зобкало, В. Б. Рыбаков, Ю. П. Черненко, В. Т. Эм, *Совещание и Молодежная конференция по использованию рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в конденсированных средах РНСИ-КС-2014, СПб*, Сборник тезисов, Гатчина – 2014, 50 (2014).

2. Е. В. Москвин, С. В. Григорьев, *там же*, 53 (2014).

3. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Денисов Д.С., Матвеев С.К., Эйдлиг А.О., ПТЭ, No 6, 67 (1994).

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СВОЙСТВ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ НАНОПРОВОЛОК, ПОЛУЧЕННЫХ МАТРИЧНЫМ СИНТЕЗОМ, ОТ СООТНОШЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ

Д.А. Улыбышев^{1,2}, Д.Р. Хайретдинова^{1,2}, И.М. Долуденко², Д.Н. Хмеленин²

¹ *Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва*

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

Ферромагнитные нанопроволоки имеют потенциальное применение в качестве функциональных материалов в спинтронике, электронике и медицине. Одним из способов получения данных структур является матричный синтез, особенностью данного способа считается контроль состава, структуры и размеров одномерных наноструктур.

В данной работе синтез трехкомпонентных нанопроволок осуществлялся методом электрохимического осаждения в полимерные трековые мембраны с диаметром пор 30 нм и 100 нм. Далее образцы исследовались методами ПЭМ, ЭДС, вибрационной магнитометрии.

Результаты ПЭМ показали, что получаемые нанопроволоки поликристаллически, при этом предполагаемый твердый раствор FeCoCu не образовывался, помимо этого наблюдаются не идентифицированные фазы, требующие дальнейших исследований. На изображениях четко прослеживается распределение компонентов по всей длине без образования отдельных кластеров.

Результатов ЭДС-анализа показали немонокотонную зависимость элементного состава от напряжения осаждения. Также показано, что с увеличением напряжения осаждения, содержание Cu в составе нелинейно убывает с выходом на плато при больших напряжениях.

По результатам магнитных измерений заметна тенденция к уменьшению магнитных параметров с увеличением содержания меди, однако существует процентное содержание меди, при которых параметры имеют максимальные значения. Магнитные свойства получаемых структур были сопоставлены с аналогичными бинарными нанопроволоками составов FeCo, было замечено, что добавление меди в определенной концентрации увеличивает их магнитные свойства.

Таким образом получение трехкомпонентных сплавов FeCoCu матричным синтезом позволяет получать поликристаллические нанопроволоки с равномерным распределением материалов по их длине. Помимо этого, регулируя соотношение элементов можно изменять их магнитные свойства в более широких пределах по сравнению с бинарными аналогами, что в перспективе может расширить область их применений.

Работа проведена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

СТРУКТУРНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{Co}_{1.2}\text{Mn}_{1.8}\text{VO}_5$

Д.И. Фазлижанова^{1,2}, Е.М. Мошкина,³ Р.М. Еремина¹

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН

² Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

³ Институт физики им Л.В. Киренского

Оксибораты $\text{M}_2^{3+}\text{M}^{2+}\text{VO}_5$, где M^{3+} и M^{2+} – трех- и двухвалентные переходные металлы, чаще всего кристаллизуются в структуру людвигита, но встречаются и вонсениты, халситы, ортопинакиолиты. Все эти структуры характеризуются большим количеством неэквивалентных кристаллографических позиций; вектора решетки a и b много больше вектора c , который порядка 3 ангстрем.

В работе [1] были изучены свойства $\text{Mn}_{1.17}\text{Co}_{1.83}\text{VO}_5$ и $\text{Mn}_{1.39}\text{Co}_{1.61}\text{VO}_5$. Оба кристалла имеют структуру людвигита, при этом основное магнитное состояние первого соединения – спиновое стекло, второго – ферримагнетик. Для дальнейшего изучения магнитных и структурных свойств соединений $\text{Co}_{3-x}\text{Mn}_x\text{VO}_5$ был синтезирован образец $\text{Co}_{1.2}\text{Mn}_{1.8}\text{VO}_5$ с использованием изотопа бора ^{11}B , что позволило провести эксперименты по нейтронной дифракции. Оказалось, что образец формирует структуру ортопинакиолита, как показали данные нейтронной дифракции (рисунок 1). В этой структуре 7 неэквивалентных позиций переходных металлов (рисунок 1). Ниже 60 К наблюдаются магнитные пики на нейтронной дифракции, указывающие существование дальнего магнитного порядка.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 23-72-00047 на

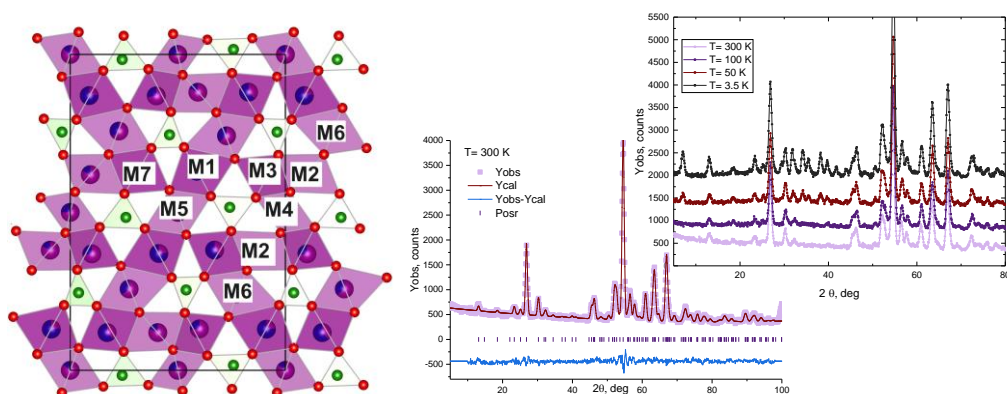


Рисунок 6 Слева: кристаллическая структура $\text{Co}_{1.2}\text{Mn}_{1.8}\text{VO}_5$. Справа: экспериментальные данные нейтронного рассеяния и теоретическая аппроксимация

Исследовательском реакторе ИР-8. Станция нейтронной порошковой дифракции ДИСК.

1. D. V. Popov, T. P. Gavrilova, et al., J. Alloys Compd. 976, 173143 (2024).

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ И СТРУКТУРА НИТЕВИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА ОЛОВА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНО-ЭЛЕКТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

*К.А. Фатеев¹, О.А. Чувенкова¹, С.В. Рябцев¹, Р.Г. Чумаков², Е.А. Шрамков²,
А.К. Пелагина¹, И.Е. Занин¹, С.Ю. Турищев¹*

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

fateev@phys.vsu.ru

Нитевидные кристаллы SnO_2 являются актуальными для исследования в настоящее время в связи с проявлением газочувствительных свойств таких объектов, а также возможностью создания высокоточных приборов на их основе. Знание о влиянии условий формирования на локальное атомное окружение, структуру и физико-химическое состояние позволят управлять свойствами этого функционального материала, в том числе для применения на практике.

В ходе работы были сформированы нитевидные кристаллы диоксида олова SnO_2 методом газотранспортного синтеза при различной температуре в камере роста. Исследования поверхности проводились методами XPS и XANES, с использованием источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов», НИЦ «Курчатовский институт» Москва (станция НАНОФЭС), также были привлечены данные, полученные ранее, в Гельмгольц Центре Берлин (синхротрон BESSY II, станция RGBL).

Недостаток атомов кислорода в слоях развитой поверхности нитевидных кристаллов приводит к образованию препика в синхротронных спектрах XANES, соответствующего состояниям в запрещённой зоне диоксида олова. Форма и относительная интенсивность данного препика изменяется, в зависимости от температуры синтеза нитевидных кристаллов. Форма края поглощения позволяет говорить о формировании тетрагонального SnO_2 на поверхности исследуемых объектов. XPS спектры также позволяют заключить, что существует недостаток кислорода, приводящий к формированию SnO_{2-x} в поверхностном слое исследуемых объектов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения № 075-15-2025-455.

ДИФРАКЦИОННЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЪЕМНЫХ, ПОВЕРХНОСТНЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ОБЪЕКТОВ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ (EELFS)

В.П. Филиппова¹, А.А.Томчук^{1,2,3}, Е.Н. Блинова¹

¹ ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П.Бардина», Москва

² МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

³ РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва

Суть метода EELFS (как аналога EXAFS-спектроскопии) и основные детали методики эксперимента – изложены в [1].

Предлагаемый новый теоретический подход для определения параметров наноразмерных кристаллических структур основан на дифракционном представлении спектра энергии фото- и Оже-электронов, и моделировании радиальной функций плотности распределения атомов на координационной сфере с учетом размерности атомных конфигураций, исходя из геометрических построений поверхности пересечения объемных, поверхностных и линейных объектов со сферой, – подробнее описано в [2].

На примере фаз аллотропного углерода, с использованием характеристик химических элементов из справочника [3], показано, что предложенная методика позволяет оценить толщину и размерность исследуемого объекта (объемную, поверхностную или линейную конфигурацию взаимного расположения атомов), а также глубину выхода анализируемого сигнала с точностью до одного диаметра атома.

1. Wainstein D.L., Kovalev A.I. Fine determination of interatomic distances on surface using extended energy-loss fine structure (EELFS) data: peculiarities of the technique. // Surface and Interface Analysis. 2002. V.34. P. 230-233

2. Филиппова В.П., Глезер А.М., Перлович Ю.А., Крымская О.А. Изучение объемных, поверхностных и одномерных структур аллотропного углерода по дифракционным спектрам потерь энергии Оже-электронов // Известия РАН. Серия Физическая, 2018, т.82, № 9, с. 1263-1273. DOI: 10.1134/S0367676518090077

3. Эмсли Дж. Элементы. М.: Мир, 1993. 256 стр.

РАЗРАБОТКА ПЕРВЫХ В РОССИИ КРЕМНИЕВЫХ КАСКАДНЫХ АДИАБАТИЧЕСКИХ ЛИНЗ ДЛЯ НАНОФОКУСИРОВКИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФРАСТРУКТУРЫ НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

*М.С. Фоломешкин¹, Ю.А. Волковский¹, А.Ю. Серёгин¹, В.Г. Кон¹,
П.А. Просеков¹, А.В. Мяконьких¹, К.В. Руденко¹, В.А. Юнкин², А.А. Снигирёв³,
С.Н. Якунин¹, Ю.В. Писаревский¹, А.Е. Благов¹, М.В. Ковальчук¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН

³ Балтийский федеральный университет им. И. Канта

Нанофокусирующая рентгеновская оптика является неотъемлемым инструментом для проведения структурных исследований с нанометровым пространственным разрешением на современных источниках синхротронного излучения (СИ) и лазерах на свободных электронах (ЛСЭ). В связи со строительством в России новых источников СИ 4-го поколения и ЛСЭ [1] актуальной является задача разработки технологий изготовления такой оптики для будущего оснащения разрабатываемых экспериментальных станций.

Одним из наиболее перспективных направлений в данной области является планарная рефракционная оптика на основе монокристаллического кремния. В настоящее время в рамках НИОКР «СИЛА» ведется активная работа по изготовлению и тестированию элементов кремниевой преломляющей оптики. Кремниевые составные преломляющие линзы (СПЛ) [2] способны сфокусировать пучок жёсткого рентгеновского излучения до поперечного размера 20 нм [3]. Концепция адиабатических СПЛ (АСПЛ) [4-6] позволяет преодолеть указанный предел и уменьшить размер пучка в фокусе до рекордных значений 10 нм и менее, что обеспечит решение широкого круга задач структурного материаловедения на мировом уровне.

В докладе представлены первые результаты по моделированию, изготовлению и тестированию кремниевых каскадных АСПЛ с использованием инфраструктуры НИЦ «Курчатовский институт». Разработанные АСПЛ теоретически позволяют сфокусировать когерентный пучок рентгеновского излучения с энергией фотонов 36 кэВ до размера 16 нм и обеспечить выигрыш в интегральной интенсивности в 1.8 раза по сравнению с СПЛ, рассчитанной на ту же энергию.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части моделирования и в рамках НИОКР «СИЛА» в части проведения экспериментов.

1. М.В. Ковальчук, А.Е. Благов, О.С. Нарайкин и др. // Кристаллография. 67, 5 (2022).
2. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al. // Phys. Rev. Lett. 103 (2009).
3. V.G. Kohn, M.S. Folomeshkin // J. Synchrotron Radiat. 28 (2021).
4. Snigireva, A. Snigirev, S. Kuznetsov et. al. // Proc. SPIE. 4499 (2001).
5. J. Patommel, S. Klare, R. Hoppe et. al. // Appl. Phys. Lett. 110 (2017).
6. В.Г. Кон, М.С. Фоломешкин // Российские Нанотехнологии. 17, 1 (2022).

КОМПЛЕКСЫ ПЛАТИНЫ (II) С НИТРО- И АРОМАТИЧЕСКИМИ N-ДОНОРНЫМИ ЛИГАНДАМИ И ИХ СТРУКТУРА

Э.Р. Худайгулов^{1, 2}, И.А. Якушев¹

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

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

С момента открытия комплексы платины и платиновых металлов зарекомендовали себя как высокоэффективные катализаторы и противоопухолевые препараты. Особый интерес привлекли соединения со связями металл-азот благодаря своей прочности.

В данной работе были синтезированы и исследованы физико-химическими методами нитрокомплексы платины (II) с ароматическими N-донорными лигандами. Цель работы заключается в разработке новых комплексов платины с их последующим изучением и оптимизации синтеза.

Был получен ряд комплексов состава $[Pt(NO_2)_2L_2]$ (L = пиридин (py), 2,2'-бипиридин (bpy), 2-пиколин (2-pic), 3,5-лутидин (3,5-lut), 3,4-лутидин (3,4-lut), 2,3-лутидин (2,3-lut)) взаимодействием тетранитроплатината(II) калия $K_2[Pt(NO_2)_4]$ с соответствующими лигандами в стехиометрическом количестве. $K_2[Pt(NO_2)_4]$ был получен по стандартной методикой [1], но было предложено вместо нитрата калия KNO_3 использовать нитрат натрия $NaNO_3$ ввиду значительно меньшего количества примесей в последнем [2].

Все соединения выделены в виде монокристаллов и охарактеризованы методами: ИК-спектроскопии, ЯМР-спектроскопии, рентгенофазового и рентгеноструктурного анализов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ИОХ РАН.

1. Chernyaev I. I. Synthesis of complex compounds of Platinum group metals //Reference book. – 1964.
2. Ray J. D. Potassium nitrite: Preparation and thermometric analysis //Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry. – 1960. – Т. 15. – №. 3-4. – С. 290-292.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ВЕЗИКУЛЯРНЫХ НАНОЛЕКАРСТВ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

В.А. Чаусова¹, А.В. Шуленина^{2,3}, Г.С. Петерс^{3,2}, Ю.А. Терешкина⁴,
Е.Г. Тихонова⁴, М.А. Киселев^{1,2}

¹Объединенный институт ядерных исследований

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

⁴ФГБНУ Научно - исследовательский институт биомедицинской химии
имени В.Н. Ореховича

Модернизация существующих лекарств является одной из важнейших задач в фармацевтике. В институте биомедицинской химии им. Ореховича была разработана фосфолипидная транспортная наносистема (ФТНС), которая представляет собой лиофилированный порошок с составом: соевые фосфолипиды и мальтоза в соотношении 1:4. Фосфолипиды являются биodeградируемыми веществами, комплементарными к клеткам организма. При растворении в воде, система образует везикулы, в которые могут быть включены нерастворимые в воде лекарственные соединения. Для изучения физических параметров такой системы наиболее подходящими методами является метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР). ФТНС обладает маленьким размером (порядка 30 нм) и составом, который является благоприятным для человека. Применение нанолекарств, включенных в ФТНС, приводит к увеличению времени циркуляции лекарств в кровотоке, появлению накопительного эффекта и возможности сократить дозировку лекарственных средств с сохранением терапевтической эффективности.

С помощью МУРР изучена структура водных растворов везикул ФТНС с включенными нерастворимыми в воде лекарственными соединениями (Индометацин-НФ). Для создания этих системы были использованы два типа соевых фосфолипидов S80 и S100, которые отличаются содержанием фосфатидилхолина (77 и 94%, соответственно). Эксперименты были проведены при температуре 20 и 37 °С. Концентрации образца в воде составляли: 25, 30 и 35%. В результате были определены ключевые структурные характеристики структуры: радиус везикул, толщина липидного бислоя. Эти параметры дают возможность провести оценку влияния состава и температуры системы на структуру лекарственных препаратов.

Исследования выполнены на станции БиоМУР с использованием уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» НИЦ «Курчатовский институт».

XANESCONV: ПРОГРАММА ДЛЯ УЧЁТА УШИРЕНИЯ XANES-СПЕКТРОВ

К.М. Шамьюнов^{1,2}, А.Л. Тригуб¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² МФТИ

Программа реализует учет уширения теоретических XANES-спектров. Уширение описывается функцией Гаусса или Фойгта, параметры которых определяются в ходе подгонки расчётного спектра к экспериментальному.

Программа написана на языке Python с использованием различных вычислительных библиотек: NumPy, SciPy, LMFIT, Numba и т.д. Реализованы следующие основные вычислительные функции: свёртка расчетного спектра с функцией уширения, расчет квадрата разности экспериментального и свёрнутого расчетного спектра, расчет качества подгонки.

Подгонка параметров свёртки осуществляется в два этапа: глобальная и локальная оптимизация функции квадрата разности экспериментального и свёрнутого расчетного спектра. На этапе глобальной оптимизации используется алгоритм дифференциальной эволюции. На этапе локальной – метод наименьших квадратов. Внутренние параметры этих алгоритмов можно изменять под конкретную задачу.

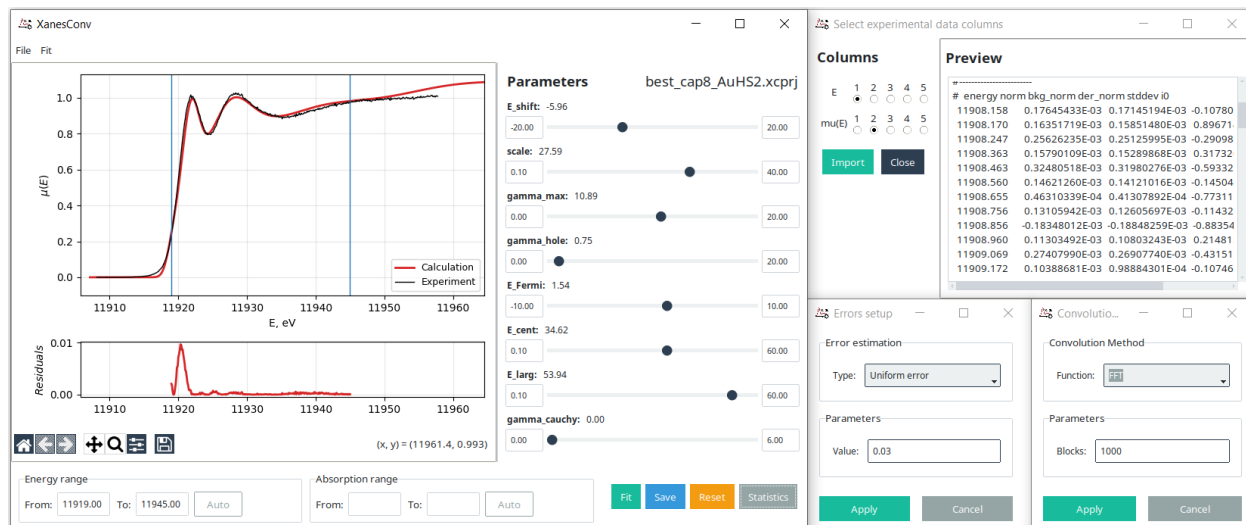


Рис. 1. Интерфейс программы (Главное окно, окно открытия файлов, окно выбора функции свёртки, окно выбора функции невязки)

Фрагмент интерфейса программы приведен на Рис. 1. В интерфейсе реализована возможность варьировать параметры уширения, сдвига по энергии, задавать диапазон энергий для подгонки, смотреть и сохранять результаты и статистики подгонки. Чтение данных осуществляется с помощью отдельного окна, в котором виден текст открытого файла, есть выбор столбцов для чтения (энергия и коэффициент поглощения).

РАСЧЁТ СПЕКТРОВ НЕЙТРОННОГО СПИНОВОГО ЭХА ПО ТРАЕКТОРИЯМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В GROMACS

А.В. Швецов^{1,2,3}, Д.В. Лебедев^{1,3}, А.Л. Коневега^{1,2,3}

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

²*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ), Санкт-Петербург, Россия*

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

shvetsov_av@pnpi.nrcki.ru

Благодаря развитию различных методов структурной биологии, а также методов молекулярного моделирования, таких как молекулярная динамика, большой интерес представляют структурные методы, позволяющие напрямую наблюдать динамику биомакромолекул. Одним из таких методов является метод нейтронного спинового эха (НСЭ). Однако ввиду особенностей данного метода интерпретация его результатов может быть затруднительной без наличия моделей, способных оценить динамику биомакромолекул. Тем самым важной становится возможность расчёта спектров НСЭ по траекториям молекулярной динамики.

На основе ранее разработанного для программного пакета GROMACS[1] нами метода расчёта спектров МУРН[2] были предложены и реализованы подходы, позволяющие рассчитать спектры НСЭ по траекториям молекулярной динамики. На текущий момент метод расчёта НСЭ реализован в виде отдельного модуля для GROMACS и позволяет рассчитывать спектры НСЭ по траекториям молекулярной динамики, полученным в данном программном пакете. Получаемые спектры для модельных систем неплохо согласуются с известными литературными данными, что в целом даёт возможность напрямую сравнивать траектории молекулярной динамики и экспериментальные спектры НСЭ. Особенно актуальной разработка данной методики расчёта становится с учётом того, что в рамках создания «Международного центра нейтронных исследований на базе высокопоточного реактора ПИК» (УНУ «МЦНИ ПИК») планируется создание и ввод в эксплуатацию спин-эхо спектрометра (SEM).

Работа была выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500033-1-1.6.7;1.6.4;1.6.8 **Функциональная и структурная организация сложных, мультикомпонентных биологических систем и их динамика.**) а также поддержана персональным грантом правительства Ленинградской области.

1. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers / Mark James Abraham, Teemu Murtola, Roland Schulz, Szilárd Páll, Jeremy C. Smith, Berk Hess, Erik Lindahl // SoftwareX. - 2015. - 1-2. - с. 19-25
2. Method for calculating small-angle neutron scattering spectra using all-atom molecular dynamics trajectories. / Shvetsov, A.V., Schmidt, A.E., Lebedev, D.V., Isaev-Ivanov V.V. // J. Surf. Investig. - 2013 - 7 - 1124–1127.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ ЯЧЕЙКА ДЛЯ СИНХРОТРОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ TDC SR 600

*И.Г. Шентун¹, А.Ю. Серегин², О.Ю. Грапенко¹, В.А. Шуваева¹,
Н.В. Тер-Оганесян¹*

¹ НИИ физики, Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

² КИСИ, НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Изучение фазовых переходов и структурных преобразований в функциональных материалах невозможно без специализированного оборудования, позволяющего отслеживать эволюцию кристаллической решётки *in situ* при нагреве. Для решения этой задачи в НИИ Физики Южного федерального университета разработана температурная дифракционная ячейка TDC SR 600, предназначенная для работы на станции РКФМ НИЦ «Курчатовский институт».

Ячейка обеспечивает нагрев образцов в диапазоне +25...+600 °С с высокой стабильностью и точностью поддержания температуры (± 0.5 °С). Конструкция выполнена в виде компактной печи с алюминиевым корпусом и рентгенопрозрачными окнами из полиметилметакрилата (ПМА). Образец фиксируется в неподвижном положении, что гарантирует стабильность и воспроизводимость измерений.

В отличие от зарубежных аналогов, TDC SR 600 ориентирована на задачи импортозамещения и адаптирована к специфике отечественной экспериментальной инфраструктуры. Конструкция предусматривает установку графитового купола для съёмки полюсных фигур, а так же может быть доработана для расширенных режимов работы: измерений в контролируемых газовых атмосферах и вакууме, исследования наноматериалов, катализаторов и эпитаксиальных плёнок с помощью специализированных держателей образца, а также проведения экспериментов с приложением электрического поля. Дополнительно возможно оснащение специализированным микропроцессорным контроллером, обеспечивающим автоматическую стабилизацию всех газовых параметров и интеграцию в управляющий комплекс станции.

Введение в эксплуатацию TDC SR 600 существенно расширит возможности станции РКФМ, открыв перспективы для исследования фундаментальных и прикладных задач в области высокоэнтропийных оксидов и других функциональных материалов нового поколения. Разработка отечественной дифракционной ячейки для синхротронных измерений является важным шагом на пути к технологической независимости и стратегическому развитию российской науки.

1. B. B. Oswald, J. C. Schuren, D. C. Pagan, M. P. Miller, Rev. Sci. Instrum. 84, 033902 (2013).

IN SITU СОЗДАНИЕ И АНАЛИЗ ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ МЕТОДОМ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Е.А.Шрамков^{1, 2, 3}, Р. Г. Чумаков¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

³ Дальневосточный федеральный университет

Актуальной исследовательской задачей является изучение способов нанесения слоя полярных молекул с большим дипольным моментом на поверхности полупроводников [1,2]. Слой таких молекул может быть использован для создания объектов нано- и микроэлектроники. Для изучения таких систем необходимы методы анализа поверхности, дающие информацию о распределении плотностей электронных уровней в созданной системе.

Одним из таких методов является **фотоэлектронной спектроскопия**, средняя глубина исследования структуры твёрдого тела этим методом составляет величину порядка 10 нм [3]. Очевидно, что наличие любого вида загрязнения на поверхности исследуемого объекта влечет за собой значительные ухудшения в информативности получаемых фотоэлектронных спектров. Примерами ухудшения качества спектра могут служить: размытие характерных пиков, вызванное образованием новых химических связей; смещение пиков, связанное с зарядкой атомов или молекул на поверхности; появление пиков от загрязняющих элементов. Одним из способов борьбы с загрязнением поверхности является синтез образцов *in situ* – в одном вакуумном объеме с измерениями. Результатом такого подхода является отсутствия контакта поверхности образцов с атмосферой между производством и непосредственным измерением.

Для нанесения тонких покрытий в вакууме применяются следующие технологии: электролучевое распыление мишени, магнетронное распыление мишени и термическое напыление. Для первых двух способов характерно разрушение изначальных химических связей в распыляемых соединениях, что недопустимо при создании молекулярных плёнок. Поэтому в рамках станции НАНОФЭС была реализована **система термического осаждения** покрытий с помощью вакуумной ячейки Кнудсена, оснащенной инфракрасным нагревателем [4].

С помощью ячейки Кнудсена на поверхность монокристалла германия Ge(111), был осажден слой молекул фторида фуллерена C₆₀F₁₈ [5]. Полученные образцы были исследованы методом фотоэлектронной спектроскопии перед и после нанесения пленки (см. рисунок). Данная система была описана математически [6], что позволило расшифровать электронные состояния в спектре валентной зоны. Расчетная модель позволила описать процесс адсорбции фторида фуллерена на поверхности монокристалла и

определить тип связи молекулы с подложкой. В системе C₆₀F₁₈/Ge(111) наблюдается физическая адсорбция.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

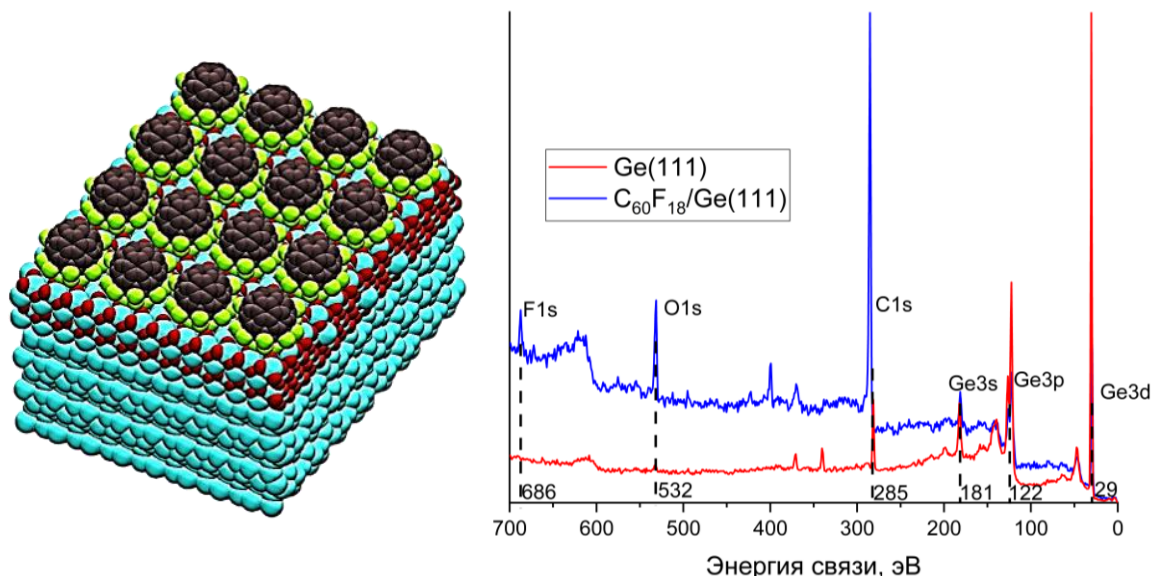


Рис. Сравнения обзорных спектров для чистого монокристалла Ge(111) и системы C₆₀F₁₈/Ge(111)

1. Fuller, N. et. al. (2024). Modulation of Electrostatic Potential in 2D Crystal Engineered by an Array of Alternating Polar Molecules. *Nano Letters*, 24(33), 10258–10264. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c02555>
2. Natan, A., Kronik, L., Haick, H., & Tung, R. T. (2007). Electrostatic properties of ideal and non-ideal polar organic monolayers: Implications for electronic devices. *Advanced Materials*, 19(23), 4103–4117. <https://doi.org/10.1002/adma.200701681>
3. Tanuma, S., Powell, C. J., & Penn, D. R. (1988). Calculations of electron inelastic mean free paths for 31 materials. *Surface and Interface Analysis*, 11(11), 577–589. <https://doi.org/10.1002/sia.740111107>
4. Bairagi K. et al. // *Surf. Sci.* 2015. V. 641. P. 248. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2015.05.020>
5. Лебедев А.М. et. al. // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* 2021. № 10. С. 44. <https://doi.org/10.31857/S1028096021100125>
- 6 Shramkov E. A. et. al. // *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2025. V 19(2), P. 460–464. <https://doi.org/10.1134/S1027451025700685>

СТРУКТУРА ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

*А.В. Шуленина^{1,2}, С.В. Кудашев³, И.А. Полицимако³, Г.С. Петерс^{2,1},
В.В. Климов³, В.Ф. Желтобрюхов³*

¹ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва*

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

³ *Волгоградский государственный технический университет, Волгоград*

Фторсодержащие полимеры привлекают интерес исследователей в связи с уникальными свойствами получаемых материалов (повышенным уровнем упруго-прочностных и триботехнических характеристиками, термо-, свето-, озono – и биостойкостью, гидролитической устойчивостью и пониженной горючестью). Для стабилизации свойств эластичных полиуретанов особое значение имеют реакционно-способные поли- и перфторированные соединения, которые могут вводиться, как на стадии синтеза полимера, так и поверхностной модификацией готовых изделий. Учитывая многокомпонентность реальных рецептур, применяемых для получения монолитных спортивных, кровельных и гидроизоляционных покрытий, представляет интерес синтез новых фторсодержащих модификаторов полиуретановых эластомеров, которые содержат несколько реакционных центров. К числу таких модифицирующих добавок могут быть отнесены продукты N-полифторалкилирования трис-(2-аминоэтиламина) полифторированными спиртами. Синтезируемые таким образом полифторированные тетрамины содержат в своей структуре аминогруппы различной степени замещенности и фторированный фрагмент. Сочетание различных по реакционной способности центров способно оказывать комплексное влияние на процесс отверждения, структуру и свойства конечного материала.

В данной работе методом малоуглового рентгеновского рассеяния исследованы пленки полиуретановых эластомеров, модифицированных продуктом бисалкилирования трис-(2-аминоэтиламина) 1Н,1Н,9Н-тригидроперфторнонан-1-олом. Определены основные размерные характеристики упорядоченных областей. Обнаружено, что каждая пленка сохраняет свою структуру в температурном диапазоне от -20 до +45⁰С. Тем не менее, ввод модификатора выделяет определенный преимущественный размер. Полученные результаты сопоставляются с результатами ЯМР и электронной микроскопии, что позволяет конкретизировать результаты комплекса проведенных инструментальных методов веществ, и является научной основой для дальнейшего совершенствования рецептур полиуретановых материалов.

Исследования выполнены на станции БиоМУР с использованием уникальной научной установки «Курчатовский источник синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» НИЦ «Курчатовский институт».

ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛЮМИНОФОРЫ ЛАНТАНОИДОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

А.В. Шурыгин¹, В.И. Немтинов¹, Я.Г. Зернов¹, В.Б. Зубченко¹, М.А. Себто¹

¹ Дальневосточный федеральный университет, Владивосток

Основным функциональным свойством органических люминофоров является УФ-Вид преобразования излучения. Использование простых и доступных молекул производных бензойной кислоты в качестве «антенных» лигандов позволяет получать органические люминофоры с высоким квантовым выходом и низкой себестоимостью. Исследование таких комплексов выявило сложности в кристаллизации, не определенной пространственной структуре, чувствительности к падающему излучению и склонности к полимеризации.

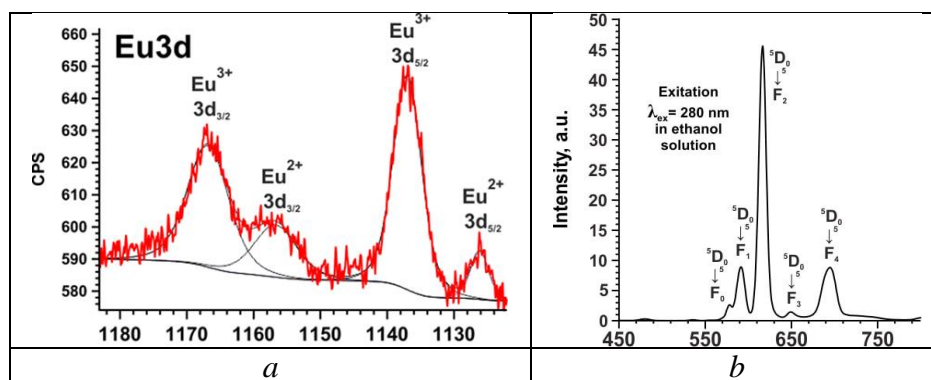


Рисунок 1. РФЭ спектр Eu3d с двумя валентными состояниями (a) и эмиссионный спектр (b) в видимой области Eu(MBA)_n

Для ряда синтезированных комплексов на основе Eu было обнаружено восстановление Eu³⁺ до Eu²⁺ под действием рентгеновского излучения AlK α с энергией 1486,6 эВ в вакууме, которое сохранялось после прекращения облучения. Синтезированные соединения не поддаются кристаллизации, однако по данным порошковой рентгеновской дифракции образцы являются кристаллическими. Применение метода спектроскопии рентгеновского поглощения позволило определить координационное окружение и доказать теоретическую модель. Обнаруженные свойства и высокая доступность реактивов делает эти материалов перспективной основой для создания функциональных покрытий и люминесцентных материалов с уникальными свойствами.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZNS-2024-0013).

КОРРЕЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ СИСТЕМЫ Ti-Al

Р.М. Эмиров, М.Х. Рабаданов, ДК Палчаев, Ж.Х. Мурлиева, М.Э. Исхаков

Дагестанский государственный университет, Махачкала

Интерметаллиды сочетают в себе свойства металлов и полупроводников, что характерно для систем, где переходные металлы взаимодействуют с металлами или металлоидами из разных блоков периодической таблицы [1]. Интерметаллиды на основе Ti могут обладать сверхструктурами во всем интервале температур существования, а также широкими областями гомогенности [2].

Одновременные измерения температурных зависимостей электросопротивления и линейного расширения интерметаллидов на основе титана и алюминия позволили установить соответствующие корреляции между этими характеристиками при нагревании и охлаждении.

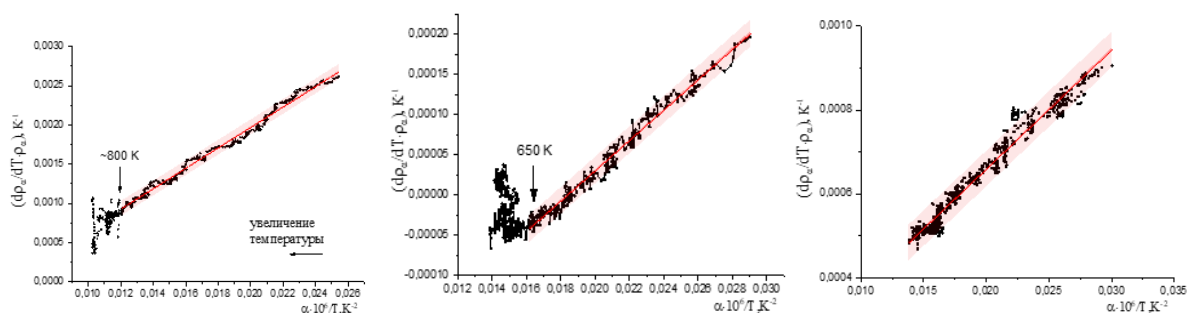


Рисунок 1. Корреляционные зависимости между температурным коэффициентом электросопротивления (ТКС) и коэффициентом линейного расширения, отнесенным к температуре ($\alpha(T)/T$), интерметаллидов системы Ti-Al с содержанием алюминия 0, 33 и 50% соответственно.

Из рисунка 1 видно, что для интерметаллидов системы Ti-Al с различным содержанием алюминия (0, 33 и 50 %) прослеживается явная прямая корреляция между электрическими и термодиформационными параметрами. Однако для стехиометрического состава с 25 % содержанием алюминия, который имеет нехарактерный для металлических соединений температурный ход электросопротивления, корреляционная зависимость между ТКС и $\alpha(T)/T$ не наблюдается.

1. Лиханов, М. С., Шевельков, А. В. (2020). Интерметаллиды с неметаллическими свойствами. Известия Академии наук. Серия химическая, (12), 2231-2255
2. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Козлов Э.В. и др. Кристаллогеометрические и кристаллохимические закономерности образования бинарных и тройных соединений на основе титана и никеля. Томск: Изд-во ТПУ, 2011. С. 312.

GISAXS НА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНКАХ $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$

*О.Ю. Юракова¹, М.А. Андреева¹, Р.А. Баулин^{1,2}, Е.А. Ганьшина¹,
М.Н. Борисов², С.Н. Якунин²*

¹ *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
физический факультет*

² *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

Карты GISAXS от плёнок $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ с различным содержанием металлических нанокластеров в диэлектрической матрице получены на станции ФАЗА "КИСИ-Курчатов" на длине волны $\lambda = 0,86 \text{ \AA}$ и угле скольжения падающего излучения $\alpha_i = 0,4^\circ$ [1]. Для всех образцов на измеренных картах GISAXS наблюдаются (рис. 1) дифракционное полукольцо, отражающее некоторую радиальную корреляцию в расположении кластеров, боковые пятна, указывающие на частичную квазикристалличность в расположении кластеров, вертикальный стержневой максимум рассеяния на шероховатостях поверхности, пик Ионеды и пик зеркального отражения.

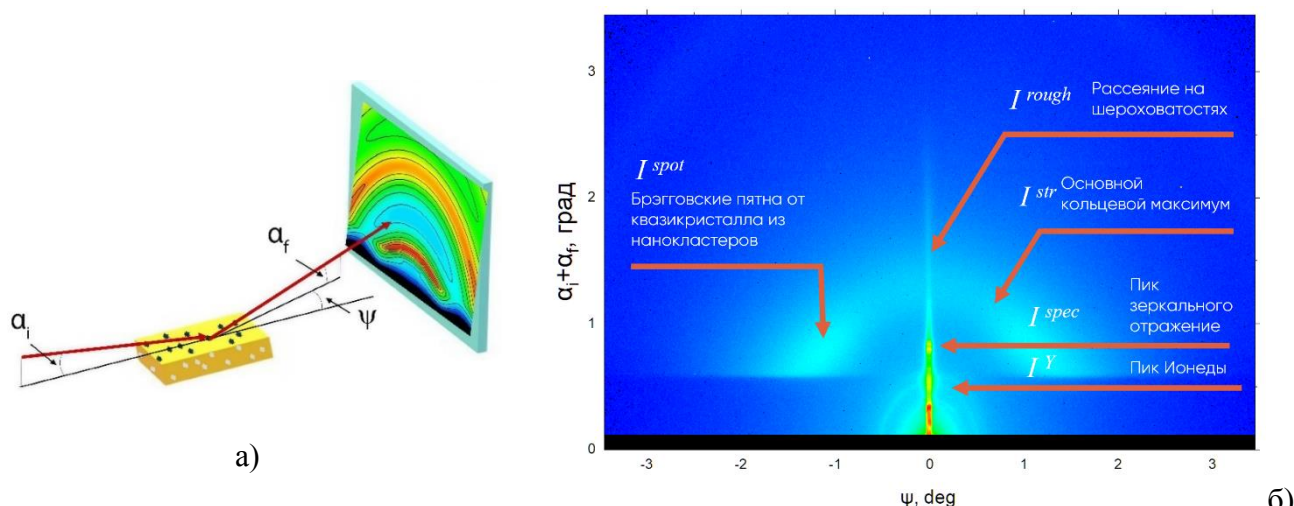


Рис. 1. а) Геометрия эксперимента; б) Типичная карта GISAXS от одного из образцов.

Для описания дифракционного полукольца мы использовали модель радиального паракристалла с поправками на преломление в скользящей геометрии [1]. Разработанная программа подгонки экспериментальных карт использует радиальные сечения карт и включает учет всех отмеченных вкладов. Обработка позволила выявить, в частности, различие латеральной и нормальной периодичности в расположении нанокластеров.

1. О. Ю. Юракова, Р. А. Баулин, М. А. Андреева, Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия 80(1), 2510502 (2025).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОСЕТИ CHGNet ДЛЯ РАСЧЕТА ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ Rh-СОДЕРЖАЩЕГО ЦЕОЛИТА ZSM-5

Б.Ю. Янжимаев¹, А.А. Велигжанин¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Для интерпретации экспериментальных спектров поглощения рентгеновских лучей, регистрируемых для катализаторов на основе Rh-содержащих цеолитов, важно надёжно описывать локальную структуру материала. Такие системы рассматриваются в качестве перспективных катализаторов для процессов окислительной конверсии метана и синтеза кислородсодержащих продуктов, где характер окружения атомов Rh (изолированные центры или кластеры) определяет активность и селективность [1,2]. Одним из подходов к исследованию локальной геометрии является использование нейросетевых межатомных потенциалов.

В работе рассматривается применение готовой нейросети CHGNet [3] для оптимизации геометрии Rh-содержащего цеолита ZSM-5. Анализ локальной структуры проводится с учётом вариаций исходных условий, включая случайные смещения атомов и изменение размеров кластеров, выделяемых из кристаллической решётки. Такой подход позволяет оценивать воспроизводимость оптимизаций и выявлять факторы, влияющие на устойчивость получаемых конфигураций. Полученные модели локальной структуры предполагается использовать для подготовки входных данных к расчётам спектров поглощения рентгеновских лучей и их последующего сопоставления с экспериментом.

1. Bunker G. Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy. – Cambridge University Press, 2010.
2. Храмов Е.В. и др. Synchrotron Radiation Techniques for Catalysts and Functional Materials, Novosibirsk, Russia, Oct 31 – Nov 3, 2022.
3. Deng B. et al. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling // Nat. Mach. Intell. – 2023. – Т. 5, № 9. – С. 1031–1041.