



МЕЖДУНАРОДНЫЙ ФОРУМ
ПРИРОДОПОДОБНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ



**КУРЧАТОВ
ФСНЭ-2024**

21-23 ОКТЯБРЯ 2024



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Оглавление

Секция 1 Синхротронное излучение и нейтроны в материаловедении	13
А.П. Менушенков Сверхбыстрая динамика электронных и структурных корреляций в высокотемпературных сверхпроводниках	14
С. Г. Титова, Е.В. Стерхов, Т.В. Кузнецова, В.И. Гребенников, С.В. Пряничников, А.Л. Тригуб Исследование двойного манганита $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ методами XANES и XMCD.....	15
А.В. Аракчеев, М.Д. Мамонов, А.П. Кройтор, А.А. Дмитриенко, А.Г. Мартынов, С.Л. Селектор Принудительная супрамолекулярная сборка тетрапиррольных комплексов d-металлов в монослоях ленгмюра	16
А.А. Гуда, Д.Н. Горбунов, М.В. Ненашева, Б.О. Проценко, Е. Храмов, А.В. Солдатов In situ диагностика каталитических реакций при высоком давлении методом спектроскопии рентгеновского поглощения	17
Н.В. Волков, А.В. Бакиров Исследование секторообразных производных бензолсульфоновой кислоты с двухвалентными катионами бария с использованием источника СИ	18
А.М. Асылкаев, К.А. Тен, Э.Р. Прууэл, А.О. Кашкаров, В.П. Халеменчук, А.А. Студенников Исследование сжатия конструкционных материалов под действием взрывчатых веществ с помощью синхротронного излучения.....	19
Н.П. Иванов, А.Л. Тригуб, Е.К. Папынов Механизмы адсорбции U(VI) слоистыми двойными гидроксидами ZN-AL-СДГ по данным exafs-спектроскопии	20
В.В. Денисов, А.Д. Тересов, Н.Н. Коваль, Н.А. Ратахин, А.Н. Шмаков, А.А. Леонов, С.С. Ковальский, Ю.А. Денисова, Е.В. Островерхов, Д.Ю. Игнатов, М.В. Савчук, М.С. Сыртанов Ключевые результаты проекта «In situ методы синхротронных исследований многослойных функциональных структур с уникальными параметрами и свойствами, созданных пучково-плазменной инженерией поверхности»	21
С.Ю. Котцов, Г.П. Копица, А.Е. Баранчиков, А.А. Павлова, А.О. Бадулина, Ю.Е. Горшкова, Н.А. Селиванов, Н.П. Симоненко, М.Е. Никифорова, В.К. Иванов Исследование надмолекулярной организации ионогелей на основе ионной жидкости OМIM VF_4 и Аэросила методом МУРР	22
О.Н. Лис, Д.П. Козленко, С.Е. Кичанов, Е.В. Лукин, И.Ю. Зель Влияние высокого давления на кристаллическую, магнитную структуру и колебательные спектры ван-дер-ваальсовых магнетиков	24
В.Д. Жакетов Исследования низкоразмерных 2d магнитных и сверхпроводящих гетероструктур с помощью рефлектометрии поляризованных нейтронов.....	25
П.Е. Ромашко, Н.В. Проскурнина, М.А. Сёмкин Применение нейтронного излучения для исследования литий-ионных материалов.....	26
С.В. Рогожкин Исследование наноструктуры дисперсно-упрочненных оксидами сталей методами малоуглового рассеяния нейтронов	27
И.Д. Карпов, В.Т. Эм	

Исследование остаточных напряжений методом дифракции нейтронов высокого пространственного разрешения	28
А.Д. Ковалев, М.А. Сёмкин, П.А. Борисова, И.В. Щетинин Магнитные свойства шпинелей $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($x = 0,5; 1$), полученных механохимическим синтезом	29
Н.Н. Исакова, А.И. Калюканов, И.П. Макарова, А.Л. Толстихина, Р.В. Гайнутдинов, В.А. Коморников, А.Л. Васильев Закономерные связи состава, атомной, реальной структуры и свойств кристаллов-суперпротонов	30
Секция 2 Синхротронное излучение и нейтроны для биологии и наук о жизни	31
И.А. Артюков, Г.П. Арутюнов, Д.О. Драгунов, В.М. Митрохин, А.В. Соколова, В.В. Соколова, Р.М. Фещенко, A. Gianoncelli, S. Pollastri Исследование следов натрия в тканях сердца методом флуоресцентной рентгеновской микроскопии с использованием синхротронного излучения	32
А.А. Павлычев, К.О. Брыкалова, А.В. Корнеев, Н.Н. Корнилов, А.А. Черный Возрастные изменения атомно-молекулярной архитектуры костной ткани: стратегия их замедления	33
А.Н. Соловьев, Я.В. Кизилова, В.И. Потетня, С.Н. Корякин Эффективные вычислительные подходы к биологическому планированию нейтронозахватной терапии	34
О.Д. Шнырков, Е.Г. Яшина, К.А. Пшеничный, С.В. Григорьев Исследование фрактальной структуры лиственных и хвойных деревьев с помощью моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов	35
В.Р. Самыгина, К.М. Дубова, А.В. Соколов, Ю.Н. Уткин, П.В. Дубовский Кристаллическая упаковка как инструмент исследования функциональных особенностей белков	36
А.А. Воронова, А.Ю. Васильков, А.В. Наумкин, Э.В. Штыкова Конъюгаты биметаллических наночастиц AuFe с метотрексатом: синтез, структура и биологическая активность	37
А.Н. Третьякова, П.Р. Волошина, А.В. Наумкин, А.Ю. Васильков Композиты на основе полимеров (коллаген, хитозан), модифицированных наночастицами серебра и меди: синтез, исследование методами рентгеновской спектроскопии и биологическая активность	38
П.П. Снетков, С.Н. Морозкина, А.Е. Романов Исследование полимерных матриц на основе гиалуроновой кислоты методом малоуглового рентгеновского рассеяния	39
Секция 3 Электронная микроскопия	40
Н.И. Боргардт, О.В. Подорожний, А.В. Румянцев, Г.С. Киреев, А.Е. Иешкин Исследование аморфизации кремния ионами ксенона методами электронной микроскопии и молекулярно-динамического моделирования	41
И.А. Каратеев Комплекс дифракционного картирования для просвечивающей электронной микроскопии	42
И.Н. Трунькин, А.Г. Иванова, Н.Б. Болотина, В.Я. Покровский, С.Г. Зыбцев, А.Л. Васильев Исследование структуры NbS_3 методами электронной микроскопии	43
Я.Л. Шабельникова, Е.И. Суворова Исследование методом ПЭМ морфологии и размеров треков от тяжелых ионов энергией 0.08-0.4 МэВ/нуклон в YBCO и выделениях его вторичных фаз	44

Е.Б. Якимов, Ю.О. Куланчиков, П.С. Вергелес, Е.Е. Якимов Влияние облучения электронным пучком на спектры катодолюминесценции органо-неорганического перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$	45
Т.Д. Пацаев, Е.В. Ястремский, К.Г. Антипова, А.Л. Васильев Исследование <i>in situ</i> механических свойств полимерных материалов в камере растрового электронного микроскопа	46
С.Д. Сметанникова, А.И. Синкевич, Е.М. Семенова, Г.Г. Дунаева Применение данных магнитно-силовой микроскопии для моделирования полей рассеяния объемных одноосных ферромагнетиков.....	47
Л.В. Соколов Исследование поверхности по границе раздела кремния со слоем стекловидного диэлектрика на образце МЭМС-КНИ чипа преобразователя давления методом растровой электронной микроскопии	48
Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах Тормозная способность вещества для фокусированного моноэнергетического пучка легких ионов средних и низких энергий	49
А.В. Овчаров, И.А. Каратеев, Е.И. Суворова, П.Н. Дегтяренко, А.Л. Васильев Микроструктурный анализ ВТСП лент 2-го поколения на основе (RE)BCO с искусственными центрами пиннинга различной природы.....	50
М.С. Лукасов, Е.И. Суворова, А.Г. Иванова, Н.А. Архарова, Ф.Ю. Соломкин, Ф.А. Буффа Фазовый состав и термоэлектрические свойства кристаллов $\text{Cr}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_2$, выращенных методом направленной кристаллизации.....	51
А.С. Приходько, Е. Залло, Р. Каларко, Н.И. Боргардт Статистический анализ геометрических параметров и структурные исследования нанообразований на поверхности пленки $\text{Ge}_3\text{Sb}_2\text{Te}_6$	52
Е.Ю. Герасимов, А.В. Капишников, Е.А. Смаль, С.В. Цыбуля Исследование процессов сегрегации частиц переходных металлов на поверхности перовскитных фаз методами просвечивающей электронной микроскопии	53
В.Р. Самыгина, Е.Б. Пичкур, М.Ф. Ворович, А.А. Ишмухаметов КриоЭМ структуры инактивированных флавиринов	54
Т.Н. Баймухаметов, О.В. Кравченко, Ж.А. Афолина, А.П. Корепанов Крио-ЭМ структура большой рибосомной субчастицы <i>Escherichia coli</i> , собранной <i>in vivo</i> в отсутствие жизненно важного рибосомного белка uL5	55
А.В. Мохов, П.М. Карташов, Т.А. Горностаева, А.П. Рыбчук Роль электронной микроскопии в обнаружении на Луне самородных форм лантаноидов....	56
Т.А. Горностаева, А.П. Рыбчук, А.В. Мохов, П.М. Карташов Низкотемпературные конденсаты из импактитовкратера лонар (Индия) и лунного реголита	57
А.Ю. Лобода, Н.В. Леонова, П.И. Калинин, А.В. Мандрыкина, С.Н. Малахов, Е.С. Куликова, Е.Ю. Терещенко, Е.Б. Яцишина Исследование материала паст в заполнении орнамента сосудов раннего железного века из могильника Песчаный IV	59
Е.А. Созонтов, Э.А. Грешников, П.Г. Гайдуков, П.В. Гурьева, Е.С. Коваленко, С.Н. Малахов, И.Н. Трунькин, М.М. Мурашев, О.А. Кондратьев Перстневые вставки XIV века из раскопок немецкого двора в Великом Новгороде: комплексный анализ методами естественных наук	60
Секция 4 Аппаратно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов	61
А.В. Солдатов, А.А. Гуда, Б.О. Проценко, И.А. Панкин, С.А. Гуда	

Диагностика материалов на основе спектроскопии рентгеновского поглощения - на пути к operando нанометрологии.....	62
Э.Р. Прууэл, А.А. Студенников, И.А. Рубцов	
Статус изготовления экспериментальной станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» ЦКП «СКИФ».....	63
Д.А. Зверев, М.Н. Сороковиков, В.А. Юнкин, С.М. Кузнецов, А.А. Снигирев	
Кремниевые планарные интерферометры для источников 4-ого поколения	64
С.Ю. Турищев, Е.В. Парина, О.А. Чувенкова	
Расширение методов спектроскопии и микроскопии функциональных материалов в ультрамягкой рентгеновской области синхротронного излучения	65
Постерная сессия	66
Секция 1 Синхротронное излучение и нейтроны в материаловедении.....	66
С 101 О.В. Акимова, Е.С. Куликова	
Исследование структуры функциональных сплавов на основе палладия.....	67
С 127 Э.Ш. Алекперов, Г.Б. Ибрагимов, А.М. Назаров, А.М. Нариманзаде	
Влияние атомов Ge на формирование аморфных пленок TlGaSe ₂	68
С 102 С.В. Амарантов	
Определение параметров нанокмполитов "ядро-оболочка" методом рентгеновского малоуглового рассеяния	69
С 103 А.В. Антипенко	
Комплексный подход к изучению археологических находок и предметов музейных коллекций из цветного и драгоценного металла.....	70
С 104 Л.А. Арбанас, И.А. Каурова, Г.М. Кузьмичева, А.Л. Тригуб, А.В. Дорохов, В.Л. Маноменова	
Состав и строение кристаллов и растворов NiSO ₄ ·6H ₂ O:Co. Дифракционные и комплементарные методы.	71
С 105 А.О. Беляева, А.Л. Васильев, И.А. Субботин, Ю.М. Чесноков, В.В. Изюров, К.А. Меренцова, М.С. Артемьев, С.С. Дубинин, А.П. Носов, Э.М. Пашаев	
Особенности микроструктуры тонких пленок ортоферрита иттрия на сапфире	72
С 106 М.А. Благоев, Н.Г. Спицына, А.С. Лобач, С.З. Симонов, Л.В. Зорина	
Первая кристаллическая структура анионного комплекса Fe(III) на основе тиосемикарбазона пировиноградной кислоты с катионом лития	73
С 107 Д.А. Блиникова, Д.М. Цымбаренко	
Stimuli-responsive координационные полимеры на основе пентафторпропионатов P3Э: синтез, структура, свойства.....	74
С 112 П.А. Борисова, М.С. Блантер, С.С. Агафонов, С.Н. Николаев	
Влияние легирующих элементов на фазовые превращения фуллерена C ₆₀ при высоких давлениях и температурах.....	75
С 108 В.А. Гаас, П.М. Корусенко, Е.В. Храмов, О.В. Петрова, А.А. Верещагин, О.В. Левин, К.А. Бакина, Р.Н. Скандакоев, А.С. Виноградов	
Сравнительное исследование атомно-электронной структуры координационных узлов в молекулярных комплексах [M(Salen)] (M=Co, Ni, Cu) по данным рентгеновской абсорбционной спектроскопии	76
С 109 Я.Н. Гладченко-Джевелекис, Г.Б. Сухарина, А.М. Ермакова, Е.Е. Поносова, К.А. Кулаев, А.С. Бабаянц, В.В. Прядченко, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев	
Методика определения структуры медных центров Cu-MOR на основе компьютерного моделирования с элементами машинного обучения	77
С 110 А.И. Ильин, В.К. Егоров, А.А. Иванов	
Вариации распределения элементного состава по толщине плёнок YBaCuO при лазерном осаждении из одной мишени	78

С 153 А.А. Калоян, Ю.Л. Репченко, К.М. Подурец, Ю.Н. Пальянов, А.Ф.Хохряков Исследование структурного совершенства синтетических монокристаллов алмаза применяемых в качестве рентгенооптических элементов	79
С 113 Г.П. Копица, С.Ю. Котцов, Х.Е. Еров, Ю.Е. Горшкова, К.Б. Устинович, Н.П. Симоненко, А.Е. Баранчиков, В.К. Иванов Мезоструктура высокопористого кремнезема, полученного путем пиролиза силикатно- полимерных композитов.....	80
С 114 А.Д. Крот, Е.В. Тарарушкин, А.Л. Тригуб, И.Э. Власова Локальная структура комплексов уранил-катиона, сорбированного на глинистых минералах.....	81
С 115 И.А. Лихачев, И.А. Субботин, Е.А. Кравцов, Д.И. Десятериков, Э.М. Пашаев Влияние кристаллической структуры тонких слоёв гидридов гадолиния в периодических системах Fe/GdH _x на их магнитные свойства.....	82
С 116 А.С. Лобач, Н.Г. Спицына, М.А.Благов, А.И. Дмитриев, Н. Н. Дремова, М.В. Жидков, С.В. Симонов Пленочные гибридные материалы на основе наноллистов оксида графена и спин- переменной соли [Et ₄ N][Fe ^{III} (5Cl-thsa) ₂]	83
С 117 С.А. Лушников, Т.В. Филиппова, С.С.Агафонов Изменение объема решетки легированных интерметаллических соединений при взаимодействии с водородом	84
С 111 И.Д. Манько, А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына Киральный спиновый ближний порядок и особенности малоуглового рассеяния нейтронов в геликоидальных ферромагнетиках с нецентросимметричной кубической структурой (на примере MnSi).....	85
С 119 В.А. Матвеев, Н.Н. Губанова, О.А. Шилова Использование методов рентгеновской рефлектометрии и дифракции в скользящей геометрии для исследования тонких пленок допированных наночастицами металлов платиновой группы	86
С 120 А.Н. Матвеева, К.Ю. Терентьев, А.А. Быков, В.А. Орлова Особенности эффекта Яна-Теллера в двухслойном манганите лантана La _{1.4} Sr _{1.6} (Mn _{0.9} Co _{0.1}) ₂ O ₇	87
С 121 А.Н. Матвеева, И.А.Зобкало Магнитное упорядочение и киральность в мультиферроике DyMnO ₃	88
С 122 Р.М. Меншарпов, А.В. Бакиров, А.С. Семкина, Н.А. Иванова, Д.Д. Спасов, В.Н. Фатеев Исследование влияния отрицательных температур на структуру модифицированных SiO ₂ мембран Nafion [®] методом малоуглового рентгеновского рассеяния	89
С 123 М.М. Мурашев, В.В. Гурьев, Д.Н. Диев, А.В. Наумов, А.В. Поляков, М.Н. Макаренко, С.В. Шавкин Исследование концевых соединителей токонесущих элементов на основе ВТСП с помощью неразрушающих методов нейтронной визуализации	90
С 124 А.Г. Муштаков, В.А. Лазаренко, И.А. Каурова, Г.М. Кузьмичева, Е.Б. Маркова Получение, состав и особенности строения монокристаллов металлоорганического полимера CuBTC типа НКUST-1	91
С 125 А.М. Назаров, Р.М. Садыгов Рост эпитаксиальных пленок Pb _{1-x} Mn _x Te (Ga) на монокристаллах PbTe	92
С 126 А.М. Назаров, Ю.И. Алыев, Г.И. Багирова Процесс фазообразования в тонких пленках AgCuS	93
С 128 В.Г. Назин Исследования гадолиния методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронов.....	94

С 129 Е.Ю. Понкротова, Д.А. Зуев Создание и исследование лазерно-индуцированных покрытий диоксида титана методами электронной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии для задач фотокатализа.....	95
С 130 Р.А. Садыков, В.П. Глазков, Г.Г. Шабунина Период магнитной спирали в шпинели $^{114}\text{Cd}_{0,3}\text{Zn}_{0,7}\text{Cr}_2\text{Se}_4$ под давлением	96
С 131 В.А. Спиридонов, Д.Ю. Панов, А.Ю. Иванов, П.А. Богданов, Д.А. Бауман, А.Е. Романов Исследование кислородных вакансий в монокристалле $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$	97
С 132 В.В. Срабионян, И.А. Викленко, М.П. Ветчинников, А.С. Липатьев, А.Л. Бугаев, Л.А. Авакян, Г.Ю. Шахгильдян, В.Н. Сигаев, Л.А. Бугаев Структура и оптические свойства центров серебра, сформированных в PZ стекле до и после обработки ФС лазером	98
С 133 В.И. Стегайлов, С.И. Тютюнников, С.П. Авдеев, О.В. Белов, И.П. Юдин, В.В. Карч Исследования радиационных свойств материалов с помощью реакций мультифрагментации (энергия пучка более 1гэв/нуклон): графит, ленты втсп, тантал, висмут, золото, уран, торий, актиниды, ленты втсп	99
С 134 В.И. Стегайлов, С.И. Тютюнников, О.В. Белов, С.В. Розов, И.П.Юдин, Н.Г. Шакун, В.Г. Картавенко, И.А.Щербаков, Е.В.Бармина, А.В.Симакин Исследование свойств высокоспиновых изомеров в области (N=88-89) в ядрах гольмия и европия методами ядерной и лазерной спектроскопии в рамках программы изучения радиационных свойств материалов	100
С 136 Е.А. Сульянова, Б.П. Соболев, В.И. Николайчик, А.С. Авилов Дефектная кристаллическая структура $\alpha\text{-Na}_{0,5-x}\text{R}_{0,5+x}\text{F}_{2+2x}$ (R = Dy–Lu, Y) по данным рентгеновской и электронной дифракции	101
С 137 А.Е. Суханов, П. В. Конарев, В.И. Тимофеев, Е.С. Смирнова, Г.С. Петерс , Ю.В. Писаревский, О.А. Алексеева, М.В. Ковальчук Октамер, как трехмерный фрагмент формирования кристалла дигидрофосфата калия .	102
С 138 Г.Б. Сухарина, А.М. Ермакова, Л.А. Авакян, Р.О. Алексеев, Г.Ю. Шахгильдян, В.И. Савинков, Н.А. Романов, А.А. Велигжанин, Л.А. Бугаев, В.Н. Сигаев Определение количественных параметров локальной атомной структуры стекол систем LNB и LTaB	103
С 140 А.Л. Тригуб, И.Н. Сенчихин, Е.С. Жаворонок Определение структуры комплексов Ag^+ с аминогруппами в среде олигооксипропилендиамина методами EXAFS и XANES.....	104
С 141 М.А. Фараонов, Н.Р. Романенко, А.В. Кузьмин, И.А. Якушев, С.С. Хасанов, Д.В. Конарев Кристаллическая структура, оптические и магнитные свойства координационных комплексов металлофталоцианинов.....	105
С 142 В.П. Халеменчук, К.А. Тен, Э.Р. Прууэл, М.М. Гусельников Оснастка для исследования взрывных процессов во взрывной камере с использованием синхротронного излучения.....	106
С 143 П.В. Чареева, А.Л. Тригуб, Д.А. Чареев, М.С. Никольский, Б.Р. Тагиров Зарядовое состояние Pt в бинарных соединениях	108
С 144 Е.Н. Черковский, О.М. Жигалина Моделирование атомных конфигураций интерфейсов $\text{CeO}_2\text{-Cu}$	109
С 145 К.Ю. Черноглазов, С.Н. Николаев, Р.Г. Чумаков, Е.В. Храмов, А.В. Ситников, В.А. Демин, В.В. Рыльков Структурные особенности изолирующей матрицы LiNbO_3 композитных мемристоров типа $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$	110

С 146 О.А. Чувенкова, Н.И. Бойков, С.В. Рябцев, Е.В. Парина, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев, Ю.С. Какулия, С.С. Титова, К.А. Фатеев, С.Ю. Туришев	
Синхротронные исследования электронного строения и состава тонких эпитаксиальных и магнетронных слоев оксида олова	111
С 154 К.М. Шамьюнов, А.Л. Тригуб	
Анализ рентгеновских спектров марганца с использованием свёрточной нейронной сети	112
С 147 Е.А.Шрамков, Р.Г. Чумаков	
Расшифровка фотоэлектронных спектров валентной зоны кластерных структур Ge(111), GeO ₂ /Ge(111), C ₆₀ F ₁₈ /Ge(111), C ₆₀ F ₁₈ /GeO ₂ /Ge(111)	113
С 148 О.Э. Шубабко, Н.А. Попова, М.А. Вартанян	
Структурные изменения в дисперсных порошках при механоактивации.....	115
С 149 А.В. Шуленина, А.А. Велигжанин, Г.С. Петерс, И.И. Юрасова, Н.И. Юрасов	
Анализ структуры наносфер фотонных кристаллов по данным малоуглового рассеяния рентгеновских лучей	116
С 150 А.В. Шурыгин	
Структура светотрансформирующих материалов на основе органических комплексов Yb(III) по данным EXAFS	117
С 151 И.И. Юрасова, Н.И. Юрасов, А.А. Велигжанин, Г.С. Петерс, Д.Р. Стрельцов	
Результаты рентгеновского анализа образцов искусственного опала, синтезированного, при различных молярных соотношениях ВОДА/ТЭОС в исходной смеси для выделения субглобулярной структуры наносфер	118
С 152 И.А. Якушев, Е.А. Сосунов	
Синтез и исследование каталитически активных биметаллических материалов на основе палладия и платины с применением рентгеновской спектроскопии EXAFS и XANES ..	119
Секция 2 Синхротронное излучение и нейтроны для биологии и наук о жизни	120
С 201 С.Ч. Гагиева, М.Д. Евсева, В.С. Богданов	
Синтез и исследование катализаторов на основе новых комплексов титана (IV) с лигандами ОХ-типов в реакции полимеризации олефинов	121
С 202 П.А. Гергележиу	
Особенности колебательных спектров ибупрофена по результатам комплексных исследований	122
С 203 Л.А. Иванова, Г.П. Копица, А.Д. Япрынцева, А.Е. Баранчиков, Д.В. Лебедев, А.А. Кульминская	
Пути формирования кристаллической и надмолекулярной структуры биоминералов CaCO ₃ , осажженных <i>V. cereus</i>	123
С 204 М.Ю. Литвинов, А.И. Кашурин, А.В. Подшивалов	
Анализ структуры дисперсий (био)полиэлектролитных комплексов на основе хитозана и желатина с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния синхротронного излучения	125
С 205 В.Р. Самыгина, А.В. Власкина, Е.Б. Пичкур, Д.Н. Щербаков, Е.Д. Мордвинова, Е.А. Волосникова, Ю.Н. Малахова, К.В. Николаев, А.В. Рогачев, Н.Е. Малышева, Н.Н. Новикова, М.В. Ковальчук	
Исследование взаимодействия S-белка коронавируса с изолированными моделями клеточных мембран.....	126
С 206 Н.С. Стрельникова, В.Е. Балакин, О.М. Розанова, Т.А. Белякова, Е.Н. Смирнова, А.Е. Шемяков	
Определение относительной биологической эффективности в зависимости от ЛПЭ и дозы при облучении мышей протонами с энергией 100 МэВ	127
С 209 С.С. Титова, Л.А. Осминкина, Ю.С. Какулия, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев,	

А.А. Кудрявцев, Е.В. Парина, О.А. Чувенкова, С.Ю. Турищев Влияние поверхностей, несущий пробу гибридного материала «клетки млекопитающих – наночастицы кремния» на исследования синхротронным методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии	128
Секция 3 Электронная микроскопия	130
С 301 А.С. Авиллов, А.К. Кулыгин, Н.В. Садовская Особенности атомного строения аморфной фазы политетрафторэтилена (ПТФЭ) по данным электронной дифракции	131
С 302 В.В. Артемов, В.И. Бондаренко, Д.Б. Трушина Микроструктура микронных и субмикронных частиц ватерита по данным 3D ФИП томографии	132
С 303 Е.Б. Баскаков, С.И. Супельняк, Д.Н. Хмеленин Применение матрицы анодированного оксида алюминия для синтеза наноструктур SmS	133
С 304 М.А. Березин, А.А. Зайцев, Б.Ю. Романенко, П.А. Логинов Фуллеренизация алмаза при облучении электронным пучком в колонне ПЭМ	134
С 305 Р.Л. Волков, И.М. Гаврилин, И.С. Маринкин, Н.И. Боргардт Изменение поверхностных наноструктур на основе Ge-Co-In при использовании в литий-ионных аккумуляторах	135
С 306 И.С. Волчков, А.Э. Муслимов, А.В. Буташи, В.М. Каневский Свойства покрытий Al ₂ O ₃ -AlN, формируемых при воздействии электродуговой азотной плазмы	136
С 307 А.М. Гусева, А.И. Синкевич, С.Д. Сметанникова, Е.М. Семенова Определение параметров доменной структуры монокристаллов RFe ₁₁ Ti по данным магнитно-силовой микроскопии	137
С 308 И.М. Долуденко, И.С. Волчков, Д.Р. Хайретдинова, В.М. Каневский Анизотропная проводимость металлполимерных композитов полученных методом матричного синтеза	138
С 309 А.В. Дудиловская, А.И. Иванова, О.Е. Журавлев, Е.В. Барабанова Применение ионной жидкости в сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии	139
С 310 О.М. Жигалина, Д.Н. Хмеленин, А.В. Атанова Структура композитов на основе пористых пленок PZT	140
С 311 Г.С. Киреев, А.С. Приходько, Н.И. Боргардт Определение толщины наноразмерных поликристаллических слоев в гетерокомпозициях методом просвечивающей электронной микроскопии	141
С 312 В.В. Клечковская, А.С. Алексеев, С.Ю. Вязьмин, А.Б. Иванов, М.С. Лукасов Фотополимеризация пленок Ленгмюра–Шефера симметричных молекул дииновок N-арилкарбаматов с различным количеством СН ₂ групп в спейсерах	142
С 313 А.Н. Кочанов, И.Ж. Бунин Применение растровой электронной микроскопии для изучения микротрещин и субмикронных частиц горных пород	143
С 328 Д.А. Кравченко, А.Ю. Колосов, Н.И. Непша, Н.Ю. Сдобняков К вопросу комплексного исследования микро- и наноструктуры тернарного сплава CoCrMo: электронная микроскопия и атомистическое моделирование	144
С 314 В.А. Кузнецов, А.В. Румянцев, Р.Л. Волков, Н.И. Боргардт Анализ атомарной структуры аморфного слоя Mo-Si-N методом дифракции электронов	145
С 316 Е.Ю. Либерман, Е.И. Суворова, А.Ю. Васильков, А.А. Воронова, А.Ю. Переславцев, Т.В. Конькова	

Синтез, структура и каталитическая активность Ag/CeO ₂ в реакции окисления CO.....	146
С 317 Р.В. Лобзова, С.А. Писарева, И. Маркина, И.С. Простяков	
Строительная и облицовочная керамика: комплексное исследование структуры и состава фрагментов из коллекции Государственного музея-заповедника «Куликово Поле», Тула	147
С 318 Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах	
Тормозная способность вещества для фокусированного моноэнергетического пучка легких ионов средних и низких энергий.....	149
С 319 А.А. Михуткин, Т.Д. Пацаев, А.М. Азиева, А.Л. Васильев	
Методы конфокальной лазерной сканирующей, растровой электронной и флуоресцентной микроскопии в исследовании объектов тканевой инженерии.....	150
С 320 А.В. Моисеенко, Т.Б. Станишнева-Коновалова, М.В. Якунина, О.С. Соколова	
КриоЭМ реконструкция капсида гигантского бактериофага AR9.....	151
С 315 И.С. Павлов, М.А. Артамонов, В.В. Артемов, А.С. Кумсков, Е.Ю. Марчуков, А.Л. Васильев	
Особенности формирования дефектов инициирующих усталостные разрушения в гранулированном сплаве эп741нп	153
С 321 О.В. Подорожний, А.В. Румянцев, А.Е. Иешкин, Д.К. Миннебаев, Н.И. Боргардт	
Исследование имплантации низкоэнергетических ионов ксенона в кремний методами просвечивающей электронной микроскопии	154
С 322 А.Р. Решетняк, Р.Л. Волков, Н.И. Боргардт	
Электронно-микроскопический анализ пористости наноразмерного поликристаллического слоя	155
С 323 А.В. Румянцев, Р.Л. Волков, Н.И. Боргардт	
Формирование структур в многослойных подложках методом фокусированного ионного пучка	156
С 324 А.П. Рыбчук, А.В. Мохов, Т.А. Горностаева, П.М. Карташов	
Критерии обнаружения сконденсированного импактного материала при электронно-микроскопическом изучении	157
С 325 Н.В. Садовская, А.М. Таджибаев, А.С. Авилов, С.А. Хатипов	
Особенности морфологии продуктов изнашивания при трении радиационных модификаций композитов ПТФЭ	159
С 326 В.А. Сазонов, Р.Л. Волков, Н.И. Боргардт, К.В. Saddik, S. Fernández -Garrido, В. J. Garcia	
Электронно-микроскопические исследования эпитаксиального слоя GaP _x N _{1-x} , выращенного на подложке Si(100) с буферным слоем GaP.....	160
С 327 Г.А. Саратов, Т.Н. Баймухаметов, А.Л. Коневега, А.А. Кудряева, А.А. Белогуров	
Структура внешнего гептамерного α-кольца 26S иммунопротеасомы человека в преактивационном состоянии, выявленная методом криоэлектронной микроскопии с разрешением 3.6 Å	161
С 329 А.И. Синкевич, Е.М. Семенова, С.Д. Сметанникова	
Методы обработки изображений полей рассеяния одноосных ферромагнетиков, полученных с помощью магнитно-силового микроскопа.....	162
С 330 М.А. Степович, Т.П. Каминская, П.А. Поляков, М.Н. Шипко, А.А. Вирюс, В.В. Попов, А.В. Стулов, Е.С. Савченко	
Растровая электронная и сканирующая зондовая микроскопия аморфного сплава Fe ₇₃ (SiBNb) ₂₇ до и после его магнитоимпульсной обработки	163
С 331 В.А. Теджетов, Е.Н. Шефтель, Е.В. Харин, Г.Ш. Усманова	
Исследование метастабильного фазово-структурного состояния магнитномягких пленок FeTiV, полученных магнетронным осаждением	164

С 332 В.В. Ткачев, А.М. Фролов, К.Е. Пинчук, Г.С. Крайнова, В.С. Плотников Структура аморфного сплава $Co_{58}Ni_{10}Fe_5Si_{11}B_{16}$ в зависимости от условий закалки	165
С 333 М.Л. Федосеев, А.А. Зисман, С.Н. Петров, М.С. Михайлов, Н.Ф. Дроздова, А.О. Строганова Исследование дислокационной структуры низкоуглеродистых высокопрочных сталей методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии	166
С 334 Д.Р. Хайретдинова, И.М. Долуденко, Д.А. Улыбышев, Д.Л. Загорский, В.М. Каневский Исследование влияния параметров матричного синтеза на соотношение элементов в FeCoCu НП.....	167
С 335 Ю.М. Чесноков, С.В. Нестеров, Р.Г. Василев Структура надмолекулярных кластеров креатинкиназы в межмембранном пространстве митохондрий	168

Секция 4 Аппаратно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов

С 402 А.Л. Астафьев, М.А. Воеводина, А.А. Баранников, Д.А. Зверев, А.А. Снигирев Детектор высокого разрешения для визуализации рентгеновского излучения.....	170
С 404 А.А. Баранников, И.И. Лятух, Д.А. Зверев, В.А. Юнкин, А.А. Снигирев Полимерные преломляющие линзы для источников синхротронного излучения	171
С 405 А.А. Баранников, Д.А. Зверев, И.И. Лятух, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев Лабораторный комплекс «SynchrotronLike» для подготовки экспериментов на источниках 4-го поколения	172
С 406 А.В. Беклемишева, П.Ю. Макавеев, Е.И. Уксусов, С.С. Фанченко, П.А. Александров Об отказоустойчивых системах управления	173
С 407 А.С. Бусаров, А.В. Виноградов, Н.Л. Попов, И.А. Артюков Одноракурсная безлинзовая визуализация трёхмерных объектов.....	174
С 408 И.А. Викленко, В.В. Срабионян, В.А. Дурыманов, Я. Н. Гладченко-Джавелекис, Л.А. Авакян, Л.А. Бугаев Применение методов машинного обучения для определения структурных характеристик монометаллических атомных нанокластеров Pt по данным XANES спектроскопии	175
С 409 П. В. Гурьева, Е. С. Коваленко, М. М. Мурашев, К. М. Подурец, Д. В. Журавлев, Т. А. Ильина, Э. А. Грешников, Е. Ю. Терещенко, Е. Б. Яцишина Применение методов рентгеновской и нейтронной томографии для изучения керамических объектов культурного наследия	176
С 440 Д.А. Зверев, А.А. Баранников, А.А. Снигирев Рентгеновский аксикон для источников 4-го поколения	177
С 410 В.П. Калинушкин, О.В. Уваров, С.А. Миронов, В.А. Юрьев Возможности конфокальной микроскопии для исследования объемных характеристик полупроводниковых материалов	178
С 411 Н.С. Клочков, Н.В. Смоляков Компьютерная программа для расчета поля магнитного ондулятора	179
С 412 Е.С. Коваленко, К.М. Подурец, М.М. Мурашев, А.А. Пойда, Е.Б. Яцишина Совместный анализ трехмерных массивов данных нейтронной и синхротронной томографии	180
С 413 Н.А. Колышкин, Е.В. Храмов, А.А. Калоян, А.А. Гогин, И.А. Лихачёв Станция пробных экспериментов, студенческих и отладочных работ «ПРОСТОП» для источника синхротронного излучения четвертого поколения «СИЛА».....	181
С 414 В.А. Коржов, А.И. Проценко, Я.А. Элиович, А.В. Таргонский, А.Е. Благов	

Двухкристальный монохроматор на основе изгибных адаптивных элементов рентгеновской оптики для проведения синхротронных исследований с временным разрешением	183
С 415 А.С. Коротков, А.С. Нарикович, Д.А. Зверев, И.И. Лятун, А.А. Баранников, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев	
Применение компактного трансфокатора для рентгеновских источников нового поколения	184
С 416 Е.С. Куликова, Р.Д. Светогоров	
Высокоразрешающая порошковая дифракция на станции Белок/РСА синхротрона «КИСИ-Курчатов»	185
С 417 А.К. Курилкин, В.И. Боднарчук, М.Р. Гафуров, А.Г. Колесников, А.С. Оводов	
Создание структурированных катодов с покрытием W ₄ C для детекторов тепловых нейтронов	186
С 418 В.А. Лазаренко, П.В. Дороватовский, Р.Д. Светогоров	
Возможности дифракционной станции Белок/РСА на источнике синхротронного излучения КИСИ-КУРЧАТОВ. Яркие результаты 2023/2024 года	187
С 419 А.М. Лебедев, В.Г. Назин, Р.Г. Чумаков, В.И. Сергеенко	
Проект станции фотоэлектронной спектроскопии в жестком рентгеновском диапазоне для комплекса «СИЛА»	188
С 420 В.С. Литвин, Д.А. Бучный, Д.Н. Трунов, С. Н. Аксенов, В.Н. Марин, А.В.Чураков, В.И. Боднарчук, Р.А.Садыков, А.В. Белушкин	
Нейтронные малоугловые спектрометры на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН	189
С 427 В.С. Литвин, Д.Н. Трунов, Р.А. Садыков, Д.А. Бучный, В.Н. Марин, С.Н. Аксенов	
Аппаратура для внешнего воздействия на образец: камеры высокого давления, магниты и криостаты	190
С 421 И.И. Лятун, А.С. Коротков, С.А. Шевырталов, С.С. Лятун, А.А. Снигирев	
Двумерная высокоразрешающая рентгеновская микрооптика	191
С 422 И. И. Лятун, И.Б. Панормов, А.А. Баранников, А.С. Коротков, Д.А. Зверев, А. А. Снигирев	
Бериллиевая преломляющая оптика для новых источников синхротронного излучения	192
С 423 А.С. Нарикович, И.И. Лятун, Д.А. Зверев, А.С. Коротков, А.А. Баранников, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев	
Рентгеновские трансфокаторы - многоцелевые оптические устройства на основе составных преломляющих линз	193
С 424 Г.С. Петерс, П.В. Конарев, В.В. Волков, В.Р. Самыгина, М.О. Ершова, А.А. Велигжанин	
Станция «БиоМУР» для исследований структуры слабоупорядоченных систем методом малоуглового рентгеновского рассеяния	194
С 425 Б.О. Проценко, Ю. Какучи, С.А. Гуда, А.В. Солдатов, О.В. Сафонова, К.К. Коперет, А.А. Гуда	
Интерпретируемое машинное обучение и мультиэлементные библиотеки экспериментальных спектров для анализа XAS спектров одноцентровых катализаторов	196
С 426 С.С. Савин, А.Л. Тригуб	
Применение нейросетевой модели для оптимизации геометрии кристаллических структур	197
С 401 Б.С. Рошин, Т.С. Аргунова, В.Г. Кон, А.Д. Нуждин, С.П. Лебедев	
Исследование поверхности методами рентгеновской рефлектометрии и фазового контраста на примерах графена и сапфира	198

С 439 И.А. Рубцов, К.А. Тен, Я.В. Зубавичус, Э.Р. Прууэл, А.О. Кашкаров, Б.П. Толочко	
Применение методики малоуглового рентгеновского рассеяния в изучении быстропротекающих процессов.....	199
С 428 А. И. Сафонов, К. В. Николаев, С. Н. Якунин	
Алгоритм восстановления флуоресцентных спектров, полученных в условиях высокой загрузки детектора	200
С 429 А.А. Сенкевич, Р.Г. Чумаков	
Расчет параметров первого рентгеновского зеркала каналов вывода синхротронного излучения – геометрия, тепловые и вибрационные нагрузки.....	201
С 430 Е.О. Серов, П.С. Савченков, А.В. Рогачев, А.И. Калюканов, В.И. Боднарчук, А.В. Белушкин	
Экспериментальный стенд для методических работ с поляризованными нейтронами на реакторе ИР-8	202
С 432 Е.Е. Сурикова, Р.Г. Чумаков, И.А. Субботин	
Расчет спектральных характеристик монохроматора с плоскими дифракционными решетками на диапазон энергий от вакуумного ультрафиолета до мягкого рентгена	203
С 433 М.С. Сыртанов, Д.В. Сиделев, В.Н. Кудияров, Е.Б. Кашкаров	
Дифракционные исследования функциональных и конструкционных материалов на станции «Прецизионная дифрактометрия II» накопителя ВЭПП-3.....	205
С 434 А.Н. Трифонов, Э.С. Абдельшакур, А.Е. Бруква, М.И. Госткин, П.П. Журавлев, В.В. Кобец, В.Г. Кручонок, М.А. Ноздрин, О.Л. Сероштано, С.В. Слесарев, А.А. Уланкин	
Создание и развитие тестовой зоны для исследований с пучками электронов на базе линейного ускорителя ЛИНАК-200 в ЛЯП ОИЯИ.....	206
С 435 М.В. Фронтасьева	
Современное состояние и перспективы нейтронного активационного анализа на реакторе ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ	207
С 436 Р.Г. Чумаков	
Возможности спектроскопии в мягком рентгеновском диапазоне на строящейся установке «СИЛА» г. Протвино	209
С 437 Я.Л. Шабельникова, С.И. Зайцев, И.С. Зайцев	
Оценка <i>a priori</i> функционирования многоканальных коллиматоров, используемых в методах рентгеновской и гамма диагностики	210
С 438 А.В. Швецов, С.В. Горелов, А.И. Тито, А.Л. Коневега	
Развитие методов анализа траекторий молекулярной динамики в программном пакете GROMACS	211

Секция 1

Синхротронное излучение и нейтроны в материаловедении

Сверхбыстрая динамика электронных и структурных корреляций в высокотемпературных сверхпроводниках

А.П. Менушенков

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

В рамках уникального pump-probe эксперимента, проведенного на Европейском рентгеновском лазере на свободных электронах EuXFEL (Шенефельд, Германия), впервые исследована сверхбыстрая динамика электронных и структурных корреляций в высокотемпературных сверхпроводниках на основе BaBiO_3 [1].

Цель эксперимента – получение прямого доказательства спаривания носителей заряда в BaBiO_3 в реальном пространстве. В качестве основного экспериментального метода мы использовали рентгеновскую спектроскопию поглощения с временным разрешением tr-XAS в области мягкого рентгеновского излучения на K -крае поглощения кислорода. Разрушение локальных пар электронов и дырок обеспечивалось резонансным возбуждением через оптическую щель импульсами оптического лазера с длиной волны 633 нм. Импульсы рентгеновского лазера позволяли снимать спектры с различными временами задержки от -0.01 до 60 пс после возбуждения с фемтосекундным разрешением. Мы наблюдали сильные изменения XAS спектра, которые интерпретировали как быстрое ($< 0,3$ пс) разрушение пар носителей заряда и более медленную (0,3 – 0,8 пс) перестройку решетки из искаженной моноклинной структуры в новое метастабильное состояние с идеальной кубической решеткой, сохраняющееся, по крайней мере, до 60 пс. В результате впервые наблюдаена трансформация электронного спектра из двухчастичного в одночастичное состояние ансамбля свободных электронов. Установлено, что именно спаривание носителей определяет природу основных аномальных свойств системы. Получено прямое доказательство существования локальных пар электронов и дырок в основном состоянии BaBiO_3 , что позволяет сделать однозначные выводы о природе спаривания носителей заряда в висмутатах. Принимая во внимание большое количество похожих свойств между висмутатными и купратными высокотемпературными сверхпроводниками, включая одинаковую структуру перовскита, мы полагаем, что результаты эксперимента дают новый импульс к пониманию природы высокотемпературной сверхпроводимости и развитию теории ВТСП на основе локального спаривания носителей заряда в реальном пространстве.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (соглашение № 075-15- 2021-1352).

1. A. P. Menushenkov, A. Ivanov, V. Neverov, et al. Phys. Rev. Research 6, 023307 (2024).

Исследование двойного манганита $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ методами XANES и XMCD

*С.Г. Титова¹, Е.В. Стерхов¹, Т.В. Кузнецова², В.И. Гребенников²,
С.В. Пряничников¹, А.Л. Тригуб³*

¹ *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург*

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

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

Двойные манганиты РЗМ обладают более высокими, по сравнению с разупорядоченными манганитами, температурами магнитного упорядочения и перехода металл-изолятор. Для двойного манганита $\text{NdBaMn}_2\text{O}_6$ эти фазовые переходы происходят вблизи комнатной температуры [1], что вызывает особый интерес.

Исследованы магнитные и валентные состояния атомов Nd и Mn методами XMCD и XANES, соответственно. Данные XANES (Рис. 1) получены на станции «Структурное материаловедение», ККСНИ в режиме пропускания, Si (111) монохроматор. Данные XMCD и XANES получены на линии BL11A в центре NSRRC, Тайвань, методом полного выхода электронов, магнитное поле 0,5 Тл.

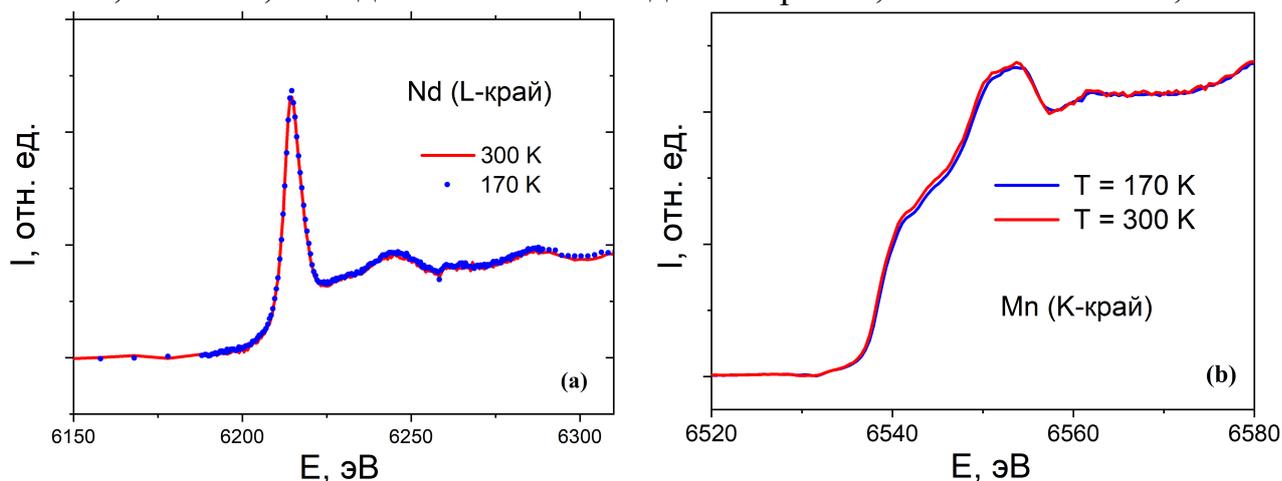


Рис. 1. XANES спектры Nd L-край (a) и Mn K-край (b) при различных температурах.

Показано, что при изменении температуры не происходит изменения валентного состояния Mn и Nd (Рис. 1). Изменение типа магнитного порядка в подсистеме Mn вблизи перехода металл-изолятор приводит к существенному росту магнитных моментов и особенно их флуктуаций для атомов Nd. Обнаруженный эффект может быть важен для практического применения.

1. S. G. Titova, E. V. Sterkhov, S. A. Uporov, J. Supercond. Novel Magn. 33, 1899 (2020).

Принудительная супрамолекулярная сборка тетрапиррольных комплексов d-металлов в монослоях ленгмюра

А.В. Аракчеев^{1,2}, М.Д. Мамонов^{1,2}, А.П. Кройтор², А.А. Дмитриенко²,
А.Г. Мартынов², С.Л. Селектор²

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва

²Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва

Изучение планарных супрамолекулярных переключаемых систем на межфазных границах и выявление механизмов переключений в таких системах требует использования прецизионных поверхностно-чувствительных методов анализа. В этой связи, методика одновременной регистрации рентгеновской флуоресценции поверхностного слоя и UV-Vis спектров поглощения монослоя, реализуемая на станции «Ленгмюр» «КИСИ-Кручатов», даёт уникальную возможность изучения механизмов превращений в планарных системах на границе раздела воздух/вода. В данной работе объектами исследования являются смешанные монослои Ленгмюра порфирина никеля и фталоцианината рутения с различными заместителями (**I** NiTPP – (15-C-5)₄PcRu(Pyz)₂, **II** NiTPP – (15-C-5)₄PcRu(DABCO)₂, **III** NiFTPP – (15-C-5)₄PcRu(DABCO)₂), в которых реализуются спектральные переключения, интерпретируемые как спин-кроссовер атома никеля [1]. В работе была поставлена задача по проверке правомерности такой интерпретации, а также по определению влияния донорно-акцепторных свойств аксиальных и периферийных заместителей на реализацию молекулярных переключений в монослоях исследуемых соединений на поверхности раздела воздух/вода. По UV-Vis спектрам поглощения и данным поверхностной дилатационной реологии установлено, что при переходе к более донорному сшивающему лиганду (от Pyz **I** к DABCO **II**) и при выборе более акцепторных периферийных заместителей в порфиринате никеля (от NiTPP в **II** к его перфторированному аналогу NiFTPP в **III**), повышается стабильность нового состояния - предположительно образующегося в результате принудительной супрамолекулярной сборки координационного полимера (КП). С помощью in situ одновременной регистрации XANES спектров и UV-Vis спектров монослоя на поверхности раздела воздух/вода для системы **III** впервые было получено прямое доказательство аксиальной координации атома Ni, что указывает на изменение структуры расщепления в октаэдрическом поле лигандов и спин-кроссовер атома Ni, и тем самым подтверждает гипотезу об образовании КП.

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

1. Shokurov A. V. et al. Spin Crossover in Nickel (II) Tetraphenylporphyrinate via Forced Axial Coordination at the Air/Water Interface //Molecules. – 2021. – Т. 26. – №. 14. – С. 4155.

In situ диагностика каталитических реакций при высоком давлении методом спектроскопии рентгеновского поглощения

*А.А. Гуда¹, Д.Н. Горбунов², М.В. Ненасьева², Б.О. Проценко¹, Е. Храмов³,
А.В. Солдатов¹*

¹ *Международный исследовательский институт Интеллектуальных материалов, ЮФУ,
Ростов-на-Дону*

² *МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва*

³ *НИЦ «Курчатовский Институт», Москва*

Гомогенное гидроформилирование является важной промышленной реакцией для производства альдегидов и спиртов. Комплексы металлов Rh, модифицированные лигандами третичных аминов, позволяют проводить тандемные реакции прямого превращения олефинов в спирты, и чаще всего такие реакции проводятся в режимах микрофлюидного потока, и являются важными как в академических исследованиях, так и в промышленной автоматизации. Выход реакции зависит от координации атомов Rh или образования кластеров Rh; поэтому важны знания о локальной атомной и электронной структуре активных центров в технологически релевантных условиях. Спектроскопия рентгеновского поглощения за K-краем Rh (XAS) является уникальным инструментом для исследования координации Rh; однако на сегодняшний день не было сообщений о применении этой методологии к гидроформилированию в микрофлюидном двухфазном потоке. Наша работа демонстрирует экспериментальную установку и микрофлюидную ячейку, разработанные для операндо измерений сегментированного потока. Количественный анализ данных XAS был выполнен с использованием библиотеки теоретических спектров, рассчитанных для соответствующих мономеров, димеров и малых кластеров. Как недавно было обнаружено с помощью анализа EXAFS для автоклава, мы демонстрируем, что в условиях сегментированного потока присутствие аминогрупп в реакции предотвращает образование кластеров Rh в пользу димеров.

1. M. E. A. Eid, D. N. Gorbunov, V. V. Shapovalov et al., In Situ XAS Diagnostics of Reductive Hydroformylation Reaction in Segmented Flow Under Elevated Pressure and Temperature, Ind. Eng. Chem. Res. 63, 35, 15397–15403 (2024)

2. D.N. Gorbunov, M.V. Nenasheva et al., Investigation of Rh/NR3 catalytic systems in sequential stages of reductive hydroformylation engaging in situ X-ray absorption spectroscopy, Journal of Catalysis, 428, 115194 (2023)

Исследование секторообразных производных бензолсульфоновой кислоты с двухвалентными катионами бария с использованием источника СИ

Н.В. Волков¹, А.В. Бакиров²

¹МГУ им. М.В. Ломоносова

² НИЦ «Курчатовский институт»

Изучение процессов самосборки и самоорганизации надмолекулярных наноструктур при создании так называемых умных материалов (smart materials), является одним из ключевых направлений современного материаловедения, важными задачами которого сегодня являются выявление общих закономерностей таких процессов и разработка методов дизайна самоорганизующихся систем. Для определения таких закономерностей необходимы систематические исследования структуры и свойств классов соединений, различающихся химическим строением мезогенных группировок. В настоящее время существует обширная библиотека данных для моновалентных секторообразных производных бензолсульфоновой кислоты: определены и изучены особенности процесса их самосборки при изменении формы дендрона, размера иона, длины алкильных заместителей, а также движущей силы самоорганизации [1,2]. Особый интерес и новизну представляет аналогичная систематизация данных для образцов с двухвалентными катионами.

В данной работе приведена характеристика структуры и температурного фазового поведения секторообразных производных 3,4,5-трис(додецилокси)бензолсульфоновой кислоты с двухвалентными катионами бария. Результаты исследований при помощи экспериментальных методов: поляризационной оптической микроскопии, дифференциальной сканирующей калориметрии и метода малоуглового рентгеновского рассеяния, указывают на систематическую трансформацию структуры и фазового поведения материалов благодаря изменению эффективной формы мезогена и отношения объемных долей ароматической и алифатической части за счет изменения длины алифатических хвостов. Наблюдается увеличение температурной стабильности обнаруженных колончатых упорядоченных и неупорядоченных мезофаз, при этом полученный диаметр колонны заметно меньше удвоенной длины молекул, что может быть связано с наклонным положением мезогенных групп по отношению к оси колонны либо с частичным взаимным проникновением алифатических окончаний соседних колонн. Дальнейшие исследования и анализ данных делают изученный материал перспективным для создания терморегулируемых ионоселективных мембран.

1. *Shcherbina M. A.* [et al.] Self-assembling of tapered benzenesulfonate-based dendrons with bulky aromatic focal groups //Mendeleev Communications 25.2 (2015): 142-144. DOI: 10.1016/j.mencom.2015.03.023.

2. *Stupnikov A. A.* [et al.] The effect of aliphatic chain length on the self-assembly of wedge-shaped cesium 3, 4, 5-tris (alkyloxy) benzenesulfonates //Molecular Systems Design & Engineering 8.2 (2023): 181-188. DOI: 10.1039/D2ME00218C.

Исследование сжатия конструкционных материалов под действием взрывчатых веществ с помощью синхротронного излучения

*А.М. Асылкаев^{1,2}, К.А. Тен¹, Э.Р. Прууэл¹, А.О. Кашкаров¹,
В.П. Халеменчук¹, А.А. Студенников¹*

¹ *Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН*

² *Новосибирский государственный университет*

Синхротронное излучение (СИ) позволяет получать вместо отдельных рентгеновских снимков динамическое кино с большой частотой. Это важно при исследовании ударно-волновых процессов. В описываемых экспериментах источником синхротронного излучения (СИ) является ускоритель на встречных электрон-позитронных пучках (ВЭПП-4), который расположен в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (энергия электронов составляет 4,5 ГэВ, индукция магнитного поля вигглера – 2 Тл). Ускоритель работал в специальном режиме с шестью банчами, период между которыми составлял 203 нс.

В данной работе ударная волна в образце создавалась взрывом взрывчатого вещества (ВВ) или ударником (из пушки). Регистрировалось изменение интенсивности вдоль оси конструкционных материалов. На основании экспериментальных данных получены скорости фронта ударной волны в пенопласте, фторопласте и 3D-структурном алюминии. В экспериментах с алюминием удалось получить значение массовой скорости в образце. Благодаря калибровке детектора DIMEX получены динамики распределения плотности пенопласта, фторопласта и 3D-структурного алюминия при нагружении их ударной волной методом радиографии СИ. На рис. 1 представлено распределение массы 3D-структурного алюминия вдоль луча СИ.

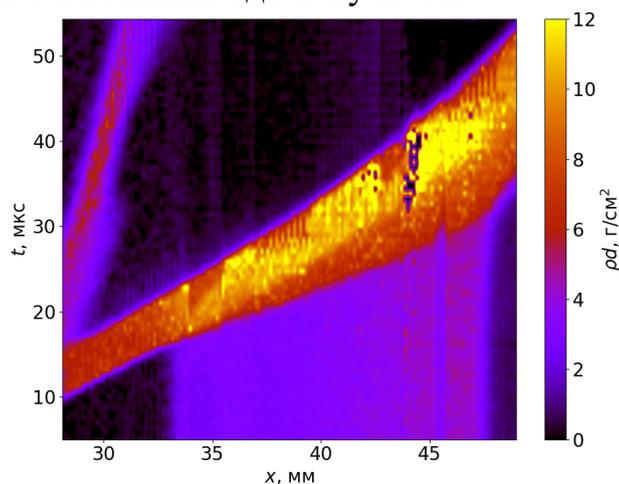


Рис. 1. Количество вещества на луче СИ (3D-структурный алюминий)

При проведении серии подобных экспериментов с 3D-структурным алюминием будет возможным построить ударную адиабату для данного вещества.

Механизмы адсорбции U(VI) слоистыми двойными гидроксидами Zn-Al-СДГ по данным exafs-спектроскопии

Н.П. Иванов¹, А.Л. Тригуб², Е.К. Папынов¹

¹ Дальневосточный федеральный университет

² НИЦ «Курчатовский институт»

Слоистые двойные гидроксиды (СДГ), в особенности Zn-Al-СДГ, являются высокоэффективными сорбентами для селективного извлечения радионуклидов урана, в том числе и из жидких сред с высоким содержанием мешающих ионов. Изучение механизмов адсорбции с помощью EXAFS-спектроскопии позволяет точно определять формы содержания U(VI), а значит и наиболее важные функциональные группы поверхности СДГ.

Данные рентгеновской дифракции показывают, что образцы Zn-Al-СДГ до и после сорбционного насыщения ураном обладают идентичным фазовым составом, так как все их рентгеновские максимумы соответствуют Zn-Al-СДГ в смешанной хлорид-карбонатной форме. Более, того параметры элементарной ячейки $a = 3,07-3,08 \text{ \AA}$, $c = 23,40-23,48 \text{ \AA}$, межслоевое расстояние $d_{003} = 7,80-7,82 \text{ \AA}$ и даже параметры микроструктуры $L_{XRD} = 8-9 \text{ нм}$ значительно не изменяются. ПЭМ и СЭМ снимки демонстрируют неизменность морфологии материала и размера кристаллитов до и после адсорбции урана. По совокупности этих данных можно сделать вывод, что механизм поверхностного осаждения не характерен в данном случае.

Для исходных и сорбционно-насыщенных образцов Zn-Al-СДГ на станции структурного материаловедения (СТМ) КИСИ Курчатов были получены спектры EXAFS вблизи L3 края поглощения атома урана. Моделирование EXAFS-спектров урана было выполнено с помощью программного пакета iFEFFfit ($dE = 6,09 \text{ эВ}$, $R^2 = 0,62 \%$). Первая координационная сфера атома урана соответствует аксиальным атомам кислорода иона уранила ($R = 1,83 \text{ \AA}$, К.Ч. = 2,0), а вторая координационная сфера – экваториальным атомам кислорода иона уранила ($R = 2,33 \text{ и } 2,51 \text{ \AA}$, К.Ч. = 2,71 и 3,13 соответственно). Интерпретация дальнейших координационных сфер нами была с использованием пути рассеяния U-C ($R = 2,92 \text{ \AA}$ и К.Ч. = 1,52), а также U-Al ($R = 3,33 \text{ \AA}$ и К.Ч. = 0,99). Таким образом, адсорбция урана в рассмотренных условиях осуществляться посредством образования отрицательно-заряженных внутрисферных комплексов уранила с поверхностью СДГ, главным образом бис-карбонатных $UO_2(CO_3)_2^{3-}$ и гидроксильных $UO_2(OH)_n^{(2-n)-}$.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № FZNS-2024-0013.

Ключевые результаты проекта «In situ методы синхротронных исследований многослойных функциональных структур с уникальными параметрами и свойствами, созданных пучково-плазменной инженерией поверхности»

*В.В. Денисов, А.Д. Тересов, Н.Н. Коваль, Н.А. Ратахин, А.Н. Шмаков,
А.А. Леонов, С.С. Ковальский, Ю.А. Денисова, Е.В. Островерхов, Д.Ю. Игнатов,
М.В. Савчук, М.С. Сыртанов*

Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Консорциум в составе девяти организаций завершил три этапа работ (2021-2023 гг.) по проекту «In situ методы синхротронных исследований многослойных функциональных структур с уникальными параметрами и свойствами, созданных пучково-плазменной инженерией поверхности» в рамках «Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы».

В ходе выполнения этапов проекта с использованием синхротронного излучения на каналах №2 и №6 источника СИ ВЭПП-3 (ИЯФ СО РАН), проведено 44 исследования закономерностей влияния условий формирования на фазовый состав и нано- и микроструктуру синтезируемых многослойных (многофазных) и многоэлементных структур.

Ключевые исследования, завершающие трехлетний цикл проекта, проводились с использованием созданного в рамках проекта вакуумного-электронно-ионно-плазменного стенда (ВЭИПС), установленного на канале №6 источника СИ ВЭПП-3. Впервые в России в рамках исследований реализованы новые методики in situ исследований, объединяющие возможности комплекса из четырех методов пучково-плазменной инженерии поверхности, реализуемых на стенде ВЭИПС и методов на основе синхротронного излучения.

Впервые для целого ряда структур, формируемых на поверхности материалов различными методами пучково-плазменной инженерии, непосредственно в процессе синтеза получены картины изменения структуры и фазового состава с течением времени, включая момент зарождения первых фаз, а также продемонстрирована in situ возможность мониторинга изменения фазового состава формируемых структур при изменении рабочих условий синтеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего образования (проект № 075-15-2021-1348) в рамках мероприятия № 4.2.1.

Исследование надмолекулярной организации ионогелей на основе ионной жидкости ОМІМ ВF₄ и Аэросила методом МУРР

*С.Ю. Котцов¹, Г.П. Копица², А.Е. Баранчиков¹, А.А. Павлова²,
А.О. Бадулина^{1,3}, Ю.Е. Горшкова⁴, Н.А. Селиванов¹, Н.П. Симоненко¹,
М.Е. Никифорова¹, В.К. Иванов¹*

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

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина*

³ *МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва*

⁴ *Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М. Франка, Объединенный Институт
Ядерных Исследований, Дубна*

Ионогели – новый класс гибридных материалов, содержащих в себе ионную жидкость (ИЖ), иммобилизованную в твердой матрице. ИЖ – расплавы органических солей, состоящие из пространственно-изолированных органических катионов и неорганических или органических анионов. ИЖ обладают уникальными свойствами: низкая температура плавления, отсутствие давления насыщенных паров, высокая полярность и электропроводность, химическая и термическая устойчивость, широкое окно электрохимической стабильности, негорючесть. Большое внимание привлекают ионогели с использованием матриц на основе SiO₂, из-за простоты их производства и широкого спектра применения: от создания суперконденсаторов и биосенсоров до доставки лекарств. Влияние самоорганизации ИЖ в ограниченном пространстве матрицы на морфологию и структуру получаемых ионогелей вызывает наибольший интерес.

В настоящей работе ионогели были получены путем пропитки SiO₂ (Aerosil® A380) ионной жидкостью 1-метил-3-октил-имидазолий тетрафторборатом (ОМІМ ВF₄). Содержание ИЖ в ионогелях варьировалось от 16,3 до 79,9 мол.%. Об удержании ИЖ в кремнеземе свидетельствовало смещение и уширение сигнала ЯМР ВF₄⁻ ¹⁹F, а также заметное (~50°C) снижение температуры разложения ИЖ. Для ионогелей и чистой ИЖ частоты ИК-колебаний различались, что подтверждает эффект удержания ИЖ в матрице SiO₂.

В ходе исследований были обнаружены резкие изменения в структуре ОМІМ ВF₄ при ее смешивании с порошком SiO₂. Анализ текстурных характеристик показал, что при добавлении ИЖ к SiO₂ она последовательно адсорбируется в микропорах, мезопорах и в межчастичном пространстве. Взаимодействие ИЖ с поверхностью кремнезема, скорее всего, обусловлено адсорбцией аниона ВF₄⁻. Данные МУРР позволили проследить структурные различия в ионогелях с различным содержанием ИЖ. Важно отметить, что полученные данные показали, что структура твердой фазы практически не меняется при заполнении ИЖ, а структура ИЖ наоборот, что проявилось в ≈ 20% изменении длины корреляций анион–алкил–анион. Для ИЖ, заключенной только

в микропорах, такие корреляции не могли быть надежно установлены, что указывает на очень сильные изменения в структуре ИЖ.

Влияние высокого давления на кристаллическую, магнитную структуру и колебательные спектры ван-дер-ваальсовых магнетиков

О.Н. Лис¹, Д.П. Козленко¹, С.Е. Кичанов¹, Е.В. Лукин¹, И.Ю. Зель¹

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

Ван-дер-ваальсовые соединения с сохраняющимся дальним магнитным упорядочением в их двумерных формах в настоящее время являются одними из наиболее интересных объектов исследования в области физики конденсированного состояния. Структурные особенности приводят к значительной чувствительности физических свойств этих соединений к внешним воздействиям, которые могут вызывать множество необычных явлений.

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

Исследования с помощью нейтронной дифракции CrBr_3 позволили обнаружить в области ниже $T_C = 37$ К отрицательное тепловое объемное расширение [1], а также аномальное поведение межатомных расстояний, углов и частот колебательных мод, что указывает на проявляющуюся сильную спин-решеточную связь. Воздействие высокого давления приводит к подавлению магнитного упорядочения, а полное подавление ФМ-состояния и магнитный переход либо в АФМ-состояние, либо в магнитно-неупорядоченное состояние ожидается при $P \sim 8,4$ ГПа [2]. Наши результаты также выявили значительные аномалии в поведении межатомных расстояний и углов с увеличением давления, что связано с переходом от исходной квазидвумерной структуры в трехмерную.

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

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

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 МГУ им. 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 $Al_2O_3//Nb(40 \text{ нм})/[Dy(6 \text{ нм})/Ho(6 \text{ нм})]_{34}/Nb(10 \text{ нм})$ 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).

Применение нейтронного излучения для исследования литий-ионных материалов

П.Е. Ромашко¹, Н.В. Проскурнина¹, М.А. Сёмкин^{1, 2, 3}

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

² НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

³ Уральский федеральный университет, Екатеринбург

Эксперименты по рассеянию нейтронов в сочетании с дифракцией рентгеновских лучей, методиками спектроскопии, комбинационным рассеянием света, электронной микроскопией и т. д. позволяют детально изучать структуру, фазовые переходы материалов, содержащих как легкие, так и различать близкие входящие в состав элементы [1, 2]. Чувствительность нейтронного рассеяния к магнитному состоянию системы расширяет спектр применения методики, например, для одновременной аттестации структурного и магнитного упорядочений мультифункциональных материалов [3].

Использование методики дифракции с постоянной длиной волны нейтронов, как правило, применяется в прецизионных экспериментах по уточнению параметров структуры, формированию на их основе топологических карт систем каналов проводимости или пустот литий-ионных материалов [4]. Времени-пролетная техника позволяет проводить эксперименты *In-Suite*, в том числе на готовых прототипах устройств, например, в процессе наработки циклов заряда-разряда или деградации катодных и анодных материалов аккумуляторных батарей [5].

Результаты кристаллохимической аттестации материалов, полученные на основе данных нейтрон-дифракционных экспериментов являются критически значимыми при выборе стартовых параметров для теоретических расчетов из первых принципов, моделировании эволюции структуры материалов при внешних воздействиях (давление, температура и др.) [6].

В работе будут представлены результаты нейтронного рассеяния для исследования структурных особенностей перспективных литий-ионных материалов на базе сложных оксидных систем и упорядочения их магнитных подсистем.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Поток», № 122021000031-8).

1. D. Akulov, M. Kalinkin, et al., Cryst. Eng. Comm. In Press (2024).
2. N. V. Proskurnina, V. I. Voronin, et al., Ionic 29, 639 (2023).
3. M. A. Semkin, N. V. Urusova, et al., Phys.: Cond. Mat. 34, 165801 (2022).
4. N. V. Urusova, M. A. Semkin, et al., J. All. Comp. 781, 571 (2019).
5. C. Didier, Z. Guo, et al., Trans. Met. Oxid. Electr. Ener. Stor. 13, 319 (2022).
6. E. Filonova, A. Suntsov, et al., Ceram. Inter. 50(20), 40363 (2024).

Исследование наноструктуры дисперсно-упрочненных оксидами сталей методами малоуглового рассеяния нейтронов

С.В. Рогожкин^{1,2}

¹НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Дисперсно-упрочненные оксидами (ДУО) стали (ODS steels - oxide dispersion strengthened steels) обладают заметно более высокой жаропрочностью чем традиционные стали за счет значительного числа равномерно распределенных оксидов. Такие материалы разрабатываются также и для ядерных приложений конструкционных материалов первой стенки будущих термоядерных реакторов, материалов оболочек топливных элементов в реакторах на быстрых нейтронах и для ряда конструкций в различных реакторных установках IV поколения. Наноструктурные особенности ДУО сталей обеспечивают значительное повышение предела ползучести по сравнению с неупрочненными сталями. Наноразмерные оксидные включения являются точками закрепления дислокаций и обеспечивают захват гелия, образующегося в трансмутациях при воздействии реакторных нейтронов, и радиационных дефектов.

В настоящей работе наноструктура ряда ДУО сталей изучалась методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), малоуглового рентгеновского рассеяния, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и атомно-зондовой томографии (АЗТ). Исследуемые стали отличаются содержанием Cr, V, Ti, Al и Zr. Методы локального анализа ПЭМ и АЗТ выявили значительное количество наноразмерных оксидных частиц и кластеров. Определены их размеры, объемные плотности и составы.

Использование МУРН позволило учесть, как ядерный, так и магнитный контраст различных включений (оксидов и кластеров) различных размеров в исследуемых материалах. Показано, что учет магнитного рассеяния позволяет лучше идентифицировать диффузные наноразмерные включения, обнаруживаемые методом просвечивающей электронной микроскопии и атомно-зондовой томографии.

Исследование остаточных напряжений методом дифракции нейтронов высокого пространственного разрешения

И.Д. Карпов, В.Т. Эм

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. Интенсивность дробеструйной обработки влияет на ширину зон и величину максимальных напряжений. Проведены нейтронные эксперименты по измерению напряжений вблизи обработанной поверхности пластин с использованием метода $\sin^2\psi$. Результаты согласуются с результатами, полученными традиционным методом измерения трёх компонент деформации. Нейтронный метод $\sin^2\psi$ может быть использован для измерения напряжений вблизи поверхности образцов большой толщины, поскольку в отличие от традиционного метода не имеет принципиальных ограничений по толщине образца.

Магнитные свойства шпинелей $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($x = 0,5; 1$), полученных механохимическим синтезом

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

¹ Университет науки и технологии МИСИС, Москва

² НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

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

Широкое применение материалов на основе ферритов со структурой шпинели объясняется их уникальными свойствами. Известно, что при температуре ниже 120 К в магнетите наблюдается фазовый переход Вервея, при котором структура кристаллической решетки переходит от кубической к моноклинной, при этом уменьшается электрическая проводимость и намагниченность [1]. Выбор легирующих элементов и метода синтеза оказывает влияние на структуру и свойства шпинелей и, в частности, магнетита. В данной работе была поставлена задача охарактеризовать при низкой температуре магнитные свойства феррита кобальта $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($x = 0,5; 1$), полученного методом механической активации в шаровой мельнице.

Порошковые образцы $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ ($x = 0,5; 1$) были получены в ходе трехчасового высокоэнергетического помола в шаровой мельнице с последующим отжигом в течение 3 часов при температурах 1400 °С и 950 °С соответственно. По результатам СЭМ размеры частиц находятся в диапазоне 5–20 мкм, морфология близка к равноосной.

На установке PPMS DynaCool исследованы макроскопические магнитные свойства образцов, были получены ZFC-FC кривые намагниченности и петли гистерезиса во внешнем магнитном поле ± 90 кЭ в диапазоне температур 3–300 К и шагом 50 К. Нейтронографические измерения выполнены при температурах 100, 150, 200 и 300 К на дифрактометре «ДИСК» (реактор ИР-8), обработка данных выполнена полнопрофильным методом Ритвельда с применением пакета программ *Fullprof Suite*.

На ZFC кривых намагниченности и их производных для образцов $x = 0,5$ и 1 наблюдаются аномалии при температурах 20 К и 138 К соответственно, связанные с ускоренным ростом зависимостей. По результатам магнитной нейтронографии характерных изменений в структурах ферритов при низкой температуре не наблюдалось. Ферриты кобальта $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ имеют ферримагнитную структуру, суммарный магнитный момент $x = 0,5$ меньше, чем у $x = 1$ за счет большей величины магнитного момента тетра- подрешетки.

1. Sorescu M. et al. A Mössbauer study of the Verwey transition in cobalt-doped magnetite //Journal of magnetism and magnetic materials. – 2002. – Т. 246. – №. 3. – С. 399-403.

2. Walz F. The Verwey transition-a topical review //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Т. 14. – №. 12. – С. R285.

Закономерные связи состава, атомной, реальной структуры и свойств кристаллов-суперпротоников

*Н.Н. Исакова, А.И. Калюканов, И.П. Макарова, А.Л. Толстикова,
Р.В. Гайнутдинов, В.А. Коморников, А.Л. Васильев*

НИИ «Курчатовский институт», Москва

Знания о закономерных связях между составом, атомным строением, реальной структурой и физическими свойствами кристаллических материалов являются основой для решения фундаментальных проблем материаловедения.

Кристаллы-суперпротоники являются перспективными материалами для разработки технологий водородной энергетики, создания различных электрохимических устройств. Проводимость суперпротоников $\approx 10^{-1} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$, регистрируемая при температурах до 500 К, обусловлена их атомной структурой - динамически разупорядоченными водородными связями, обеспечивающими дополнительные позиции и перемещение протонов. Исследования структуры этих соединений позволяют расширить представления о природе водородных связей и их влиянии на свойства кристаллов. Существенное влияние на измеряемые параметры кристаллов оказывает реальная структура материалов, которая может значительно отличаться от «идеального» строения.

Применение методов нейтронографии позволяет детально исследовать изменение систем водородных связей. Исследования, выполненные на станции МОНД реактора ИР-8, позволили с высокой точностью локализовать атомы водорода в монокристаллах гидросульфатфосфатов цезия, а также показать наличие трех типов водородных связей в их структуре.

Применение комплекса методов, включающего структурный анализ с использованием рентгеновского излучения и нейтронов, микроскопию, способствует получению надежных данных и решению задач по установлению закономерных связей между составом, строением и свойствами кристаллов [1].

1. Makarova I., Isakova N., Kalyukanov A., Gainutdinov R., Tolstikhina A., Komornikov V. *Acta Cryst. B*, 2024, **80**, 201-207.

Секция 2

Синхротронное излучение и нейтроны для
биологии и наук о жизни

Исследование следов натрия в тканях сердца методом флуоресцентной рентгеновской микроскопии с использованием синхротронного излучения

*И.А. Артюков¹, Г.П. Арутюнов², Д.О. Драгунов², В.М. Митрохин²,
А.В. Соколова², В.В. Соколова¹, Р.М. Фещенко¹, A. Gianoncelli³, S. Pollastri³*

¹ *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН*

² *Российский национальный исследовательский медицинский университет им. Н.И.Пирогова*

³ *Elettra – Sincrotrone Trieste*

Рентгеновский флуоресцентный анализ с использованием синхротронного излучения (РФА-СИ) является чувствительным неразрушающим методом определения элементного химического состава. Использование современной рентгеновской оптики и синхротронного излучения позволяет существенно улучшить пространственное разрешение РФА-СИ до нанометровых величин и говорить о флуоресцентной рентгеновской микроскопии.

В докладе представлены результаты экспериментов с применением методов РФА-СИ для решения задач биологии и медицины на примере количественного исследования химического состава мышечных тканей сердца и бедра на клеточном уровне. Соответствующие эксперименты проводились с использованием сканирующего рентгеновского флуоресцентного микроскопа TwinMic [1] и станции флуоресцентного микроанализа XRF [2] на синхротроне ELETTRA (Италия). Сопоставление полученных карт распределения внутри- и внеклеточного натрия в миокарде разных групп лабораторных животных, разделенных по количеству суточного потребления соли, позволило впервые экспериментально подтвердить гипотезу о существовании отложений неосмотического натрия [3, 4].

1. A. Gianoncelli, G. Kourousias, et al., J. Phys.: Conf. Ser. 425, 182001 (2013).
2. A.G. Karydas, M. Czyzyckiet, et al., J. Synchrotron Rad. 25, 189 (2018).
3. I. Artyukov, G. Arutyunov, et al., Sci. Rep. 11, 22025 (2021).
4. И.А. Артюков, Г.П. Арутюнов и др., ЖТФ 93, 953 (2023).

Возрастные изменения атомно-молекулярной архитектуры костной ткани: стратегия их замедления

А.А. Павлычев, К.О. Брыкалова, А.В. Корнеев, Н.Н. Корнилов, А.А. Черный

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Национальный медицинский исследовательский центр «Травматологии и Ортопедии»

Проведены исследования закономерностей и механизмов, отвечающих за возрастные изменения атомно-молекулярной архитектуры костной ткани в физиологических условиях. Использованы образцы кортикальной кости здоровых новорожденных, взрослых и зрелых крыс, 6 – 8 для каждой возрастной категории. Применены дифракционные и спектроскопические методы анализа структуры и атомной динамики материалов. Выявлены системные изменения степени кристалличности, размеров и формы кристаллитов гексагонального гидроксилapatита кальция $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{OH}_2$ (ГАП), постоянных кристаллической решетки ГАП, отношений $\frac{\text{Ca}}{\text{P}}$ и $\frac{\text{минерал}}{\text{вода}}$, энергий связи внутренних электронных уровней ионов Са, Р, О/Ф/, N и С [2] и других параметров наноструктуры кости.

На основе анализа результатов предложена концепция «кость-как-электрическая-батарея», которая составлена из множества наноячеек, образованных отрицательно заряженным кристаллитом ГАП, погруженным в положительно заряженную межкристаллитную среду. Дана оценка плотности электростатической энергии P_E и показано, что величина P_E падает более чем на порядок в зрелой кости по сравнению с молодой. Заряд кристаллитов обусловлен нарушениями его стехиометрии на начальном этапе минерализации, а именно, дефицитом Ca^{2+} по сравнению с PO_4^{3-} . Исследования органического компонента показали последовательное окисление всех атомов, при неизменном химическом состоянии атомов кислорода остается. Эта специфика кинетики окислительно-восстановительных реакций зависимость от возраста организма соотнесена с нарушением замкнутости кости как физической системы.

Как итог, предложена новая стратегия противодействия возрастным изменениям на наноуровне, ключевым моментом которой является облучение кости потоком отрицательных частиц (электронов и антипротонов) с целью их адресного накопления в минеральном и органическом компоненте.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-29-00172.

Эффективные вычислительные подходы к биологическому планированию нейтронозахватной терапии

А.Н. Соловьев^{1,2}, Я.В. Кизилова¹, В.И. Потетня¹, С.Н. Корякин^{1,2}

¹ МРНЦ им. А.Ф. Цыба – филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России

² ИАТЭ НИЯУ МИФИ

Нейтронозахватная терапия является одним из видов бинарного терапевтического воздействия, проводимым с использованием специального агента для целевой доставки препарата, который подвергается лучевому воздействию тепловыми и эпитепловыми нейтронами непосредственно в теле пациента. Поглощённая доза, таким образом, определяется как многокомпонентный [1] состав вторичного излучения, каждый элемент которого обладает собственной биологической эффективностью.

В рамках инициативных работ МРНЦ им. А.Ф. Цыба проводится математическое моделирование повреждающего действия излучений разного качества, включая индивидуальное моделирование действующих компонент при нейтронозахватной терапии. В ходе выполнения изысканий были созданы специализированные программные средства, реализуемые на платформах высокопроизводительных вычислений, позволяющие оперативно и эффективно оценивать, и предсказывать [2] количественные показатели, в том числе, ожидаемые уровни гибели клеток и тканей организма в результате выполнения сеансов лучевой терапии.

Для проведения апробации использованных подходов был отобран ряд томографических и топометрических данных пациентов, ранее прошедших курс лечения на протонном комплексе «Прометеус». На базе преобразованного представления пациента в модернизированной системе моделирования комплекса быстрой нейтронной терапии КНТ (ВНИИА им. Н.Л. Духова) были заданы отдельные концентрации нейтронозахватного агента в виде препарата ^{10}B , предписанные опухолевым и целевым объёмам облучения, а также здоровым тканям. В качестве действующего спектра излучения использовались фазовые пространства, полученные на срезе модели реактора, выполненные на базе средств моделирования общего назначения. Для анализа целевых показателей использовались представления околominiмальной, медианной и околмаксимальной дозы согласно формализму МАГАТЭ в каждом из исследуемых объёмов, в здоровом мозге, а также ряде критических структур.

Показана хорошая производительность выполняемых вычислений.

1. А.Е. Чернуха, А.Н. Соловьев, Н.В. Кузнецов и др. Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. №1 (2024)

2. K.V. Gordon, T.Kh. Fathkudinov, A.D. Kaprin et al. Bulletin of Experimental Biology and Medicine. 173. 2 (2022)

Исследование фрактальной структуры лиственных и хвойных деревьев с помощью моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов

О.Д. Шнырков^{1, 2}, Е.Г. Яшина^{1, 2}, К.А. Пшеничный¹, С.В. Григорьев^{1, 2}

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

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Фракталы – объекты, фрагментированные настолько, что измерение их привычными нам мерами (длина, площадь, объём) дает разные результаты в зависимости от выбора мерного отрезка (масштаба). Понятие «фрактал» ввёл Бенуа Мандельброт [1], он же положил начало новой «фрактальной» геометрии. При помощи моделирования экспериментов по малоугловому рассеянию была разработана классификация фрактальных и нефрактальных объектов в двумерном пространстве [2].

В нашей работе [3] было показано, что боковая проекция взрослого лиственного дерева является логарифмическим фракталом. При росте и ветвлении дерево подчиняется закону сохранения площади при масштабировании от нескольких метров до нескольких дециметров: суммарная площадь боковой поверхности "дочерних" ветвей равна площади поверхности ветви, из которой они растут.

Мы использовали метод численного Фурье-анализа для изучения фрактальной структуры ветвей взрослой ели размером более 10 метров на различной высоте дерева. Фурье образы фотографий еловых лап, демонстрируют одинаковую структуру кривой малоуглового рассеяния: область Гинье, два участка с прямолинейным характером спада интенсивность, область Гаусса. Мы предложили математическую модель, описывающую полученные кривые: $I(q) = A \cdot \exp((qb)^2/3) + P \cdot q^{(-N)}$ в области малых переданных импульсов (больших масштабов) и $I(q) = R \cdot q^M + S \cdot \exp(-2 \cdot (q - L)^2/F^2)$ в области больших переданных импульсов (малых масштабов). Показано, что показатель степени N близок к 2, что соответствует логарифмическому фракталу, функция Гаусса, описывающая поведение кривой в области больших переданных импульсов, соответствует хвое. Поскольку на крупных масштабах лапы ели формируются с учётом покрывающей их хвои, подчиняясь закону логарифмического фрактала в двумерном пространстве, для них выполняется правило, сохранения площади ветвей с иголками до и после ветвления.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-12-00188.

1. Mandelbrot B. The Fractal Geometry of Nature. New York: Freeman, 1983.
2. Pustovoit P.M., Yashina E.G., Pshenichnyi K.A., and Grigoriev S.V.// Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020, Vol. 14, No. 6, pp. 1231–1238.
3. Grigoriev S.V., Shnyrkov O.D., Pustovoit P.M., Iashina E.G., and Pshenichnyi K.A. Experimental evidence for logarithmic fractal structure of botanical trees// Phys. Rev. E 105, 044412.

Кристаллическая упаковка как инструмент исследования функциональных особенностей белков

В.Р. Самыгина¹, К.М. Дубова¹, А.В. Соколов², Ю.Н. Уткин³, П.В. Дубовский³

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

²Институт экспериментальной медицины, Санкт-Петербург

³Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова, Москва

Одним из актуальных биомедицинских направлений является использование белков в качестве лекарственных средств. Знание пространственной структуры белка может быть основой для разработки рекомбинантных вариантов с улучшенными свойствами. Основным методом определения структур белков является рентгеноструктурный анализ (РСА). Разные кристаллические модификации, используемые в РСА, могут позволить получить более высокое пространственное разрешение (которое определяет детальность и достоверность структуры), а анализ межмолекулярных контактов в кристалле нести важную дополнительную информацию.

Исследованы различные кристаллические модификации двух белков. Церулоплазмин (ЦП) человека является зарегистрированным медицинским препаратом-антиоксидантом. Получение различных кристаллических модификаций ЦП, позволило объяснить разницу антиоксидантной активности ЦП человека и крысы и установить конформацию функционально-важной междоменной петли ЦП человека, которая не была определена ранее. Полученные данные могут быть использованы для разработки улучшенной версии рекомбинантного ЦП.

СТХ13Np – кардиотоксин, относящийся к семейству трехпетельных токсинов, проявляющих различные виды биологической активности, включая антимикробную и цитотоксическую в отношении раковых клеток. Была установлена структура СТХ13Np в двух кристаллических упаковках. Сравнение структур позволило установить, что впервые в истории исследования трехпетельных токсинов в кристалле была получена форма петли 2 соответствующая мембранносвязанной конформации. Данные могут быть использованы для разработки прототипов противоопухолевых пептидов.

Работа выполнена в рамках Федеральной космической программы 2016-2025 (ОКР «МКС (Наука)») и Госзадания НИЦ «Курчатовский Институт».

Конъюгаты биметаллических наночастиц AuFe с метотрексатом: синтез, структура и биологическая активность

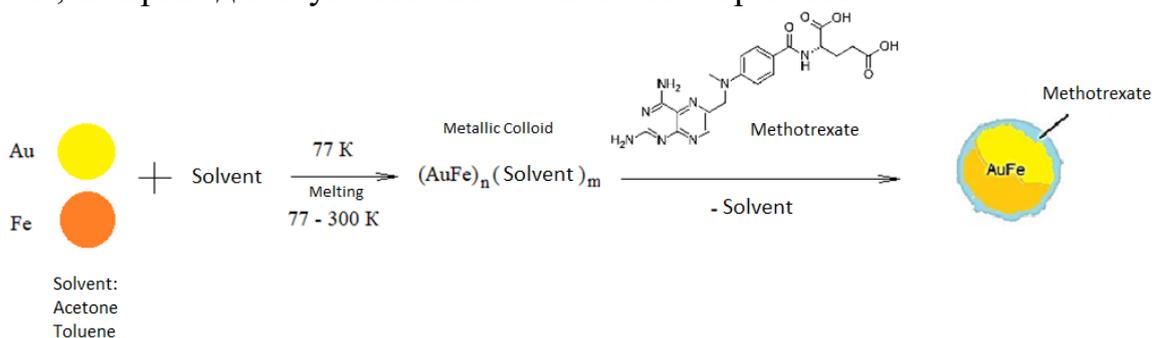
А.А. Воронова¹, А.Ю. Васильков¹, А.В. Наумкин¹, Э.В. Штыкова²

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

² *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

Образование биметаллических наночастиц AuFe приводит к существенному изменению физико-химических свойств системы, что создаёт потенциал для их применения в медицине. Конъюгация наночастиц Fe и Au с метотрексатом позволяет улучшить биологическую активность препаратов по сравнению с отдельными компонентами [1].

Биметаллические наночастицы AuFe и конъюгаты на их основе получены экологически безопасным методом металло-парового синтеза с использованием ацетона или толуола в качестве дисперсионной среды. Образцы были исследованы комплексом физических методов: МУРР, РФЭС, СЭМ, XANES и EXAFS. Биметаллические наночастицы имеют неупорядоченную структуру со связями Au-Fe-O и Au-O-Fe. Взаимодействие с метотрексатом наночастиц AuFe, полученных в толуоле, приводит к восстановлению золота до состояния Au⁰, а синтезированных в ацетоне - к значительному увеличению доли состояний Au⁺ и Au³⁺. Профили экспериментальных кривых МУРР для наночастиц и их конъюгатов характерны для полидисперсных соединений. Все образцы характеризуются наличием высокоомогенных наночастиц с широкой долей крупных агрегатов. В присутствии метотрексата количество агрегатов наночастиц AuFe, полученных в ацетоне, увеличивается, но размеры фракций остаются прежними. Модифицирование метотрексатом наночастиц AuFe, полученных в толуоле, не приводит к увеличению количества агрегатов.



Полученные биметаллические конъюгаты оказывают значительное ингибирующее действие на раковые клетки, при этом их влияние на нормальные фибробласты минимально.

1. A.Y. Vasilkov, A.A. Voronova, T. Batsalova, et al. *Materials*. 16, 3238 (2023).

Композиты на основе полимеров (коллаген, хитозан), модифицированных наночастицами серебра и меди: синтез, исследование методами рентгеновской спектроскопии и биологическая активность

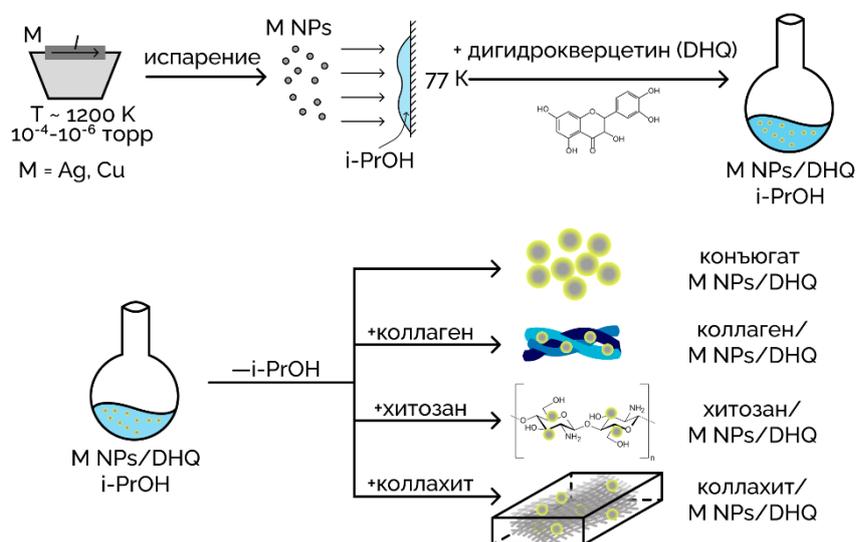
А.Н. Третьякова^{1,2}, П.Р. Волошина^{1,3}, А.В. Наумкин¹, А.Ю. Васильков¹

¹ Институт элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский институт)

³ Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева

Впервые получены композиты на основе коллагена (Coll), хитозана (Chit) и коллаген-хитозановой губки, содержащие конъюгаты наночастиц серебра или меди с дигидрокверцетином (DHQ). Наночастицы металлов в виде органозолей были получены методом металло-парового синтеза (МПС) [1], с использованием в качестве дисперсионной среды изопропанола и толуола.



Гибридные наноконпозиты были исследованы методами РФА, РФЭС и СЭМ. Оценка размеров кристаллитов серебра методом Шеррера с использованием данных РФА дает 12 нм для Coll-AgNPs@DHQ. В отличие от черни наночастиц серебра с состоянием Ag^0 , методом РФЭС обнаружено присутствие трех состояний Ag в конъюгатах AgNPs@DHQ и Coll-AgNPs@DHQ. Образец AgNPs@DHQ показал общую цитотоксичность, ингибирующую метаболическую активность и жизнеспособность как нормальных, так и опухолевых клеток человека. Исследование показало хорошие перспективы для биомедицинского применения системы Coll-AgNPs@DHQ, обладающей хорошей биосовместимостью, избирательными противоопухолевыми свойствами и антиоксидантной активностью.

Работа была выполнена при поддержке РФФ, грант №24-23-00220.

1. A. Yu. Vasil'kov, N. E. Tseomashko, et al., Coatings. 13(8), 1315 (2023).

Исследование полимерных матриц на основе гиалуроновой кислоты методом малоуглового рентгеновского рассеяния

П.П. Снетков¹, С.Н. Морозкина¹, А.Е. Романов¹

¹ Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»

Современные системы доставки лекарств необходимы для высокоэффективной терапии различных заболеваний. Несмотря на то, что до настоящего времени было разработано множество систем на основе биополимеров и биологически активных веществ (БАВ), информация о структуре таких систем практически полностью отсутствует, что затрудняет дальнейшие исследования в этой области. Среди биополимеров особое внимание заслуживает гиалуроновая кислота (ГК), обладающая уникальным комплексом свойств и имеющая собственные специфические клеточные рецепторы (CD-44, CD-168, и др.).

Ранее были разработаны нановолокна на основе ГК и куркумина без использования токсичных химических агентов [1], но структура такого комплекса и конформация гиалуроновой кислоты в формирующем растворе и нановолокнах/пленках до сих пор не были изучены.

В настоящей работе для анализа свойств плёнок на основе гиалуроновой кислоты с куркумином и без него был использован метод малоуглового рентгеновского рассеяния. Было обнаружено изменение конформации биополимера при изменении состава растворителя. В случае водного раствора гиалуроновая кислота имеет гибкую спиральную конформацию, но в водно-органическом растворе формируется более жесткая глобулярная структура. Этот эффект можно объяснить образованием дополнительных водородных связей между отрицательно заряженным кислородом полярной сульфоксидной группы в молекулах ДМСО и молекулами воды.

Добавление куркумина не оказывает заметного влияния на конформацию гиалуроновой кислоты, за исключением максимальной концентрации куркумина (соотношение масс гиалуроновой кислоты и куркумина равно 5:1): в этом случае было обнаружено образование доменных структур [2].

Полученные результаты важны для понимания структуры комплексов ГК с БАВ. Исследования в этом направлении следует продолжить, используя, в частности, динамическое рассеяние света (DLS), малоугловое нейтронное рассеяние, малоугловое рентгеновское рассеяние на станции «БИОМУР» КИСИ-Курчатов, и т.п.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).

1. P. Snetkov, et al., *Pharmaceutics*, 14(6), 1186 (2022).
2. P. Bernado, *Mol. BioSyst*, 8, 151 (2011).

Секция 3

Электронная микроскопия

Исследование аморфизации кремния ионами ксенона методами электронной микроскопии и молекулярно-динамического моделирования

Н.И. Боргардт¹, О.В. Подорожний¹, А.В. Румянцев¹, Г.С. Киреев¹, А.Е. Иешкин²

¹ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

² *МГУ им. М. В. Ломоносова*

Исследование аморфизации кремния ионами Xe^+ обусловлено широким применением таких ионов в системах с фокусированным ионным пучком, которые используются для локального травления и модификации поверхности, приготовления образцов для просвечивающей электронной микроскопии.

Имплантация ионов ксенона с энергией 5 кэВ и дозой 10^{16} см^{-2} проводилась в условиях сверхвысокого вакуума в подложку Si(001). Тонкие фольги для исследований в просвечивающем электронном микроскопе Titan Themis 200 при ускоряющем напряжении 200 кВ приготавливались параллельно Si(110) методом *in situ* lift-out в приборе Helios NanoLab 650. Молекулярно-динамическое моделирование (МД) выполнялось аналогично [1].

На Рис. 1а приведено электронно-микроскопическое изображение с вычисленной в соответствии с [1] корреляционной функцией $r(x)$, сравнивающей распределения интенсивностей в выделенной эталонной кристаллической области и в других областях, две из которых отмечены пунктирными линиями. На Рис. 1б она сопоставляется с зависимостью $s_{ws}(x)$, характеризующей возникающее при ионном облучении разупорядочение в расположении атомов кремния, координаты которых вычислялись методом МД. Как видно из Рис. 1б, профили $r(x)$ близки к графикам $s_{ws}(x)$, что свидетельствует об адекватности выполненного моделирования. Ширина переходной области между кристаллом и аморфным слоем w , оцененная с использованием профиля $r(x)$, составляет около 2 нм.

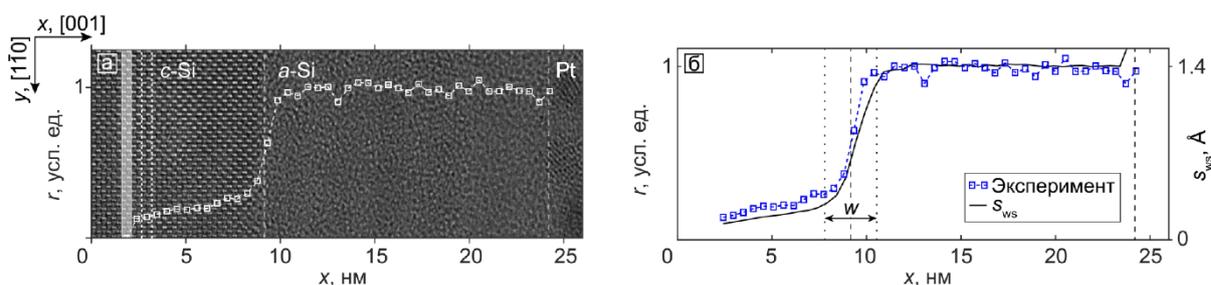


Рис. 1. Экспериментальное изображение (а) образца кремния после ионной бомбардировки с наложенным профилем корреляционной функции $r(x)$; сравнение функции $r(x)$ с распределением $s_{ws}(x)$, характеризующим повреждения кристаллической структуры (б)

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

1. Rumyantsev A. V., Borgardt N. I., et al., Appl. Surf. Sci. 540, 1 (2021).

Комплекс дифракционного картирования для просвечивающей электронной микроскопии

И.А. Каратеев¹

¹НИЦ «Курчатовский Институт»

В данной работе представлены результаты разработки отечественного программного обеспечения для реализации методики дифракционного картирования в просвечивающем электронном микроскопе.

Для решения ряда современных задач материаловедения от просвечивающей электронной микроскопии требуется не только высокое разрешение, но и получение большого объема данных для проведения статистической обработки. Одним из методов, позволяющим получить большое количество данных об образце, является дифракционное картирование. Картирование может проводиться с произвольным шагом от единиц до десятков нанометров, а итоговая карта может содержать в себе десятки тысяч дифракционных картин. Расшифровка дифракционной карты позволяет получить не только информацию о кристаллографической фазе в каждой точке карты, но и определить её ориентацию в пространстве.

Комплекс дифракционного картирования представляет собой набор из нескольких программ [1]. Одна из них – экспериментальный модуль, который позволяет проводить эксперименты по дифракционному картированию. На данный момент реализована поддержка микроскопов фирмы ThermoFisher Scientific, однако программное обеспечение реализовано таким образом, что может быть легко модифицировано для поддержки другого оборудования. Другая программа – аналитический модуль, который отвечает за расшифровку полученных дифракционных карт. Он работает с дифракционными картами, полученными с помощью экспериментального модуля, и, как следствие, не зависит от конкретного производителя оборудования. Результатом расшифровки является файл, содержащий в себе кристаллографическую фазу и её ориентацию для каждой точки дифракционной карты. Аналитический модуль был существенно оптимизирован по сравнению с версией, представленной ранее [1].

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

1. И.А. Каратеев, А.В. Овчаров и др., Кристаллография 68, 1(2023)

Исследование структуры NbS₃ методами электронной микроскопии

*И.Н. Трунькин¹, А.Г. Иванова², Н.Б. Болотина², В.Я. Покровский³, С.Г. Зыбцев³,
А.Л. Васильев^{1,2}*

¹ НИЦ “Курчатовский институт”

² Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

³ Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН

Трихалькогениды – слоистые, квазиодномерные (нитевидные) кристаллы типа MX₃ (TiS₃, TaS₃, NbS₃, NbSe₃) являются перспективными материалами для производства полевых транзисторов, фотодетекторов и генераторов электроэнергии. Характерным свойством квазиодномерных проводников является образование волн зарядовой плотности (ВЗП). В результате пайерлсовского перехода ниже температуры ТР происходит конденсация свободных электронов в коллективное состояние. Металл превращается в диэлектрик, однако, так называемая фрёлиховская мода делает возможным перенос заряда, сконденсированного в ВЗП. Среди таких материалов особое место занимает NbS₃, полный список политипов которого пока не установлен и нуждается в исследовании.

Методом фокусированного ионного пучка в различных ориентациях были подготовлены срезы образцов NbS₃ и исследованы методами просвечивающей (растровой) электронной микроскопии, получены изображения кристаллической решетки и электронограммы. Исследования показали присутствие нескольких политипов NbS₃, а именно NbS₃-I, NbS₃-II, NbS₃-IIa и нового политипа – NbS₃-VII. Структура нового политипа предположительно является совмещением политипов - NbS₃-II и NbS₃-I, эта структура характеризуется моноклинной элементарной ячейкой с большой постоянной решетки $c = 2,94$ нм. Установлено, что NbS₃-II, NbS₃-IIa различаются параметрами элементарной ячейки, и эта разница может быть вызвана высокой плотностью двойников в NbS₃-IIa. Таким образом, показано, что в практически одинаковых условиях могут формироваться образцы с различной кристаллической структурой.

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

Исследование методом ПЭМ морфологии и размеров треков от тяжелых ионов энергией 0.08-0.4МэВ/нуклон в YBCO и выделениях его вторичных фаз

Я.Л. Шабельникова¹, Е.И.Суворова²

¹ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН*

² *Институт кристаллографии им А.В. Шубникова РАН*

Изучение особенностей формирования радиационных дефектов в высокотемпературном сверхпроводнике (ВТСП) $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ (YBCO) представляет интерес не только для фундаментальной, но и для прикладной науки, поскольку такие дефекты формируют намеренно, с целью создания центров пиннинга для улучшения сверхпроводящих свойств.

Кроме того, YBCO со всеми сформировавшимися в нем во время синтеза вторичными фазами, исследование которых также имеет фундаментальный и практический интерес, является хорошей реальной моделью для определения устойчивости кристаллических структур различных материалов к облучению ионами высоких энергий, а также возможности протекания фазовых переходов под действием облучения.

Методами аналитической просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) исследована устойчивость матричной фазы $YBa_2Cu_3O_{6+x}$, а также выделений вторичных фаз Y_2O_3 , $YCuO_2$, $Y_2Cu_2O_5$ и Y_2BaCuO_5 в многослойном композите $Ag/YBCO/LaMnO_3/MgO/Y_2O_3/Al_2O_3$ Хастеллой к воздействию ионов Хе и Кг с энергиями в интервале от 0.04 - 0.8 МэВ/нуклон. Для данных соединений установлено пороговое значение электронной тормозной способности ионов, ниже которого не образуются радиационные дефекты (треки), доступные для наблюдения в электронный микроскоп. Путем анализа картин электронной дифракции и ВРЭМ дифрактограмм выявлено, что структура внутри треков стала аморфной, в то время как первоначальные кристаллические структуры всех исследуемых фаз вне треков не изменились. Установлено, что диаметры наблюдаемых в электронный микроскоп треков для всех соединений в данном интервале энергий ионов не зависят от энергии бомбардирующих частиц для исследуемой толщины образца, а определяются плотностью материала.

В докладе будут представлены несколько существующих на данный момент моделей описания радиационных дефектов, а также будут обсуждаться результаты сравнения размеров экспериментально наблюдавшихся треков с предсказаниями аналитической модели термического пика, наиболее часто используемой в литературе.

Авторы выражают благодарность В.А. Скуратову за помощь в проведении экспериментов по облучению ионами, а также О.В. Уварову и А.В. Овчарову за приготовление тонких образцов для исследования методом ПЭМ.

Влияние облучения электронным пучком на спектры катодолюминесценции органо-неорганического перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$

Е.Б. Якимов, Ю.О. Куланчиков, П.С. Вергелес, Е.Е. Якимов

ИПТМ РАН

Гибридные органо-неорганические перовскиты в настоящее время привлекают большое внимание в связи с широкой областью их возможного применения, в частности, в солнечной энергетике и в радиационных детекторах. Однако, основным препятствием для их практического использования является низкая стабильность. Этим и обусловлена актуальность исследований изменений свойств таких материалов при различных воздействиях. В настоящей работе проведено исследование влияния облучения электронным пучком РЭМ на спектры катодолюминесценции монокристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$. Кристаллы были выращены методом кристаллизации из раствора при нагреве в лаборатории перспективной солнечной энергетике МИСИС. Облучение и измерение спектров катодолюминесценции (КЛ) проводились в РЭМ JSM-6490, оборудованном системой регистрации КЛ Gatan MonoCL3, при комнатной температуре.

Разложение спектра КЛ исходных кристаллов показало, что переходу зона-зона соответствует излучение с энергией 2.26 эВ. В результате облучения интенсивность этой линии понижается, и появляются новые линии излучения с большей энергией. Такое поведение свидетельствует о разложении исходной фазы и появлении новых фаз. Изменения спектра качественно подобны при всех энергиях пучка в диапазоне 2.5-30 кэВ, однако скорость изменений при повышении дозы облучения уменьшается с увеличением энергии пучка. Такую зависимость можно объяснить в предположении, что скорость разложения пропорциональна концентрации генерированных пучком носителей заряда, что свидетельствует о том, что основным механизмом повреждений является радиолиз. Обнаружены необычные линии излучения, энергия которых повышается с дозой облучения, что можно объяснить появлением новых фаз переменного состава.

Исследование *in situ* механических свойств полимерных материалов в камере растрового электронного микроскопа

Т.Д. Пацаев¹, Е.В. Ястремский², К.Г. Антипова¹, А.Л. Васильев^{1, 2}

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) Московская область, Долгопрудный

Искусственные матриксы с высокой удельной поверхностью и высокой пористостью, в частности, волокнистые матриксы, обеспечивают эффективное прикрепление клеток и доставку питательных веществ. Такие материалы необходимы в регенеративной медицине и все шире используются для формирования тканей и даже органов [1, 2]. Выбор материала и морфологии внеклеточного матрикса обусловлен индивидуальными характеристиками заменяемого органа или ткани, что часто требует заданных химических и физических свойств [3]. Матриксы на основе волокнистых нетканых материалов могут различаться диаметром волокон, степенью пористости, плотностью упаковки, взаимной ориентацией волокон. Все эти параметры определяют механические свойства материала [4], которые, в свою очередь, оказывают значительное влияние на процесс приживаемости при имплантации тканеинженерной конструкции [5]. Для использования матриксов с оптимальными механическими свойствами необходимо подробное изучение поведения искусственных матриксов под нагрузкой. Несмотря на активные исследования нетканых материалов в этом направлении [6], ряд вопросов остается неизученным. Особенно это касается вопросов комплексного исследования механических свойств с одновременной визуализацией матриксов в камере растрового электронного микроскопа (РЭМ).

Для понимания поведения материала под нагрузкой, кроме определения механических параметров, важно еще и выявление особенностей процесса возникновения дефектов, в частности разрывов, в зависимости от влияния условий среды, типов матриксов, их деградации и модификации различными биополимерами. РЭМ в режиме естественной среды позволяет исследовать образцы в условиях низкого вакуума при заданной влажности и температуре без дополнительной пробоподготовки.

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

1. Amiryaghoubi N., Fathi M., et al., Medicinal Research Reviews. 40, 5 (2020).
2. Ciolacu D.E., Nicu R., et al., Biomedicines. 10, 5 (2022).
3. Karamanos N.K., Theocharis A.D., et al., The FEBS journal. 288, 24 (2021).
4. Salehi S., Koeck K., Scheibel T., Molecules. 25, 3 (2020).
5. Lesman A., Habib M., et al., Tissue Engineering Part A. 16, 1 (2010).
6. Strunk T., Joshi A., et al., ACS Applied Bio Materials. 7, 9 (2024).

Применение данных магнитно-силовой микроскопии для моделирования полей рассеяния объемных одноосных ферромагнетиков

С.Д. Сметанникова, А.И. Синкевич, Е.М. Семенова, Г.Г. Дунаева

Тверской государственный университет, Тверь

Магнитно-силовая микроскопия (МСМ) – это современный высокоразрешающий метод исследования полей рассеяния доменной структуры (ДС) магнетиков. Качественный анализ МСМ изображений позволяет сделать предварительный вывод о магнитном состоянии образца, его анизотропии, наличии напряженных слоев и дефектов структуры. В то же время количественный анализ МСМ изображений остается как многообещающим, так и сложным методом исследования магнитных материалов.

В работе обсуждается поведение сигнала магнитного зонда над различными областями доменной структуры образца, а также изменение характеристик ДС в полях рассеяния объемного магнетика. Представлена серия МСМ изображений в широком диапазоне высот подъема зонда над образцом для высокоанизотропного одноосного монокристалла $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

Предложен и детально описан алгоритм моделирования полей рассеяния ДС одноосного магнетика на основе экспериментальных МСМ данных. Обсуждается ряд приборных особенностей регистрации сигнала при получении изображения на сканирующем зондовом микроскопе, таких как электростатический шум, нормировка сигнала зонда и явление дрейфа изображения и их влияние на работу моделирующего алгоритма. Предложены способы устранения данного влияния, встроенные в работу основного алгоритма.

Результатом работы алгоритма является пространственное распределение сигнала зонда в исследуемой области поверхности образца. На основе данного распределения были получены моделированные МСМ изображения на любой высоте подъема зонда над образцом, в том числе реструктурированное изображение на поверхности образца. Также численно было рассчитано взаимодействие системы образец – зонд, построены карты распределения сил и энергий взаимодействия в полях рассеяния в плоскостях, параллельных и перпендикулярных поверхности сканирования.

На основе предлагаемого алгоритма создана компьютерная программа (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2024669721), которая после загрузки экспериментальной серии МСМ изображений позволяет произвести моделирование, на основе которого будут построены пространственные распределения сигнала, силы и энергии, а также рассчитан микромагнитный параметр поверхностной плотности энергии доменных границ.

Исследование поверхности по границе раздела кремния со слоем стекловидного диэлектрика на образце МЭМС-КНИ чипа преобразователя давления методом растровой электронной микроскопии

Л.В. Соколов

АО «Раменское приборостроительное конструкторское бюро»

Цель исследования – по изображению структуры поверхности на границе раздела определить возможные локальные механические напряжения в чипах МЭМС-КНИ тензопреобразователей.

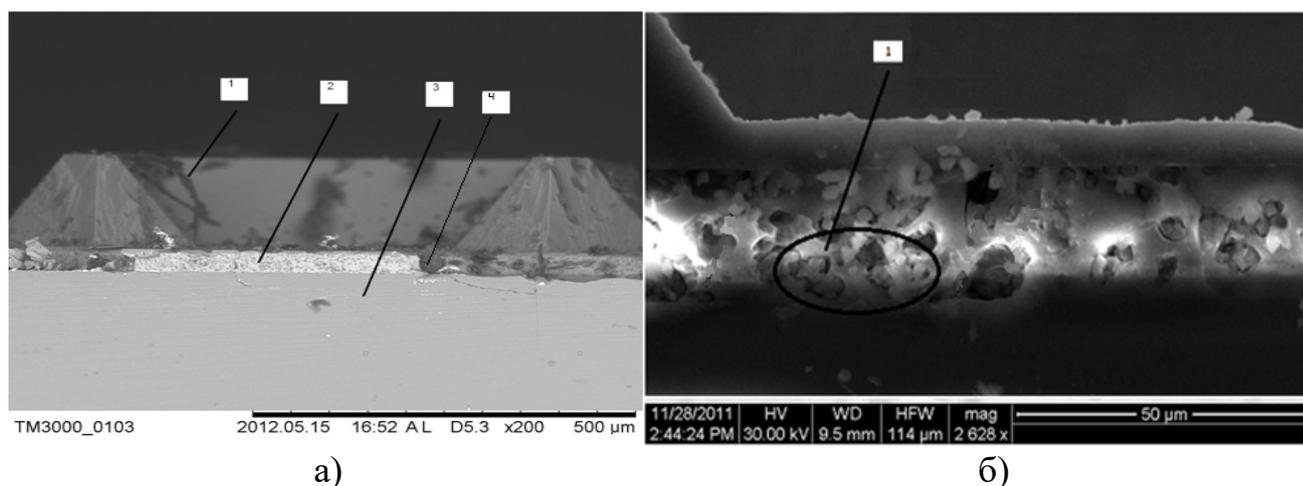


Рис.1. РЭМ изображения фрагментов поперечного скола чипа МЭМС-КНИ преобразователя давления: а – в области тензорамки (1 - кремниевая тензорамка, 2 - слой стекловидного диэлектрика, 3 - кремниевая мембрана, 4 - кластерные образования атомов кремния); б – за пределами тензорамки (1 - кластерные образования атомов кремния на границе раздела кремния со слоем стекловидного диэлектрика).

Изображения поверхностей на поперечном сколе чипа, полученные с помощью растрового электронного микроскопа ТМ3000, приведены на рисунке 1. Можно допустить, что в области 4 на рисунке 1а и в области 1 на рисунке 1б, при десятикратном увеличении, имеются кластеры атомов кремния, образовавшиеся в результате диффузии атомов при высокотемпературном процессе сращивания двух кремниевых пластин тонким слоем стекловидного диэлектрика в исходную КНИ пластину [1]. Эти кластеры могут быть источниками локальных механических напряжений, релаксирующих при изменениях внешних воздействующих факторов, в чипах тензопреобразователей. Следовательно, по этой причине увеличивается вероятность появления случайной погрешности в КНИ датчиках.

1. Н. И. Кошелев, О. Ю. Семёнов, А. И. Ермолаева. Формирование структур кремний-на-изоляторе методом термокомпрессионного сращивания кремниевых пластин через слой стекловидного диэлектрика. Перспективные материалы, №6 (2000), с.21-25.

Тормозная способность вещества для фокусированного моноэнергетического пучка легких ионов средних и низких энергий

Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах

НИИ “Курчатовский институт”

Фокусированный ионный пучок – многофункциональный инструмент, широко используемый в современных нанотехнологиях и локальных методах диагностики свойств создаваемых на основе этих технологий структур. Для эффективного применения количественных методов исследования наноматериалов, например, в сканирующей гелиевой микроскопии, необходимы надежные знания о тормозной способности исследуемых образцов по отношению к альфа-частицам с энергией от 1 кэВ до 60 кэВ. В рамках традиционно используемой исследователями базовой концепции непрерывного торможения удовлетворительной теории, позволяющей проводить расчеты тормозной способности вещества для заряженных частиц средних и низких энергий адекватно экспериментально измеряемым величинам, пока не создано. Как правило, используются табулированные данные, основанные на аппроксимации усредненных, так называемых, “наиболее достоверных” экспериментальных измерений.

В настоящей работе представлены результаты практического применения новой статистической модели [1,2] дискретного процесса многократного рассеяния заряженных частиц в веществе для расчетов тормозной способности твердотельных материалов и нахождения величин пробегов легких ионов в образце (при энергиях ионов в диапазоне от 1 кэВ до 100 кэВ). Приводятся результаты эффективного учета зарядового состояния низкоэнергетического пучка легких ионов при расчете тормозной способности. Они основаны на использовании принципиально новой методики [3,4], которая впервые учитывает зависимость этого параметра от отношения скорости ионов к минимальной скорости атомных электронов вещества. Показано наличие равновесного зарядового состояния для пучка ионов, когда отношение этих скоростей становится $\leq 1,55$. Приводятся формулы и базовые параметры, описывающие максимальный пробег пучка низкоэнергетических легких ионов, и результаты их апробации на соответствие экспериментальным данным.

1. Н.Н. Михеев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 94, 3, (2022). (DOI:10.31857/S1028096022030141).

2. Н.Н. Михеев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 56, 8, (2022). (DOI:10.31857/S10280960220).

3. Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 20, 1, (2023). (DOI:10.31857/S1028096023010168).

4. Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 72, 3, (2024). (DOI:10.26201/Surf.2024.3.72).

Микроструктурный анализ ВТСП лент 2-го поколения на основе (RE)BCO с искусственными центрами пиннинга различной природы

А.В. Овчаров¹, И.А. Каратеев¹, Е.И. Суворова¹, П.Н. Дегтяренко², А.Л. Васильев¹

¹ НИЦ «Курчатовский Институт»

² Объединённый институт высоких температур Российской академии наук

В настоящее время высокотемпературные сверхпроводящие (ВТСП) ленты 2-го поколения на основе $REBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, где RE – редкоземельный элемент (Y, Eu, Gd, Nd), активно используются в модернизации мировой сети линий электропередач, компактных устройствах неинвазивной диагностики для медицины, а также в создании индукционных нагревателей, мощных малогабаритных двигателей и др. Для успешного использования устройств на основе ВТСП во внешних сильных магнитных полях необходимо обеспечить закрепление вихрей Абрикосова на системе несверхпроводящих дефектов – центров пиннинга. Центры пиннинга можно разделить на два типа: естественные, возникающие спонтанно в процессе роста плёнок, и искусственные (ИЦП), которые специально вводятся во время ростового процесса, либо формируются в готовых ВТСП лентах.

В настоящей работе представлены результаты микроструктурных исследований ВТСП лент 2-го поколения с ИЦП различной природы. В частности, представлены результаты исследований лент, полученных в результате:

- Введения добавок на основе перовскитных соединений ($BaSnO_3$ и $BaZrO_3$) в процессе роста [1, 2];
- Облучения коммерческих ВТСП лент тяжёлыми ионами Хе и Вi [3-5];
- Изменения стехиометрического состава редкоземельного элемента в процессе роста [6].

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

1. A. V. Ovcharov, P. N. Degtyarenko, et al., Sci. Rep. 9, 15235 (2019).
2. P. Degtyarenko, S. Gavrilkin, et al., Supercond. Sci. Technol. 33, 4, 045003 (2020).
3. E. I. Suvorova, P. N. Degtyarenko, et al., J. Appl. Phys. 126, 14, 145106 (2019).
4. П. Н. Дегтяренко, В. А. Скуратов, et al., ЖЭТФ, 165, 6, 827 (2024).
5. P. Degtyarenko, V. Skuratov, et al., Bulletin of the Lebedev Physics Institute, 51, 8, 284 (2024).
6. П. Н. Дегтяренко, А. В. Садаков, et al., Письма в ЖЭТФ. 118, 8, 590 (2023).

Фазовый состав и термоэлектрические свойства кристаллов $\text{Cr}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_2$, выращенных методом направленной кристаллизации

М.С. Лукасов¹, Е.И. Суворова¹, А.Г. Иванова¹, Н.А. Архарова¹,
Ф.Ю. Соломкин², Ф.А. Буффа³

¹ "Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова" Курчатовского Комплекса
«Кристаллография и фотоника», НИЦ Курчатовский Институт

² Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН

³ EPFL-CIME, Lausanne, Switzerland

Влияние изменения концентрации Cr на химический и фазовый состав, морфологические особенности и направление роста силицидов Cr и Fe изучалось с использованием методов рентгеновской дифракции, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, электронной дифракции и рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии. Электропроводность, коэффициент Зеебека и факторы мощности были определены для выращенных и отожженных слитков. Образцы с общей формулой $\text{Cr}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Si}_2$ ($x=0.1, 0.2, 0.3$ и 0.4) были получены направленной кристаллизацией по методу Бриджмена. Исследования проводили на образцах до и после длительного отжига. При заданной скорости кристаллизации наблюдали образование нескольких типов микроструктур и сосуществование эвтектических зерен различной морфологии. Увеличение Cr в слитках привело к изменению пространственного распределения выделений, их размеров и фазового состава. Фаза CrSi_2 (пр. гр. $R\bar{6}222$) была выявлена в выращенных и отожженных образцах, причем ее количество прогрессивно увеличивается с ростом концентрации Cr. В образцах с малой концентрацией хрома ($x=0.1, 0.2$) выявлена тетрагональная фаза $\alpha\text{-FeSi}_2$ (пр. гр. $R4/mmm$) и кубической фаза $\varepsilon\text{-FeSi}$ (пр. гр. $P213$). После отжига $\alpha\text{-FeSi}_2$ (полуметалл) в результате фазового перехода превращается в $\beta\text{-FeSi}_2$ (полупроводник) с ромбической структурой $Cmca$, при этом количество кубической фазы $\varepsilon\text{-FeSi}$ значительно снижается. Растворимость Cr в силицидах Fe и Fe в CrSi_2 не зависит от номинальной концентрации Cr, введенного в исходные расплавы, тогда как отжиг образцов способствует уменьшению количества замещающей примеси на порядок.

Повышение концентрации Cr в расплавах до $x=0.3, 0.4$ приводит к полному исчезновению кубической фазы $\varepsilon\text{-FeSi}$. Соотношение $\alpha\text{-FeSi}_2/\varepsilon\text{-FeSi}$ в слитках определяет термоэлектрические параметры. Устранение образования пластинчатых кристаллов $\varepsilon\text{-FeSi}$ с металлическими свойствами после отжига может быть потенциальной стратегией для проектирования более механически устойчивых микроструктур и перспективным для повышения эффективности термоэлектричества на основе силицидов Cr-Fe. Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

Статистический анализ геометрических параметров и структурные исследования нанообразований на поверхности пленки $\text{Ge}_3\text{Sb}_2\text{Te}_6$

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 нового поколения. Известно, что рост GST на Si сопровождается ростом на поверхности объектов в виде усеченных пирамид, причины возникновения которых недостаточно изучены [1].

Для характеристики геометрических параметров объектов методом растровой электронной микроскопии получен массив из 30x30 изображений, одно из которых приведено на рис.1а. Этот массив соединялся в единое изображение, что позволило увеличить область исследования до 13282 мкм². Далее с применением алгоритма скользящего окна в сочетании со сверточной нейронной сетью осуществлялся поиск объектов (рис.1б). Для бинаризации их изображений использовались карты признаков (рис.1в), которые извлекались из сверточного слоя нейронной сети. Затем выявлялись границы объектов и измерялись длины сторон их оснований (рис.1г). В результате исследовано 1839 объектов. Длины сторон оснований пирамид варьировались от 80 до 290 нм, для большинства объектов они составили 156 нм.

Проведенные структурные исследования образцов планарного сечения методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показали, что объекты ориентированы так, что стороны их оснований лежат вдоль $\text{Si}\langle 110 \rangle$ (рис.1д, е). Методом рентгеновского микроанализа установлено, что объекты обогащены сурьмой и теллуrom примерно на 3% (рис.1ж, и).

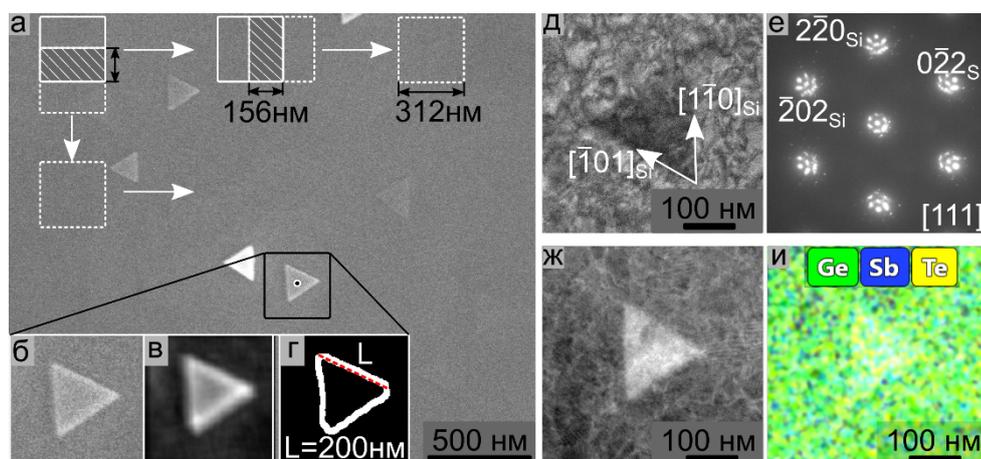


Рис.1 – Измерение геометрических параметров объектов (а-г), ПЭМ исследование структуры объектов (д-е) и определение их состава (ж-и)

1. Boschker J. E., Calarco R. *Advances in Physics*: X. 675, 2(2017).

Исследование процессов сегрегации частиц переходных металлов на поверхности перовскитных фаз методами просвечивающей электронной микроскопии

Е.Ю. Герасимов, А.В. Капишников, Е.А. Смаль, С.В. Цыбуля

Институт катализа СО РАН

В исследованиях каталитических реакций высокотемпературного окисления на твердых растворах со структурой перовскита особо можно выделить несколько подходов для повышения каталитической активности. Во – первых, варьирование катионов в структуре перовскита как в А, так и в В – подрешетке. Допирование позволяет получать широкий круг материалов с различными физико – химическими свойствами благодаря устойчивой структуре перовскита. Второй блок исследований связан с различными модификациями структуры перовскита, например, использованием механической активации, микроволнового излучения, обработки поверхности перовскита различными кислотами или проведение допирования поверхности благородными металлами. В данном подходе реализована возможность осуществлять контроль размеров частиц, модификации поверхности, создания неравновесных твердых растворов. Еще одним подходом, призванным увеличивать каталитическую активность, можно назвать модификацию уже полученного твердого раствора термообработками в различных средах, таких как гелий, водород и т.д. Использование такого метода позволяет выделять на поверхность активной фазы наночастицы переходных металлов непосредственно из перовскитной матрицы.

В настоящей работе были исследованы твердые оксиды со структурой перовскита с общей формулой $La_{1-x}Ca_xMn_{1-y}(Fe,Co)_yO_3$ методами высокотемпературного *in situ* РФА и ПЭМВР. Было показано, что термообработка в различных средах приводит к сегрегации частиц переходных металлов на поверхности перовскитной фазы. В зависимости от исследуемых исходных составов и выбранной температурной обработки происходит формирование различной гетерогенной структуры, в частности формирование как простых композиционных систем по типу простой оксид – перовскитная матрица, так и многокомпонентных систем, включающих формирование слоистых фаз со структурой Раддлесдена–Поппера. Для систем с повышенным содержанием катионов Са в подрешетке La происходят необратимые расслоения твердых растворов, включающие формирование слоя СаО на поверхности перовскитной фазы, в то время как при низком содержании Са в системе могут происходить обратимые фазовые переходы при термообработке в различных средах.

КриоЭМ структуры инактивированных флавивирусов

В.Р. Самыгина¹, Е.Б. Пичкур¹, М.Ф. Ворович^{2,3}, А.А. Ишмухаметов^{2,3}

¹НИЦ «Курчатовский Институт», Москва

²ФГАНУ ФНЦИРИП им. М.П. Чумакова РАН (Институт полиомиелита)

³ФГАОУ ВО Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет), Москва

Флавивирусы (ФВ) являются возбудителями ряда тяжелых заболеваний человека, как давно известных инфекций (жёлтая лихорадка (ЖЛ), лихорадка денге, лихорадка Западного Нила, японский и клещевой энцефалиты (КЭ)), так и вновь возникших, как лихорадка Зика, и способны к быстрому распространению на новых территориях. Ежегодно в мире регистрируется несколько миллионов случаев флавивирусных инфекций.

Специфических противовирусных препаратов для лечения не существует, вакцинация является единственным эффективным способом предотвращения и контроля заболеваемости. Для вакцинации применяют либо живые аттенуированные вакцины (как в случае ЖЛ, либо цельновирионные инактивированные вакцины, активным компонентом которых являются очищенные вирионы соответствующего ФВ (как в случае КЭ)). При получении цельновирионных инактивированных вакцин необходимо обеспечить сохранение структуры основных антигенных эпитопов белка Е, являющегося основным иммуногеном ФВ, обеспечивающим защиту от заболевания. Разработка новых флавивирусных вакцин может базироваться на данных об атомной структуре антигена Е, структуры ФВ высокого разрешения также позволяют анализировать сходство и различия разных штаммов одного вируса или различных ФВ, разрабатывать новые противовирусные препараты. Особенность получения структур криоЭМ нативных ФВ заключается в высоких требованиях к биобезопасности из-за высоких инфекционных рисков.

В работе впервые получены структуры инактивированных ВКЭ и ВЖЛ с высоким разрешением. Структура ВКЭ штамма Софьин решена с рекордным для штаммов ВКЭ разрешением 3.0Å. Структура ВЖЛ решена впервые в мире с разрешением 4.0Å. Показано, что инактивация вызывает разупорядоченность только трансмембранной части поверхностного белка Е и белка М. Таким образом инактивированный вирион ВКЭ сохраняет эпитопы, связывающие нейтрализующие антитела. Результаты демонстрируют, что возможно получение криоЭМ структур ФВ без специальных требований к биобезопасности криоЭМ платформ.

Работа выполнена за счет гранта РФФИ 18-02-40026 в части реконструкции структуры ВЖЛ и Соглашения от 12.10.2021 075-15-2021-1355 с Министерства науки и высшего образования РФ в части реконструкции структуры ВКЭ высокого разрешения.

Крио-ЭМ структура большой рибосомной субчастицы *Escherichia coli*, собранной *in vivo* в отсутствие жизненно важного рибосомного белка uL5

Т.Н. Баймухаметов¹, О.В. Кравченко², Ж.А. Афонина², А.П. Корепанов²

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² Институт белка Российской академии наук

Универсально консервативный рибосомный белок uL5 является важным компонентом большой субчастицы рибосомы. В *E. coli*, вместе с 5S рРНК и белками uL18 и bL25 он образует 5S рРНК-белковый комплекс, составляющий существенную часть центрального протуберанца 50S рибосомной субчастицы. С помощью биохимических методов ранее было показано, что в отсутствие uL5 в клетках *E. coli* образуются «дефектные» рибосомные частицы, в которых отсутствует как 5S рРНК-белковый комплекс, так и ряд рибосомных белков, входящих в состав центрального протуберанца. Это дает основание предполагать, что белок uL5 важен для более ранних этапов сборки рибосомы, чем считалось ранее.

В данной работе с помощью метода крио-ЭМ мы провели структурный анализ таких «дефектных» частиц и сравнили их с эталонными.

Было показано, что «дефектная» рибосомная частица лишена 5S рРНК и практически всех белков центрального протуберанца, а именно: uL16, uL18, bL25, bL27, bL31, bL33, bL35 и bL36. Кроме того, отсутствует крио-ЭМ плотность, соответствующая апикальной части А-сайтового пальца 23S рРНК, который формирует один из межсубъединичных мостиков в рибосоме, а также спиралям 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86 и 87 (домен V 23S рРНК). Спирали 42, 43, 44 (ГТФазный центр, домен II); 68, 69, 71 (домен IV); 76, 77, 78 (L1- выступ), 74, 89, 90, 91, 92 (пептидилтрансферазный центр, домен V) дестабилизированы.

Таким образом, отсутствие белка uL5 приводит к дестабилизации значительного участка большой субчастицы рибосомы, включающего практически все её функциональные центры.

Данная работа выполнена при поддержке гранта Российской научного фонда (№19-74-20186, <https://rscf.ru/en/project/19-74-20186/>).

Роль электронной микроскопии в обнаружении на Луне самородных форм лантаноидов

А.В. Мохов¹, П.М. Карташов², Т.А. Горностаева¹, А.П. Рыбчук¹

¹ГЕОХИ РАН

²ИГЕМ РАН

Аналитическая электронная микроскопия показала себя как эффективный метод при поиске в тонкодисперсном лунном реголите ранее неизвестных фаз. Особый интерес вызывают находки предельно фракционированных, до индивидуальных элементов, редкоземельных металлов.

Благодаря высокой локальности метода и за счёт использования ускоряющего напряжения 25 кВ в препарате образца грунта, доставленного на Землю из Моря Кризисов автоматической станцией «Луна-24», в матрице поликристаллического сильвина было обнаружено зерно самородного эрбия. Зерно, размером чуть больше 1 мкм, являлось агрегатом нескольких частиц меньшего размера. При этом агрегат частиц эрбия был покрыт тончайшим слоем силикатного стекла, изолирующего металл от сильвиновой матрицы. Самородная форма выделения эрбия подтверждена рентгеновскими картами распределения элементов, демонстрирующих отсутствие в нём кислорода.

Ранее методами электронной микроскопии были обнаружены также в металлической форме церий (Богатиков и др., 2002), иттербий (Мохов и др., 2011) и европий (Мохов и др., 2015). Все найденные частицы аномально дифференцированных редкоземельных элементов были представлены субмикронными частицами, покрытыми наноплёнками силикатного стекла, что позволило их изолировать от взаимодействия с окружающими фазами и атмосферой.

Учитывая размеры, морфологию и наличие стеклянной плёнки на поверхности этих фаз, можно предположить конденсатный механизм их образования.

1. Богатиков О. А., Горшков, А. И., Мохов А. В., Карташов П. М., Ашихмина Н. А., Магазина Л. О. Новые находки самородных металлов в лунном реголите из Моря Кризисов // Доклады Академии наук, 2002. – Т. 382. – №. 3. – С. 371-373.

2. Мохов А.В., Карташов П.М., Горностаева Т.А., Богатиков О.А. Самородный иттербий из реголита АС «Луна-24». ДАН, 2011, том 441, №5, с. 670–673.

3. Мохов А.В., Горностаева Т.А., Карташов П.М., Богатиков О.А. Селективные европиевая и цериевая фазы в реголите из Моря Кризисов. Доклады Академии наук. 2015, том 465, № 1, с. 87–90.

Низкотемпературные конденсаты из импактитов кратера лонар (Индия) и лунного реголита

Т.А. Горностаева¹, А.П. Рыбчук¹, А.В. Мохов¹, П.М. Карташов²

¹ГЕОХИ РАН

²ИГЕМ РАН

Проведено сравнительное изучение импактных стёкол кратера Лонар (Индия) и импактных стёкол из лунного реголита, доставленного советскими АС «Луна-16» и «Луна-24». Методами сканирующей электронной микроскопии обнаружены низкотемпературные конденсатные фазы HgTe и PtS, проведено сравнение с ранее найденными в лунном реголите.

Методами СЭМ в импактных стёклах кратера Лонар была обнаружена частичка размером 0.2 мкм, содержащая не только Hg, но и Te. Съёмка во вторичных электронах показала, что частица покрыта плёнкой стекла глобулярной морфологии, характерной для конденсата. Численный пересчёт спектра с учётом вклада силикатной составляющей показал, что отношение Hg/Te примерно равно 1/1. Ранее нами были обнаружены низкотемпературные конденсаты в лунном грунте, в том числе HgS [1], ртутьсодержащий сульфид $(\text{Cu}_{10}\text{Ag}_2\text{Hg})_{13}\text{S}_{14}$ [2]. Существует разница в температурах конденсации серы и ртути, а также более значительная для ртути и теллура. Однако совместная конденсация в виде соединений в минеральные формы видимо энергетически более выгодна и происходит при более низкой температуре, что мы и наблюдаем на примере обнаруженного в импактитах кратера Лонар HgTe.

Также методами СЭМ на сколе одной из частиц импактного стекла из кратера Лонар был найден агрегат частиц размером около 1 микрона с размером отдельных частиц порядка 50 нм. Морфологически он представлял собой агрегат наноразмерных частиц заключенных в конденсатном стекле, что указывает на её конденсатное происхождение. Состав частиц не отвечал ни одной известной кристаллической фазе в поле диаграммы Pt-S. Агрегат представлен либо аморфными образованиями, либо наночастицами переменного состава (разными отношениями Pt:S). В пределах столь короткого интервала процесса конденсации, количество каждого из этих элементов участвующих в конденсационном процессе меняется асинхронно, в соответствии с индивидуальными температурными зависимостями. Следовательно в каждый момент времени, этого и без того крошечного временного интервала, состав конденсирующихся наносфер будет различным. Таким образом, каждый из обнаруженных конденсационных агрегатов Pt:S состоит из структурных нанозародышей с индивидуальными термической историей и составом.

1. Мохов А.В., Карташов П.М., Горностаева Т.А., Богатииков О.А. Ртутьсодержащий сульфид из лунного реголита Моря Изобилия // «Вестник КРАУНЦ. Науки о Земле», 2014, № 2, вып.24, с. 231-236.

2. Рыбчук А.П., Мохов А.В., Горностаева Т.А., Карташов П.М., Богатиков О.А. Находка HgS в лунном реголите из проб “Аполлона-17” // Доклады российской академии наук. Науки о земле, 2020, том 491, № 3.38-41.

Исследование материала паст в заполнении орнамента сосудов раннего железного века из могильника Песчаный IV

*А.Ю. Лобода¹, Н.В. Леонова², П.И. Калинин³, А.В. Мандрыкина¹, С.Н. Малахов¹,
Е.С. Куликова¹, Е.Ю. Терещенко¹, Е.Б. Яцишина¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»,

² Государственный исторический музей

³ Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения РАН, Пущино

В работе исследовался материал паст из канавок орнаментов на фрагментах двух сосудов раннего железного века из могильника Песчаный-IV (Ростовская область). Объекты происходят из коллекции Государственного исторического музея. Сосуд 1 близок к керамике из северокавказских памятников раннего железного века (IX–VII вв. до н.э.), сосуд 2 – к керамике скифского времени степного Крыма (VII–III вв. до н.э.).

Для определения природы материала паст применялись: растровая электронная микроскопия с энергодисперсионным рентгеновским микроанализом, ИК-спектроскопия и рентгенофазовый анализ на источнике «КИСИ-Курчатов».

Установлено, что в сосуде 1, близком к северокавказским изделиям, декоративная паста выполнена из смеси натроярозита и каолинита, а в сосуде 2, схожем со скифскими изделиями – из кальцита. Морфологические особенности найденных в кальците известковых пластин кокколитофоридов (рис.) указывают на происхождение исходного сырья для пасты, а значит, и самого сосуда, с территории Крыма.

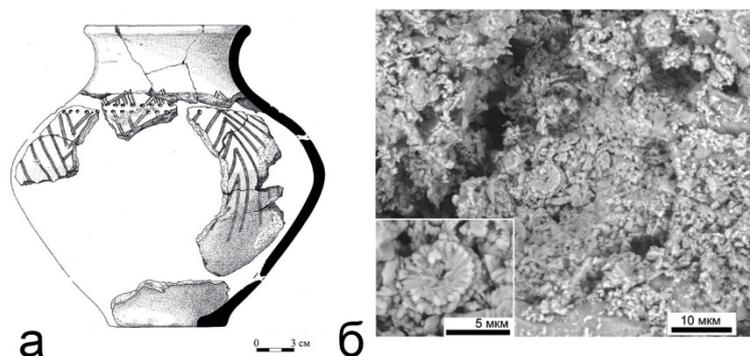


Рисунок.

Сосуд 2 (а) и РЭМ-изображение пасты (кальцита) с фрагментами пластин кокколитофоридов (б).

Таким образом, получено доказательство, что в Донские степи в раннем железном веке попадали керамические сосуды из разных мастерских, включая северокавказские и крымские, что расширяет наши знания о миграции кочевых народов на Нижнем Дону.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России в рамках Соглашения о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии № 075-15-2023-010 от 21.02.2023 (15.СИН.21.0024).

Перстневые вставки XIV века из раскопок немецкого двора в Великом Новгороде: комплексный анализ методами естественных наук

*Е.А. Созонтов¹, Э.А. Грешиников¹, П.Г. Гайдуков², П.В. Гурьева¹,
Е.С. Коваленко¹, С.Н. Малахов¹, И.Н. Трунькин¹, М.М. Мурашев¹,
О.А. Кондратьев¹*

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

² *Институт археологии РАН, Москва*

Проведены комплексные исследования двух перстневых вставок (№ 2221 и № 2223), датируемых XIV в. Визуально каждая вставка состоит из двух плоско-выпуклых пластинок бесцветного прозрачного вещества, склеенных вместе (рис. 1а). В зоне контакта пластинок визуально наблюдается вещество розового цвета. Методом нейтронной томографии на монохроматическом излучении установлено, что обе пластинки каждой вставки представляют собой монокристаллы. Проведенная рентгеновская дифрактометрия пластинок показала, что это монокристаллы кварца. По данным рентгеновской томографии в пластинках обнаружены пустоты и включения (рис. 1б). Объем пустот для вставок №№ 2221 и 2223 составил около 0,03 % и 0,002 % соответственно. Объем включений для № 2221 – 0,04 % и 0,002 % для № 2223. Также был выявлен клеящий слой с неравномерно распределенным в центре пигментом толщиной ~ 30 мкм (рис. 1в). На основе данных ИК-спектроскопии, высказано предположение, что красящей субстанцией, имитирующей цвет драгоценного камня, может быть смола фисташкового дерева розовой природной окраски, а клеящим веществом – клей животного происхождения.

Секция 4

Аппаратно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов

Диагностика материалов на основе спектроскопии рентгеновского поглощения - на пути к operando нанометрологии

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

Южный федеральный университет

В докладе дается обзор применения спектроскопии рентгеновского поглощения с использованием источников синхротронного излучения для определения параметров наноразмерной атомной и электронной структур материалов. Особое внимание уделено описанию применения методов машинного обучения для анализа больших данных в спектроскопии рентгеновского поглощения в области предкрая, в области XANES и в области EXAFS для определения параметров наноразмерной атомной структуры материалов на основе теоретического анализа экспериментальных спектров. Особенность такого подхода заключается в том, что он позволяет не только с высокой точностью (до 0.002 нанометра) определять межатомные расстояния (функцию радиального распределения), но и угловое распределение атомов – то есть параметры 3D локальной атомной структуры любых материалов, включая возможность применения для изучения зависящих от времени процессов и, в частности, исследование изменения параметров наноразмерной атомной структуры материалов в ходе химических реакции или в ходе процесса фотовозбуждения.

Реализация такой методики имеет важное значение не только для расширения фундаментальных знаний, но и для последующего практического использования. На основе разработанного прецизионного подхода к диагностике материалов 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. Разработка методики рентгеноспектральной нанометрологии крайне важна для решения задач ускоренного создания новых перспективных материалов и реинжиниринга стратегически важных материалов, необходимых для обеспечения технологического суверенитета Российской Федерации.

Статус изготовления экспериментальной станции 1-3 «Быстропротекающие процессы» ЦКП «СКИФ»

Э.Р. Прууэл¹, А.А. Студенников¹, И.А. Рубцов^{2, 1}

¹ *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук*

² *Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ")*

На сегодняшний день в наукограде Кольцово (Новосибирская область) идет строительство источника синхротронного излучения 4+ поколения ЦКП «СКИФ». В рамках научной программы первой очереди запланирован запуск шести станций, одной из которых является станция 1-3 «Быстропротекающие процессы».

Станция 1-3 базируется на сверхпроводящем вигглере с диапазоном энергий от 20 до 40 кэВ и мощностью рентгеновского излучения выходящего из фронтэнда 10 кВт. Апертура пучка на дальних элементах канала составит 100 мм. Запланированное оборудование позволит проводить исследования с временным разрешением лучше 100 нс.

Для снижения тепловой и радиационной нагрузки канал будет оборудован системой прерывания пучка, позволяющей пропустить на оптические элементы, исследуемый объект и детектор излучение только на время продолжительностью 100 мкс. Это позволит использовать на канале такие прецизионные инструменты как оптические щели, монохроматор, фокусирующее многосекционное зеркало и чувствительные рентгеновские детекторы.

Основным направлением станции является исследование быстропротекающих процессов, требующих для регистрации большой интенсивности излучения: детонационные свойства энергетических материалов, поведение вещества при ударном сжатии и импульсном разогреве, разрушение материалов и конструкций в условиях аварийного воздействия. Для создания ударных воздействий будут использоваться энергетические материалы и пневматические пушки.

На станции запланированы как рентгеновские методики с высоким временным разрешением: радиография, малоугловое рассеяние и дифракция, так и современные экспериментальные методы исследования быстропротекающих процессов. Это позволит в одном взрывном эксперименте проводить комплексное исследование сразу несколькими методиками.

Кремниевые планарные интерферометры для источников 4-ого поколения

Д.А. Зверев¹, М.Н. Сороковиков¹, В.А. Юнкин², С.М. Кузнецов², А.А. Снигирев¹

¹ *Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта, Калининград*

² *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН,
Черноголовка*

Сегодня кремниевая планарная преломляющая оптика становится ключевым инструментом для сканирующих методов визуализации и микроскопии на современных источниках синхротронного излучения, а также является многообещающим оптическим решением для рентгеновских лазеров на свободных электронах (XFEL). Например, планарные составные преломляющие линзы [1], изготовленные в виде микроструктур на поверхности пластин из монокристаллического кремния с использованием высокоточных методов его микрообработки (МЭМС технология), позволяют фокусировать жесткое рентгеновское излучение в пятно размером всего несколько десятков нанометров. Это обеспечивает высокое пространственное разрешение и чувствительность когерентных рентгеновских методов исследования, что особенно важно для применения в материаловедении, биологии и нанотехнологиях.

Яркой демонстрацией кремниевой планарной преломляющей оптики также является рентгеновский интерферометр, представляющий собой набор из нескольких рядов кремниевых составных преломляющих линз, преобразующих падающее когерентное монохроматическое излучение в интерференционное поле. При когерентном рентгеновском освещении интерферометр генерирует массив сфокусированных пучков [2, 3]. За фокусом пучки перекрываются, создавая устойчивую интерференционную картину полос в дальнем поле. Такие устройства позволяют реализовать параксиальные оптические схемы интерферометрии, основанные на когерентных свойствах современных рентгеновских источников. Формируемая ими периодическая пространственная структура пучка открывает новые возможности для разработки методов рентгеновской фазоконтрастной визуализации [4], может быть использована для создания специального освещения на современных синхротронах и лазерах на свободных электронах, а также для задач диагностики источника, транспорта и подготовки рентгеновского пучка [5].

1. V. Aristov, et al., Applied Physics Letters 77, 4058-4060 (2000).
2. A. Snigirev, et al., Physical Review Letters 103, 064801 (2009).
3. A. Snigirev, et al., Optics Express 22, 25842-25852 (2014).
4. D. Zverev, et al., Optics Express 28, 21856-21868 (2020).
5. D. Zverev, et al., Optics Express 29, 35038-35053 (2021).

Расширение методов спектроскопии и микроскопии функциональных материалов в ультрамягкой рентгеновской области синхротронного излучения

С.Ю. Турищев¹, Е.В. Паринова¹, О.А. Чувенкова¹

¹Воронежский государственный университет

Разработки в области функциональных материалов и структур уже давно невозможно представить без высокоточной диагностики позволяющей восстановить фундаментальные свойства изучаемой системы на атомном или субатомном уровне. Методы электронной микроскопии, такие как просвечивающая и растровая электронная микроскопия являются обязательными для диагностики материалов и структур пониженной размерности. Важными являются и методы, чувствительные к структуре вещества, такие как дифракция рентгеновских лучей или электронов.

Применение синхротронного излучения чрезвычайно высокой интенсивности, коллимированности и варибельности длины волны в современных приложениях методов рентгеновской и электронной спектроскопии и микроскопии крайне востребовано. В самом деле, такие взаимодополняющие друг друга методы, как спектроскопия рентгеновского поглощения и фотоэлектронная спектроскопия обладают высокой чувствительностью к локальному атомному окружению, химической связи даже в случае малых количеств изучаемого материала. Это безусловно важно для понимания фундаментальных причин проявления свойств изучаемых структур, оптимизации их функционального назначения и отработке технологических аспектов формирования.

С точки зрения диапазона энергий квантов (длин волн) ультрамягкое рентгеновское излучение крайне важно для материалов, особые свойства которых продиктованы или находятся в прямой зависимости от чрезвычайно развитой поверхности - материалов нанометрового диапазона и структур на их основе. Использование синхротронного излучения в этом диапазоне привело к усовершенствованию и существенному расширению возможностей методов рентгеноэлектронной спектроскопии, в том числе в связке с методами, реализуемыми в лабораторных условиях.

Будут приведены примеры совместного использования синхротронных и лабораторных методов рентгеноэлектронной спектроскопии и их расширений для диагностики функциональных наноматериалов включая бионаногибридные.

Работа подготовлена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

Постерная сессия

Секция 1

Синхротронное излучение и нейтроны в
материаловедении

С 101 Исследование структуры функциональных сплавов на основе палладия

О.В. Акимова¹, Е.С. Куликова²

¹Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

²НИЦ «Курчатовский институт»

Развитие наукоемких технологий требует материалы с особыми новыми свойствами. В этом направлении проводятся и наши исследования изменения структурного состояния кристаллической решетки палладия при его легировании, влияния теплового воздействия и гидрирования на процессы порядок-беспорядок. Материал для исследования, а именно сплавы на основе палладия, предоставлен Институтом металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук (ИМЕТ РАН). Образцы выполнены в виде плотных металлических мембран-фольг толщиной от 50 мкм до 60 мкм. Изготовлены образцы методом холодного проката из металлов высокой степени чистоты (99.95 %).

Применение синхротронного излучения (СИ) в методе рентгеновской дифракции в разы повышает точность и информативность дифрактограмм, а, значит, и определяемых нами характеристик металлических систем [1].

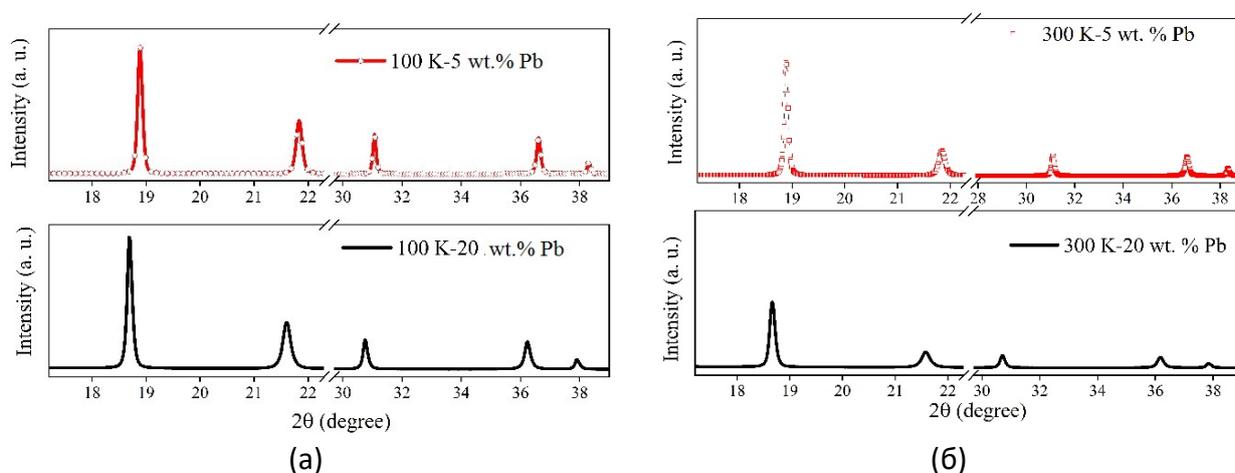


Рис. 1. Дифрактограммы [1], снятые с образцов мембранных сплавов $Pd_{95}Pb_5$ и $Pd_{80}Pb_{20}$ (а)-при 100 К; (б)-при 300 К.

На рис. 1 приведены дифрактограммы из работы [1], на основании которых выявлено изменение интенсивности тепловых колебаний атомов кристаллической решетки сплавов $Pd_{1-x}Pb_x$ ($x=5; 20$ масс.%) как при изменении концентрации легирующего палладий элемент–свинца, так и в зависимости от температуры исследуемых сплавов.

С 127 Влияние атомов Ge на формирование аморфных пленок $TlGaSe_2$

Э.Ш. Алекперов¹, Г.Б. Ибрагимов², А.М. Назаров², А.М. Нариманзаде¹

¹Бакинский государственный университет, Баку, Азербайджан

²Институт физики им. академика Г.М.Абдуллаева, Баку, Азербайджан

Аморфные пленки соединений $TlGa_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x=0.02\div 0.08$) толщиной 35 нм исследованы методом ДЭВЭ. Определено, что при взаимодействии атомов тройного соединения с внедренными в качестве примеси атомами Ge расстояние между атомами в пленках увеличивается от 3-х до 7-и %. Соответственно указанному увеличению расстояния между атомами наблюдается и увеличение координационного числа, вычисленного по площади под координационными максимумами, а также диапазона температур формирования аморфных пленок. При этом возможно прецизионно управлять параметрами тонких аморфных пленок.

Полупроводниковые соединения, входящие в группу $A^3B^3C_2^6$, как известно, широко используются в приборостроении, оптоэлектронике. Учитывая потребности в полупроводниках с новыми свойствами, нами исследованы аморфные пленки неполновалентного соединения $TlGaSe_2$ с внедренными атомами Ge в небольших концентрациях.

В данной работе даны результаты исследований методом дифракций электронов высоких энергий (ДЭВЭ) аморфных пленок $TlGa_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x= 0.02\text{--}0.08$) толщиной 35 нм, полученных одновременным испарением синтезированного монокристалла $TlGaSe_2$ и Ge при комнатной температуре из двух разных вольфрамовых печей в вакууме $\sim 4 \times 10^{-5}$ Па. Эти пленки покрывались сверху и снизу углеродной пленкой толщиной ~ 3 нм. В качестве подложек служили свежесколотые монокристаллы NaCl, KJ и целлулоид на сетке. Скорость осаждения молекулярного пара в вакууме составляла 3 нм/сек.

При интерпретации электронограмм, полученных от аморфных пленок $TlGa_{0.93}Ge_{0.07}Se_2$, по данным для интенсивностей и нормированной интерференционной функции $i(s)$ построена кривая радиального распределения атомов (КРРА). Расчеты КРРА проведены с помощью программы RADIADIAS на компьютере.

При формировании аморфных структур указанных составов в тонких слоях присутствие германия в виде примеси влияет на характер взаимодействия атомов систем Tl – Se и Ga – Se. Экспериментальными исследованиями установлено, что пленки $TlGaSe_2$ имеют нетривиальные особенности, которые контролируются как условиями формирования, так и дозированным легированием их атомами химического элемента Ge. По всей видимости, внедрение атомов Ge в пленки $TlGaSe_2$ приводит к образованию твердых растворов замещения.

С 102 Определение параметров нанокомпозитов "ядро-оболочка" методом рентгеновского малоуглового рассеяния

С.В. Амарантов

РНИЦ Курчатовский институт КККиФ

В данной работе модель "ядро-оболочка" использовалась при обработке кривых малоуглового рентгеновского рассеяния от раствора квантовых точек (КТ) CdSe/ZnS в толуоле (10% массовая концентрация, с тах поглощения 520нм) и композита 10% золотых наночастиц (НЧ) Au 2,2 мг/мл, присутствии ПС-ПВП/PS-PVP (полистирол поливинилпиридин) 19,7 мг/мл в буфере ДМФА (диметилформамид) [1]. КТ интересны своими оптическим свойствами - экситонным, а золотые НЧ плазмонным типом электронного возбуждения. Нами была измерена малоугловая кривая рассеяния от модуля вектора рассеяния q ($q=4\pi \sin(\theta)/\lambda$, где θ – половина угла рассеяния, с длиной волны $\lambda=0,144$ нм) от КТ и проведена обработка этой кривой моделью: «ядро-оболочка», с отношением плотности ядра к плотности оболочки - как одного из параметров модели и внешним радиусом оболочки R_0 с дисперсией $\sigma(R_0)$. В таблице приведены найденные параметры модели.

$D_V(R)$		модель «ядро-оболочка»			
Средний радиус	индекс полидисп.	Внешний радиус	дисперсия	толщина оболочки	Отношение плотности
$\langle R \rangle$, нм	PDI	R_0 , нм	$\sigma(R_0)$, нм	ΔR , нм	$\eta = c_{core}/c_{shell}$
2.5	0.20	2.5	0.3	0.8	1,15

таблица

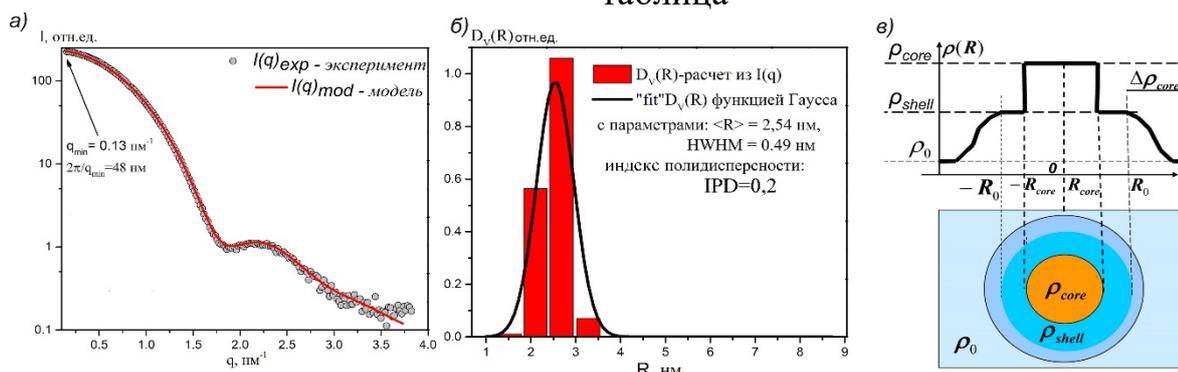


Рисунок а,б,в. для КТ CdSe/ZnS.

Модель рис.(а) сплошная линия – рассеяние от сферической частицы со ступенчатым профилем радиальной плотности частицы "ядро-оболочка", см. рис.(в). Рис.(б) распределение $D(R)$. Для образца – золотых НЧ в полимерной оболочке ПС-ПВП используется модель радиальной плотности с наличием промежуточной области между металлическим ядром и полимерной оболочкой [1].

С 103 Комплексный подход к изучению археологических находок и предметов музейных коллекций из цветного и драгоценного металла

*А.В. Антипенко*¹

¹*Институт археологии Крыма РАН, Симферополь*

Комплексный подход к исследованию вещей, происходящих из раскопок памятников археологии, основывается на получении максимума информации, которая может быть полезна для изучения быта, торговых связей и технологий древности. С этой целью нами была отработана методика работы и обработки данных на спектрометре «M1 Mistral» Bruker. Данные содержания в сплаве основных элементов вносятся в общую таблицу, которая включает сведения о типе изделия, месте находки и хронологии комплекса. Полученные результаты анализируются по нескольким параметрам: типам вещей и категории вещевого инвентаря. Для установления хронологических особенностей использования рецептуры сплавов анализируются данные для датированных комплексов, содержащих значительное количество инвентаря. Следующим уровнем изучения является сравнение результатов, полученных для синхронных материалов, происходящих из разных памятников. Эта информация используется для получения ответов на следующие вопросы: изготовлена ли отдельная вещь на месте или вдали от места находки; является ли данный состав сплава преднамеренным или случайным; какова была технология того или иного производственного процесса. Изучение предметов музейных коллекций имеет ряд отличий, которые связаны как с особенностями хранения, реставрации, так и со способом попадания артефакта в музейное собрание. Можно отметить, что отдельные уникальные изделия требуют более пристального внимания и индивидуально подобранной методики исследования. Специфический подход используется и для изучения находок, поступивших в музей, в рамках борьбы с незаконным оборотом культурных ценностей.

Работы выполнены при финансовой поддержке гранта в форме субсидии № 075-15-2023-010 от 21.02.2023 (15.СИН.21.0024).

С 104 Состав и строение кристаллов и растворов $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O} : \text{Co}$.

Дифракционные и комплементарные методы.

*Л.А. Арбанас¹, И.А. Каурова¹, Г.М. Кузьмичева¹, А.Л. Тригуб², А.В. Дорохов¹,
В.Л. Маноменова²*

¹МИРЭА-Российский технологический университет

²НИЦ «Курчатовский институт»

Кристалл $\alpha\text{-NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\alpha\text{-NSH}$) (пр. гр. $P4_12_12$, $Z = 4$) с высокой пропускной способностью в диапазоне 200–350 нм используется для создания УФ-фильтров солнечно-слепого диапазона. Оптические свойства $\alpha\text{-NSH}$ связаны с водородными связями и октаэдрическими гидратокомплексами $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, при этом присутствие $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]$ в активированных кристаллах $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}$ повышает эффективность оптической фильтрации.

Цель работы - установление структурных особенностей, формируемых в водно-солевых растворах (**P**, $c=0.02\text{--}3\text{M}$) и монокристаллах $\alpha\text{-NSH}$ (**M**, метод снижения температуры; $c(\text{Co})=10\text{ mM}$; 162 г) при введении малых концентраций Co^{2+} .

В габитусе **M** присутствуют грани пинакоида (001) и тетрагональных пирамид (101), (102). Дифрактограммы **P** и **M** (PowDiX 600; $\text{CuK}\alpha$) свидетельствуют об однофазности образцов. Параметр a , Å и объем V , Å³ ячейки **M** увеличиваются в ряду $\alpha\text{-NSH} < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(101) < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(102) < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(001)$, а параметр c , Å - в ряду $\alpha\text{-NSH} < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(001) < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(102) < \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(101)$, что подтверждает замещение ионов Ni^{2+} (${}^{\text{VI}}r\text{Ni}^{2+}=0.69\text{Å}$) на ионы Co^{2+} (${}^{\text{VI}}r\text{Co}^{2+}=0.75\text{Å}$) и указывает на разную концентрацию Co^{2+} в секторах роста кристалла $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}$.

На ИК-спектрах **P** и **M** (WQF-530A; 4000–400 cm^{-1}) присутствуют 3 полосы, связанные с O–H группами ($\sim 3200\text{ cm}^{-1}$), молекулами воды ($\sim 1640\text{ cm}^{-1}$) и SO_4^{2-} группами ($\sim 1080\text{ cm}^{-1}$), интенсивность которых уменьшается при разбавлении раствора (для **P**) и в ряду $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}(101) > \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(102) > \alpha\text{-NSH}:\text{Co}(001)$ (для **M**). Кроме того, на ИК-спектрах $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}$ есть полоса $\delta(\text{Co}^{2+}\text{--O})$, еще раз подтверждающая вхождение ионов Co^{2+} в $\alpha\text{-NSH}$. Данные ДСК (Netzsch DSC 204) и ИК- спектров по содержанию H_2O в составе **M** хорошо согласуются между собой.

Таким образом, для применения $\alpha\text{-NSH}:\text{Co}$ важно учитывать составы секторов роста (**M**) и молярность раствора (**P**), которые будут влиять на свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № F5FZ-2024-0026) и в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатовский институт”.

С 105 Особенности микроструктуры тонких пленок ортоферрита иттрия на сапфире

*А.О. Беляева¹, А.Л. Васильев¹, И.А. Субботин¹, Ю.М. Чесноков¹, В.В. Изюров²,
К.А. Меренцова², М.С. Артемьев², С.С. Дубинин², А.П. Носов², Э.М. Пашаев¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

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

Кристаллическая структура и физические свойства для объемных кристаллов и тонких пленок могут существенно различаться. Из-за рекордной сверхзвуковой скорости распространения доменных границ, ортоферрит иттрия с орторомбической кристаллической решеткой (α - YFeO_3) является перспективным материалом для нового поколения спинтроники. Однако литературные данные о состоянии ультратонких слоев α - YFeO_3 (менее 50 нм), пригодных для создания современных устройств спинтроники со сверхбыстрым перемагничиванием, довольно скудны.

Для изучения формирования ультратонких слоев YFeO_3 на подложках α - Al_2O_3 были проведены структурные исследования образцов методами рентгеновской диагностики и электронной микроскопии. Тонкие пленки ортоферрита (3÷50 нм) выращены на подложках α - Al_2O_3 методом магнетронного напыления и подвергнуты послеростовому высокотемпературному отжигу.

Рентгеновская диагностика позволила выявить различия в кристаллической структуре пленок разной толщины. Ввиду большого несоответствия кристаллических решеток сапфира и ортоферрита иттрия, сильное влияние подложки на формирование ультратонких пленок в совокупности с быстрой кристаллизацией приводит к образованию не только ортоферрита, но и других ферритных фаз (гексаферриты, феррит-гранаты, оксиды железа). В пленках толщиной более 10 нм влияние напряжений на границе раздела пленка/подложка ослабевает, а относительная доля фазы ортоферрита возрастает.

Проведенные рентгеновские и электронно-микроскопические исследования пленок ортоферрита иттрия позволили проследить изменение их микроструктуры. Установлены различия морфологии пленок. В частности, морфология поверхности ультратонких пленок носит островковый характер. С увеличением толщины пленки происходит постепенное заращивание островков и при достижении критической толщины наблюдается переход к послойному росту. Данные электронной дифракции подтвердили рентгенодифракционные исследования фазового состава сформированных тонких пленок ортоферрита иттрия на подложках сапфира.

С 106 Первая кристаллическая структура анионного комплекса Fe(III) на основе тиосемикарбазона пировиноградной кислоты с катионом лития

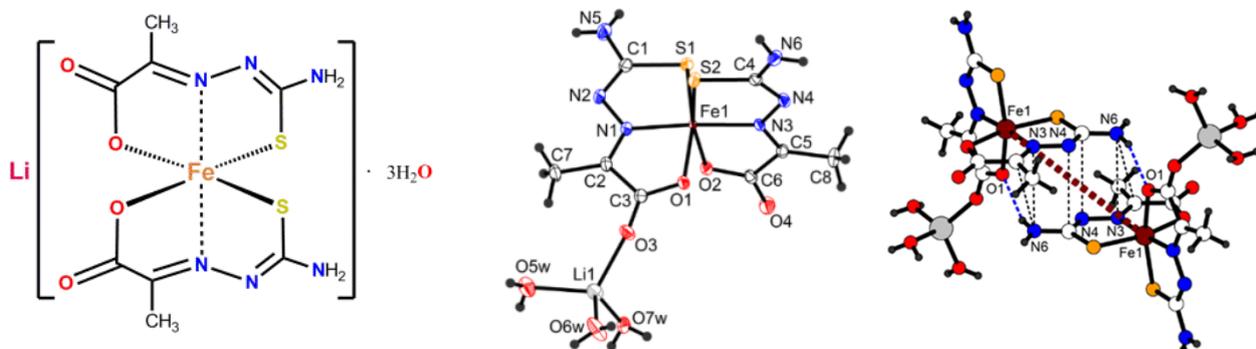
М.А. Благоев¹, Н.Г. Спицына¹, А.С. Лобач¹, С.З. Симонов², Л.В. Зорина²

¹ ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка

² ИФТТ им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка

В настоящей работе описана кристаллическая структура $\text{Li}[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{thpy})_2]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**) при 150 К. Соль **1** кристаллизуется в триклинной пространственной группе $P\bar{1}$. Асимметричная единица включает один $[\text{Fe}(\text{thpy})_2]^-$ анион, один катион Li^+ и три молекулы воды, все в общих положениях (рис. 1) [1]. Ион Li^+ находится в тетраэдрическом окружении четырех атомов О: трех от молекул сольватной воды и одного от карбоксильной группы лиганда. Анионы $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{thpy})_2]^-$ в структуре **1** собраны в слои, параллельные плоскости bc . Катионы Li^+ и молекулы воды располагаются между этими слоями. Средние длины связей Fe-N, Fe-O и Fe-S составляют 1.911(1), 1.974(4) и 2.227(3) Å, что указывает на низкоспиновое состояние (НС, $S=1/2$) Fe(III). Два анионных комплекса Fe(III) в димере связаны $\pi\cdots\pi$ -взаимодействиями через лиганды thpy^{2-} четырьмя укороченными контактами $\text{C}\cdots\text{N}$ 3.248(2) ($\times 2$) и 3.416(2) ($\times 2$) Å и двумя контактами $\text{N}\cdots\text{N}$ 3.320 (2) ($\times 2$) Å, а также посредством водородных связей $\text{N}\cdots\text{H}\cdots\text{O}_{\text{thpy}}$ (рис. 1). В структуре **1** также имеется протяженная трехмерная сеть водородных связей, стабилизирующих структуру.

Рисунок 1. Схема соли $\text{Li}[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{thpy})_2]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**) (слева), асимметричная



единица в **1** (посередине) и димерное звено в **1** (справа).

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

1. M. A. Blagov, N. G. Spitsyna et al., *Dalton Trans.* 1806, 52 (2023).

С 107 Stimuli-responsive координационные полимеры на основе пентафторпропионатов РЗЭ: синтез, структура, свойства

Д.А. Блинникова¹, Д.М. Цымбаренко²

¹ Факультет наук о материалах МГУ им. М.В. Ломоносова

² Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Соединения, которые, способные изменять своё строение и свойства в ответ на внешнее воздействие (stimuli-responsive materials) представляют большой интерес для науки и технологии в связи с возможным применением в качестве искусственных мышц, молекулярных машин и других умных функциональных материалов. Координационные полимеры на основе перфторкарбоксилатов РЗЭ – материалы, проявляющие фотолюминесцентный отклик на температурное воздействие в связи с изменением структуры.

В ходе работы были синтезированы соединения состава $[\text{Ln}(\text{pfp})_3(\text{H}_2\text{O})_n]$ ($\text{Ln} = \text{Eu} - \text{Lu}$, pfp - пентафторпропионат-анион), в т.ч. смешаннометаллические, изучен процесс дегидратации и сопутствующие этому структурные изменения. Получены соединения $[\text{Sc}(\text{pfp})_3]_\infty$, $[\text{Ln}(\text{pfp})_3]_\infty$ и $[\text{Tb}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{pfp})_3]_\infty$ $x = 0.01-0.1$. Методами рентгеновской дифракции монокристаллов и порошков при переменной температуре исследована кристаллическая структура и структурные изменения соединений. Исследовано влияние структурных изменений по ряду РЗЭ на люминесцентные свойства $[\text{Tb}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{pfp})_3]_\infty$.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 22-73-10089).

С 112 Влияние легирующих элементов на фазовые превращения фуллерена C_{60} при высоких давлениях и температурах

П.А. Борисова^{1}, М.С. Блантер², С.С. Агафонов¹, С.Н. Николаев¹*

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Российский технологический университет-МИРЭА, Москва

Изучение взаимодействия фуллеренов с различными элементами представляет интерес как с точки зрения образования широкого класса новых соединений с необычными свойствами [1], так и с точки зрения структуры композиционных материалов, содержащих фуллерены [2] и разработок прототипов готовых изделий с их участием [3]. В частности, важно изучить влияние различных элементов на фазовые превращения фуллеренов при высоких температурах и давлениях [4], что происходит при синтезе металл-фуллеренов и композиционных металл-матричных композиционных материалов, упрочненных фуллеренами.

В настоящей работе представлены результаты исследования [5,6] кристаллического фуллерена C_{60} с добавками двух групп легирующих элементов – карбидообразующих (В и Al) и не карбидообразующих (Ag) на фазовые превращения фуллеренов C_{60} при давлениях 8 ГПа в температуре 500-900°C. Образцы с содержанием ~7 ат. % легирующего металла/неметалла исследованы (ex-situ) методами дифракции нейтронов (дифрактометр «ДИСК» нейтронного исследовательского комплекса на реакторе ИР-8 в НИЦ «Курчатовский институт») и рентгеновской дифракции, а также проведены измерения вольт-амперных характеристик и определены электрические свойства.

Обнаруженное ранее [5] сильное повышение стабильности кристаллического фуллерена C_{60} при добавлении небольших количеств карбидообразующего металла Al, проявляющееся в сильном (на сотни градусов) повышении температуры превращения фуллерена в разориентированный (аморфный) графит при давлении 8 ГПа, не наблюдается при добавлении не карбидообразующего металла – Ag [5] и карбидообразующего неметалла – В [6]. Показано, что взаимодействие металлов с модификациями углерода существенно зависит от структуры углеродной фазы.

1. M.R. Ceron, V. Maffei, et al., *Inorgan. Chim. Acta* 468 (2017): 16-27.
2. M.E. Turan, *J. Alloys. Comp.* 788 (2019) 352-360.
3. Khoa NH, Tanaka Y, et al., *Solar Energy*. 196 (2020): 582-588.
4. B. Sundqvist, *Phys. Rep.* 909 (2021): 1-73.
5. П.А. Борисова, М.С. Блантер и др. *Известия РАН. Серия Физическая*. 85, 7 (2021): 990-996.
6. V. P. Filonenko, M. S. Blanter, et al., *Materials Letters*. 362 (2024): 136245.

С 108 Сравнительное исследование атомно-электронной структуры координационных узлов в молекулярных комплексах [M(Salen)] (M=Co, Ni, Cu) по данным рентгеновской абсорбционной спектроскопии

*В.А. Гаас¹, П.М. Корусенко^{1,2}, Е.В. Храмов³, О.В. Петрова⁴, А.А. Верещагин¹,
О.В. Левин¹, К.А. Бакина⁴, Р.Н. Скандаков⁴, А.С. Виноградов¹*

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Омский государственный технический университет

³ НИЦ «Курчатовский институт»

⁴ ФИЦ Коми НЦ УрО РАН

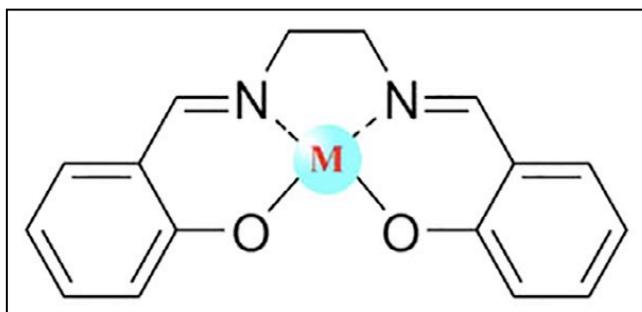


Рис. 1. Схематическое изображение комплексов [M(Salen)]: M = Co, Ni, Cu [1]

и электронном строении комплексов [M(Salen)] необходима для детального понимания процессов, протекающих в полимерах на их основе.

Целью настоящей работы является получение информации о зарядовом состоянии атома металла, а также геометрической структуре и межатомных расстояниях R(M-O), R(M-N) в координационном узле [MO₂N₂] при замене M3d-атома (Co → Ni → Cu) в комплексах [M(Salen)].

Для этого с использованием источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» и оборудования станции «Структурное материаловедение» были выполнены измерения M1s NEXAFS- и EXAFS-спектров в области жесткого рентгеновского излучения с энергиями квантов 7500–10000 эВ с шагом ~0.35 эВ в режиме на пропускание.

Для описания экспериментальных EXAFS-спектров были использованы 3 вида моделей: мономер, M-M-димер, M-O-M-O-димер. В результате сравнительного анализа были определены модели, наиболее подходящие для описания структур комплексов [M(Salen)]. Также было установлено, что межатомные расстояния R(M-O), R(M-N) в координационном центре [MO₂N₂] изменяются при замене атома металла.

1. C. Freire, M. Nunes, et al., Coord. Chem. Rev. 394 (2019).

С 109 Методика определения структуры медных центров Cu-MOR на основе компьютерного моделирования с элементами машинного обучения

*Я.Н. Гладченко-Джевелекис¹, Г.Б. Сухарина¹, А.М. Ермакова¹, Е.Е. Поносова¹,
К.А. Кулаев¹, А.С. Бабаянц¹, В.В. Прядченко¹, Л.А. Авакян¹, Л.А. Бугаев¹*

¹ Южный федеральный университет

Медьсодержащие цеолиты представляют интерес как эффективные катализаторы окисления метана до метанола [1].

В данной работе выполнено определение структуры медных центров Cu-MOR на этапе кислородной активации с использованием XAFS-спектроскопии. В каркасе цеолита могут формироваться медные центры различного типа, поэтому для описания экспериментального спектра необходим учет вкладов от разных моделей. С помощью библиотеки ASE [2] был построен набор структурных моделей медных центров, для которых выполнены расчеты Cu K-XANES спектров с использованием программного комплекса FDMNES [3]. Согласие теоретических и экспериментальных данных достигается путем оптимизации весовых коэффициентов линейной комбинации рассчитанных Cu K-XANES спектров медных центров. Чтобы выделить необходимые Cu K-XANES спектры из имеющегося набора данных и определить весовые коэффициенты их линейной комбинации, был реализован алгоритм оптимизации с элементами машинного обучения на языке Python. После выбора моделей было проведено уточнение их структуры путем оптимизации в Quantum ESPRESSO [4].

В результате были установлены две наиболее вероятные модели локального атомного окружения медных центров в Cu-MOR, которые наряду с Cu₂O обеспечивают наилучшее согласие с экспериментальными данными (R-factor = 0.024).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-22-00438.

1. S.E. Bozbag, E.M.C. Alayon, J, et al., J. Catal. Sci. Technol. 6, 5011-5022 (2016).
2. P. Giannozzi, S. Baroni, et al. J. Phys. Condens. Matter, 21, 395502 (2009).
3. Y. Joly, Phys. Rev. B. 63, 125120 (2001).
4. H. Larsen, J. J. Mortensen, , et al., J. Phys. Condens. Matter. 29, 273002 (2017).

С 110 Вариации распределения элементного состава по толщине плёнок YBaCuO при лазерном осаждении из одной мишени

А.И. Ильин¹, В.К. Егоров¹, А.А. Иванов²

¹ ИИТМ РАН, Черноголовка, Россия

² НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

Среди ВТСП материалов, которые могут быть получены импульсным лазерным осаждением, купраты YBCO являются наиболее значимыми, поскольку охлаждение до температуры жидкого азота достаточно для получения в них сверхпроводящего (СП) состояния с критической плотностью тока выше 10^6 А/см² [1]. Синтез однофазных эпитаксиальных пленок позволил наладить производство СП лент на основе YBCO, используемых в линиях электропередач, высокополевых магнитах и системах магнитной левитации [2,3]. В нашей работе при осаждении из мишени с составом YBa₂Cu₃O_{6.8} пленки толщиной 170-300 нм имели T(R=0) от 77.4 до 87 К. Рентгенофазовый анализ, анализ спектров рентгеновской флуоресценции (РФ) показал присутствие в пленках примесных элементов Zn, Sr, Pd, Ag и Ti в количестве не более 2 ат. %. Исследование спектров РФ и рельефа поверхности методами СЭМ и АСМ позволили установить неоднородность распределения атомов Y, Ba, Cu и примесных элементов по глубине. Избыток в верхнем слое пленок атомов Y и Cu был причиной ухудшения СП свойств в сравнении с пленками с оптимальным соотношением Y и Cu по толщине. Количество атомов примесных элементов возрастало у поверхности пленок при медленном осаждении. Неравномерное распределение элементов было причиной шероховатости пленок и модуляции СП свойств, что является практически важным при создании двумерных ВТСП приборов и устройств для исследования физических явлений и практического применения [1-4].

1. Manabe, T.; Kondo, W.; Yamaguchi, I.; Sohma, M.; Tsuchiya, T.; Tsukada, K.; Mizuta, S. & Kumagai, T., Physica C 417 (2005), 98-102

2. Wang, K.; Dong H.; Huang D.; Shang H.; Xie B.; Zou Q.; Zhang L.; Feng C.; Gu H.; Ding F. Soft. Sci. 2 (2022), 12

3. Goyal, A. (Ed.) Springer US, (2005), 346

4. V. L. Gurtovoi, A. I. Il'in, A.V. Nikulov, Physics Letters A., 2020, v. 384, № 26, C. 126669

С 153 Исследование структурного совершенства синтетических монокристаллов алмаза применяемых в качестве рентгенооптических элементов

А.А. Калоян¹, Ю.Л. Репченко¹, К.М. Подурец¹, Ю.Н. Пальянов², А.Ф.Хохряков²

¹*НИИЦ «Курчатовский институт»*

²*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева*

Применение рентгенооптических устройств на основе монокристаллов алмаза на пучках синхротронного излучения (СИ) имеет ряд преимуществ по сравнению с кремнием. Алмаз обладает меньшим поглощением рентгеновского излучения, меньшим тепловым расширением и большей теплопроводностью. Эффективность устройств зависит от структурного совершенства алмазов, поэтому отработка технологии их роста и методов исследования их структурного совершенства является актуальной задачей. Интерес к таким материалам также связан с созданием источника 4-го поколения «СИЛА».

Кристаллы алмаза были выращены методом температурного градиента с использованием аппарата высокого давления в Институте геологии и минералогии им. В.С. Соболева, там же получены изображения в поляризованном свете и при люминесценции с УФ-возбуждением [1].

Для исследования структурного совершенства применялся метод топографии качания на Курчатовском источнике СИ. Метод позволяет получать изображение кристалла с содержащимися в нем дефектами, измерять локальные кривые качания и производить картирование амплитуды, ширины и положения этих кривых [2]. Полученные данные позволили локализовать структурные дефекты и выявить наиболее совершенные области. Наблюдались дислокации, дефекты упаковки и области с повышенными внутренними напряжениями.

Изображения, полученные в поляризованном свете и с помощью люминесценции хорошо согласуются с рентгеновскими изображениями, что подтверждает эффективность методов, выбранных для экспресса анализа полученных алмазных пластинок.

1. Пальянов и др., 2010; Хохряков и др., 2011
2. А. А. Kaloyan, К. М. Podurets, et al., Cryst. Res. Technol., 53, 7 (2018)

С 113 Мезоструктура высокопористого кремнезема, полученного путем пиролиза силикатно-полимерных композитов

Г.П. Копица³, С.Ю. Котцов^{1,2}, Х.Е. Еров¹, Ю.Е. Горшкова⁴, К.Б. Устинович²,
Н.П. Симоненко², А.Е. Баранчиков², В.К. Иванов²

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

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

³ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

⁴ Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М. Франка, Объединенный Институт
Ядерных Исследований, Дубна

Высокопористые оксидные материалы привлекают большое внимание благодаря широкому спектру их практического применения в качестве гетерогенных катализаторов, сорбентов и т.д. Наиболее распространенные способы получения таких материалов основаны на подходах мягкой химии, включая различные альтернативы золь-гель синтеза. В настоящей работе предложен новый подход к синтезу высокопористого кремнезема, который основан на простой термической обработке кремнеземной матрицы с порами, заполненными органическим полимером. Также, для сравнения, были получены эталонные образцы кремнеземных ксерогеля и аэрогеля.

Структура полученных образцов была исследована методами: РФА, РЭМ, низкотемпературной адсорбции азота и МУРН. Установлено, что все образцы рентгеноаморфны и обладают высокопористой структурой. Анализ данных МУРН показал, что аэрогель и пирогель обладают схожей двухуровневой структурой и состоят из первичных сферических неоднородностей с размерами $R_1 \approx 26$ и 29 \AA , соответственно, из которых формируются объемно-фрактальные кластеры с размерностями $D_{V2} = 2.78$ и 2.59 и верхней границей самоподобия $R_2 \approx 155$ и 140 \AA , соответственно. В тоже время, ксерогель состоит из крупномасштабных агрегатов, обладающих развитой фрактальной поверхностью ($D_S = 2.78$) и содержащих в себе щелевидные поры толщиной $T \approx 9 \text{ \AA}$, шириной $W \approx 30 \text{ \AA}$ и длиной $L \approx 80 \text{ \AA}$.

Таким образом, несмотря на то, что пористая структура в пирогелях сохраняется чуть хуже, чем в аэрогелях, пирогелевые материалы обладают многообещающим потенциалом, поскольку для их получения не требуется дорогостоящая система сверхкритической сушки, и, в принципе, любая гелевая матрица, способная выдерживать нагрев до температуры горения полимера, может быть преобразована в высокопористый материал путем окислительного отжига любого полимера, заполняющего его поры и способного к полному сгоранию.

С 114 Локальная структура комплексов уранил-катиона, сорбированного на глинистых минералах

А.Д. Крот¹, Е.В. Тарарушкин¹, А.Л. Тригуб², И.Э. Власова^{2, 1}

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова

² НИЦ «Курчатовский институт»

Глинистые минералы являются широко распространенным в природе материалом и одним из компонентов инженерных барьеров безопасности при захоронении радиоактивных отходов. Поэтому особенности взаимодействия радионуклидов с глинистыми минералами является актуальным предметом исследования в области радиоактивности окружающей среды. Целью данной работы являлось установление физико-химических форм урана при адсорбции на поверхности глинистых минералов. Для достижения цели использовалась комбинация высокочувствительного элемент-селективного метода определения локального окружения атома урана – спектроскопии рентгеновского поглощения в области протяженной тонкой структуры (EXAFS), и молекулярной динамики на основе теории функционала плотности. Основываясь на атомных траекториях, полученных для набора наиболее энергетически выгодных комплексов уранил-катиона (UO_2^{2+}) на поверхности глинистого минерала, были получены радиальные функции распределения атомов ближайшего окружения урана. Расчетные данные показали хорошее соответствие параметрам, полученным при подгонке экспериментальных спектров. Непосредственное сравнение расчетных EXAFS спектров для набора моделей с экспериментальными данными показало, что в условиях эксперимента преобладающим комплексом уранил-катиона является бидентатный комплекс на (110) поверхности глинистого минерала, в котором уранил-катион связан с октаэдром AlO_6 и апикальным атомом кислорода кремниевого октаэдра SiO_4 (Рисунок 1). Полученные данные имеют большое значение для фундаментального понимания структуры комплексов транс-диоксо-катионов актинидов при адсорбции на глинистых минералах на атомарном уровне.

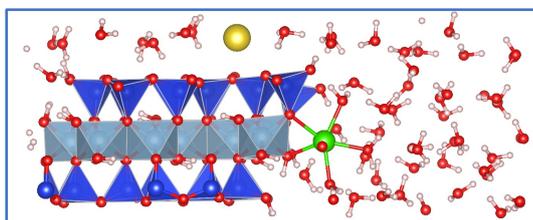


Рисунок 1. Преобладающий комплекс уранил-катиона при адсорбции на глинистом минерале. Зеленый – уран, красный – кислород, синий – кремний, голубой – алюминий, желтый – натрий, белый – водород.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 19-73-20051.

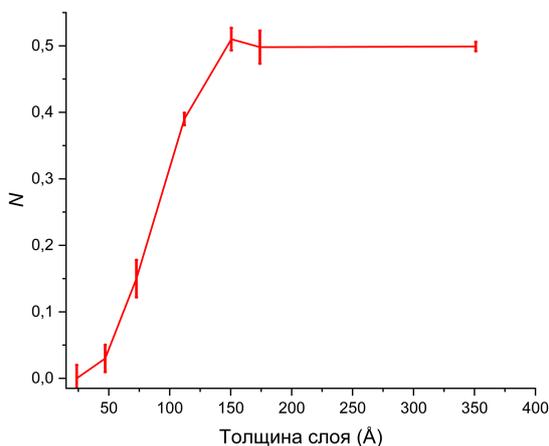
С 115 Влияние кристаллической структуры тонких слоёв гидридов гадолиния в периодических системах Fe/GdH_x на их магнитные свойства

И.А. Лихачев¹, И.А. Субботин¹, Е.А. Кравцов², Д.И. Девятериков², Э.М. Пашаев¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Уральский федеральный университет, Екатеринбург

Периодические системы Fe/Gd, выращенные методом магнетронного напыления были подвергнуты процессу наводороживания при температуре подложки 100°C и давлении водорода до 2.6 атм. в течение 5 часов. В результате в слоях редкоземельного материала образовывались два вида гидридов гадолиния: дигидрид GdH₂, имеющий кубическую кристаллическую решётку, и тригидрид гадолиния GdH₃, имеющий гексагональную кристаллическую решётку. Объемный GdH₂ является магнитным полупроводником с температурой Нееля T=20 К, а GdH₃ — немагнитным диэлектриком.



В результате магнитометрических измерений данных объектах вместо ожидаемой системы невзаимодействующих между собой магнитных слоёв Fe, разделённых немагнитными прослойками гидридов гадолиния, при температурах ниже 200 К наблюдалось межслойное магнитное обменное взаимодействие слоёв Fe через магнитные прослойки в слоях, содержащих гадолиний.

Рентгенодифракционные исследования серии подобных образцов с толщинами слоёв гидридов гадолиния от 10 Å до 350 Å (при постоянной толщине слоя Fe) показали, что соотношение кристаллических фаз GdH₂ и GdH₃ (N) изменяется с увеличением толщины гидрированного слоя с выходом на постоянную величину при толщинах выше 150 Å (см. рис.).

Наличие размерного эффекта изменения относительного содержания магнитной и немагнитной кристаллических фаз в слоях гидридизированного гадолиния позволяет предложить его для объяснения особенностей магнитного межслойного взаимодействия между слоями Fe в многослойной периодической гетерокомпозиции.

С 116 Пленочные гибридные материалы на основе наноллистов оксида графена и спин-переменной соли $[\text{Et}_4\text{N}][\text{Fe}^{\text{III}}(\text{5Cl-thsa})_2]$

*А.С. Лобач,¹ Н.Г. Спицына,¹ М.А. Благов,¹ А.И. Дмитриев,¹ Н. Н. Дремова,¹
М.В. Жидков,¹ С.В. Симонов²*

¹*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН*

²*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН*

Гибридные материалы на основе двумерных (2D) слоистых наноматериалов с внедренными молекулами-интеркалантами представляют интерес в качестве материалов для электроники, оптоэлектроники и спинтроники. Комбинация переключаемого магнетизма спин-переменных (СП) комплексов с электропроводностью графена в слоистой пленочной структуре гибридного материала может привести к появлению новых магнито-электронных эффектов [1]. В настоящей работе мы описываем разработку метода синтеза по типу «снизу-вверх» пленочных гибридных материалов ОГ-1 формируемых в процессе самосборки пленки материала при фильтрации стабильной гомогенной суспензии наноллистов ОГ и растворенной СП соли $[\text{Et}_4\text{N}][\text{Fe}^{\text{III}}(\text{5Cl-thsa})_2]$ (1) [2] в ацетонитриле, исследование их структуры и свойств [3].

Полученные пленки гибридного материала ОГ-1 сохраняют СП свойства (1) и при этом изменяются параметры спинового перехода: увеличивается его резкость и полнота (до 100%), а температура полуперехода смещается на 20 К в область комнатных температур. Пленки гибридного материала ОГ-1 были охарактеризованы методами СЭМ и ЭДА, РФЭС, конфокальной лазерной сканирующей микроскопии, ИК-, КР-спектроскопии, РФА и изучены магнитные свойства, а также проведены квантово-химические расчеты (функционалы wB97XD и V3LYP*) [3].

Эти результаты представляют собой новый тренд в получении ГМ на основе 2D графеновых материалов и Fe(III) спин-переменных соединений.

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

1. A. K. Geim, Science, 324, 1530 (2009).
2. N. G. Spitsyna, M.A. Blagov, V.A. Lazarenko, et al., Inorg. Chem., 60, 17462 (2021).
3. N.G. Spitsyna, A.C. Lobach, M.A. Blagov, et al., Dalton Trans., 53, 13478 (2024).

С 117 Изменение объема решетки легированных интерметаллических соединений при взаимодействии с водородом

С.А. Лушников¹, Т.В. Филиппова¹, С.С. Агафонов²

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова

² НИЦ «Курчатовский Институт»

В водородной энергетике для безопасного и компактного хранения водорода можно использовать гидриды на основе интерметаллических соединений (ИМС) и сплавов, которые содержат водород в химически связанном виде [1]. Наиболее популярными среди таких интерметаллидов являются соединения состава RT_5 с R-редкоземельными металлами, AB_2 со структурой фаз Лавеса и сплавы с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой. Гидридные фазы на основе первых двух групп интерметаллидов способны обратимо абсорбировать около 1.5-2.0 массовых процентов водорода [2, 3]. При формировании гидридов на основе сплавов с ОЦК решеткой, происходит ее переход в гранецентрированную кубическую (ГЦК) со структурой CaF_2 , а количество водорода возрастает до 2 Н/М (два атома водорода на один атом металла). В работах [4, 5] было установлено, что в гидридах на основе *d* и *f*-металлов и некоторых интерметаллидов, величина изменения объема их решетки на один внедренный атом водорода в зависимости от типа металлических атомов может варьировать в пределах до 30 %. В настоящей работе с помощью методов рентгеновской дифракции изучали объемные эффекты при гидридообразовании различных фаз. Например, у гидридов на основе $LaNi_5$, легированного разными *d* и *f*-металлами, наблюдается различное расширение кристаллической решетки и изменение морфологии образцов гидридов - от мелкодисперсного порошка до охрупченных водородом кусков сплава. При гидрировании легированных *d*-металлами интерметаллидов AB_2 со структурой фаз Лавеса и сплавов с ОЦК решеткой, происходит трансформация решетки в ГЦК со структурой типа CaF_2 . Полученные гидридные фазы являются аналогичными метастабильным гидридам с ГЦК-решеткой, которые представлены в работах [6, 7].

1. M. Latroche, A. Percheron-Guegan, J. Alloys Compd. 356-357, 461 (2003).
2. J. Huot, E. Akiba, H. Iba, J. Alloys Compd. 228, 181 (1995).
3. J.F. Lakner, F.S. Uribe, S.A. Steward, J. Less. Comm. Met. 72, 82 (1980).
4. В.А. Соменков, А.В. Иродова, С.Ш. Шильштейн, ФММ. 68, 132 (1988).
5. В.А. Соменков, С.Ш. Шильштейн, ФММ. 86, 114 (1998).
6. S.N. Klyamkin, A. Yu. Kovriga, V.N. Verbetsky, Int. J. Hydrogen Energy. 24, 149 (1999).
7. А.Л. Шилов, Л.Н. Падурец, Ж.В. Доброхотова, Н.Т. Кузнецов. Ж. Неорг. Химии. 45, №9, 1533 (2000).

С 111 Киральный спиновый ближний порядок и особенности малоуглового рассеяния нейтронов в геликоидальных ферромагнетиках с нецентросимметричной кубической структурой (на примере MnSi)

И.Д. Манько, А.А. Повзнер, Т.А. Ноговицына

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Наблюдаемая при малоугловом рассеянии поляризованных нейтронов в киральных ферромагнетиках с нецентросимметричной кубической кристаллической структурой картина спинового ближнего порядка рассматривается на примере фазовых переходов MnSi. При этом учитывается, что при фазовом переходе в MnSi наблюдается топологический эффект Холла (ТНЕ) [1], указывающий на возникновение геометрической фазы, связанной с кривизной Берри на поверхности Ферми [2]. Показано, что наблюдаемые при рассеянии поляризованных нейтронов [3] флуктуации спиновых спиралей опосредованы киральным ферромагнитным ближним порядком, возникающим вследствие смены знака параметра межмодового взаимодействия в функционале Гинзбурга-Ландау. При этом установленная картина спинового ближнего порядка согласуется с наблюдаемыми особенностями аномалии температурной зависимости молярной теплоемкости при постоянном давлении (C_p) и коэффициента теплового расширения [4]. Обсуждаются полученные на нейтронном эксперименте данные о фракции киральности η , показывающей соотношение вкладов, связанных с антисимметричным и симметричным обменными взаимодействиями [5], со следующими особенностями: параметр η сохраняется неизменным вблизи температуры фазового перехода, затем слабо спадает при дальнейшем росте температуры. Рассматриваемая на нейтронном эксперименте температурная область сопоставима температурным областям зависимости C_p , ТНЕ. Получено, что при повышении температуры киральное парамагнитное состояние исчезает вследствие энергетического сдвига химического потенциала из области кривизны Берри. При этом исчезает и аномальное «плечо» на температурной зависимости C_p , а также топологический вклад в эффект Холла.

1. A. Neubauer, C. Pfleiderer et al., Phys. Rev. Lett. 102, 186602 (2009).
2. M.A. Wilde, M. Dödenhöft et al., Nature 594, 374 (2021).
3. M. Janoschek, M. Garst et al., Phys. Rev. B 87, 134407 (2013).
4. С.М. Стишов, А.Е. Петрова. УФН 187, 12, 1365 (2017).
5. C. Pappas, E. Lelièvre-Berna et al., Phys. Rev. Lett. 102, 197202 (2009).

С 119 Использование методов рентгеновской рефлектометрии и дифракции в скользящей геометрии для исследования тонких пленок допированных наночастицами металлов платиновой группы

В.А. Матвеев¹, Н.Н. Губанова¹, О.А. Шилова²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ-ИХС

Рентгеновская рефлектометрия (XRR) и дифракция в скользящей геометрии (GiXRD) являются неразрушающими методами, позволяющими получать информацию о структуре тонких пленок и многослойных систем, содержащих наночастицы. В данной работе представлены результаты исследования структуры тонких кремнеземных пленок, допированных наночастицами Pt и Pd данными методами. Пленки, содержащие металлические наночастицы, наносились методом центрифугирования (spin-coating) из золь. Золь синтезировался из тетраэтоксисилана $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$, его объемная доля составляла 3%. Металлические наночастицы получали из солей, гексахлорплатиновой кислоты $\text{H}_2\text{PtCl}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ и хлорида палладия PdCl_2 . В качестве растворителей при изготовлении золь использовали смесь спиртов, этанола и бутанола-1. После нанесения пленки термофиксировались в течение 30 мин при температуре 130 или 250°C.

Исследование образцов методом рентгеновской рефлектометрии показало, что нанесение золь «spin-coating» методом позволяет получать достаточно гладкие пленки толщиной от 20 до 42 нм. При этом в пленках, содержащих наночастицы Pt, наблюдалось наличие градиента электронной плотности по глубине, с максимумом вблизи верхней границы, что свидетельствует о том, что наночастицы Pt преимущественно концентрируются вблизи поверхности пленок. Это было подтверждено результатами метода обратного резерфордовского рассеяния [1]. Также, из данных рефлектометрии, была получена оценка пористости пленок. Пленки допированные наночастицами Pt и Pt/Pd имели вдвое большую величину пористости, чем кремнеземные пленки допированные Pd.

Данные GiXRD позволили установить, что в пленках допированных Pt размер наночастиц увеличивается с ростом содержания металла в исходном золе. В пленках с наночастицами Pd и Pt/Pd такой корреляции не наблюдается [2]. При этом было установлено, что наночастицы Pt/Pd представляют собой кристаллиты с единой гцк решеткой [3].

1. О. А. Шилова, Н. Н. Губанова, и др. Физика и химия стекла. 42, 1 (2016).
2. N. Gubanova, V. Matveev, et al., Physchem. 3, 2 (2023)
3. N. N. Gubanova, V. A. Matveev, O. A. Shilova, J. of Sol-Gel Sci. and Tech. 92, 4 (2019)

С 120 Особенности эффекта Яна-Теллера в двухслойном манганите лантана $\text{La}_{1.4}\text{Sr}_{1.6}(\text{Mn}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{O}_7$

А.Н. Матвеева¹, К.Ю. Терентьев¹, А.А. Быков¹, В.А. Орлова²

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина

² Акционерное общество «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина», Санкт-Петербург

Двухслойные манганиты являются хорошо изученными и интересными с точки зрения применения в техники материалами. В таких соединениях присутствует колоссальное магнетосопротивление, что открывает возможности применения в новых технологиях, таких как магнитная память постоянного доступа и спиновая электроника.

Исследуемые здесь монокристаллы состава $\text{La}_{1.4}\text{Sr}_{1.6}(\text{Mn}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{O}_7$ были выращены методом оптической зоной плавки. Образцы монокристаллов имеют неправильную форму и размеры приблизительно $10 \times 4 \times 3$ мм³.

Был проведен элементный анализ и сравнение с рассчитанными значениями массовых долей каждого элемента. По результатам элементного анализа состав соответствует заложенному стехиометрическим соотношением компонентов.

С помощью рентгеновского дифрактометра была получена кристаллическая структура обоих соединений, пространственная группа $I4/mmm$. Кристаллическая структура нового соединения добавлена в COD № 3000566. По результатам уточнения кристаллической структуры и сравнения параметров чистого соединения с допированным Со, наблюдается существенное увеличение параметра вдоль оси c при допировании ($c = 20.324$ Å, до $c = 20.362$ Å). Стоит отметить, что атомный радиус кобальта меньше атомного радиуса марганца, но частичное замещение приводит к искажению (вытягиванию вдоль оси c) кислородных октаэдров. Изменения параметров октаэдров, зафиксированные с помощью рентгеновской дифракции при комнатной температуре, говорят о выраженном эффекте Яна-Теллера.

Спектры комбинационного рассеяния света для соединения $\text{La}_{1.4}\text{Sr}_{1.6}(\text{Mn}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{O}_7$ в области от 500 до 700 см⁻¹ можно разложить на два пика. Высокочастотные колебательные моды 558 и 661 см⁻¹ отвечают внутренним деформациям октаэдров MnO_6 и соответствуют переходу системы в состояние зарядового упорядочения. Локализация носителей заряда и разделение позиций Mn^{3+} и Mn^{4+} приводит к существенному искажению кислородных октаэдров. Иными словами, эти колебания активируются эффектом Яна-Теллера, что противоречит идее химического давления.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-22-00236.

С 121 Магнитное упорядочение и киральность в мультиферроике DyMnO₃

А.Н. Матвеева¹, И.А.Зобкало¹

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

Соединения из семейства орторомбических манганитов RMnO₃ (R = Dy) считаются типичными представителями мультиферроиков II типа. Описание микроскопических механизмов, ответственных за магнитоэлектричество в мультиферроидных материалах в целом и в серии RMnO₃ в частности является важным шагом к созданию функциональных материалов с предсказуемыми свойствами.

Структурные и магнитные свойства монокристаллов DyMnO₃ были исследованы методом дифракции нейтронов с целью изучения особенностей 3d-4f взаимодействий в этом соединении. Точный магнитный порядок и его детальная температурная эволюция были определены с помощью монокристаллической дифракции нейтронов. Для измерений мы использовали качественный монокристалл DyMnO₃. Он имеет форму куба с приблизительными размерами 3 * 3 * 3 мм³.

Магнитная структура, описывающая магнитные моменты на марганцевой подсистеме ниже 19К эллиптическая циклоида, с понижением температуры эллиптичность магнитной структуры Mn значительно уменьшается, создавая почти круглую циклоиду. Точные значения упорядоченных магнитных моментов в положениях Dy и Mn соответственно были получены в DyMnO₃ в результате уточнения магнитных при температурах выше и ниже упорядочения Dy. Интересно, что магнитная подсистема Dy имеет два вектора распространения одновременно при низкой температуре 2.5 К: $k_{Dy1} = (0 \ 0.5 \ 0)$ и $k_{Dy2} = (0 \ \pi \ 0)$.

Результаты показывают сложное взаимодействие между магнитными подрешетками переходных металлов и редкоземельных элементов, приводящее к так называемым “Mn-контролируемым” и “Dy-контролируемым” магнитным состояниям. Сильное и сложное взаимодействие 3d-4f приводит к необычной очень медленной релаксации магнитной структуры. Наши наблюдения являются прямым доказательством существования активного взаимодействия между двумя магнитными подрешетками, которое следует учитывать для описания механизма мультиферроичности в DyMnO₃.

1. A.N. Matveeva, I.A. Zobkalo, et al., J. Mag. Mag. Mater. vol. 569 pp. 170415 (2023)

С 122 Исследование влияния отрицательных температур на структуру модифицированных SiO₂ мембран Nafion® методом малоуглового рентгеновского рассеяния

Р.М. Меншарпов¹, А.В. Бакиров^{1,2}, А.С. Семкина^{1,2}, Н.А. Иванова¹, Д.Д. Спасов^{1,3},
В.Н. Фатеев¹

¹ НИЦ «Курчатовский Институт»

² Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН

³ Национальный исследовательский университет "МЭИ"

Расширение допустимых условий эксплуатации электрохимических устройств с протонообменной мембраной (ПОМ) является актуальной задачей, требующей изучения процессов деградации компонентов устройств и адаптации материалов к нестандартным условиям, в частности к отрицательным температурам. Вопрос о формировании льда в объеме водных доменов ПОМ при отрицательных температурах на сегодняшний день остается нерешенным, однако десорбция воды в процессе замораживания устройства с последующим образованием льда на поверхности мембраны приводит к разрушению и отслаиванию каталитических слоев [1]. Для стабилизации воды в мембране проводят модифицирование ПОМ гидрофильными соединениями, в частности SiO₂ [2].

В рамках данной работы методом золь-гель было проведено *in situ* объемное модифицирование мембраны марки Nafion® 212, получены образцы с массовым содержанием SiO₂ – 1, 3 и 5 мас. %. Для исследования внутренней структуры ПОМ использовали метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Для определения влияния отрицательных температур увлажненные в воде образцы исходной и модифицированных мембран подвергали циклам замораживания-оттаивания (З-О). Кривые МУРР для образцов ПОМ регистрировали до и после 30 и 90 циклов З-О.

В результате обработки кривых МУРР с использованием модели сферических доменов получено, что модифицирование приводит к уменьшению среднего размера немодифицированных доменов с ростом концентрации SiO₂ в результате перераспределения воды в междоменные каналы. Под действием циклов З-О в исходной ПОМ происходило увеличение количества малых доменов. Для образцов ПОМ с 3 и 5 мас. % SiO₂ напротив наблюдали увеличение среднего размера каналов, что может указывать на стабилизацию воды в ПОМ при отрицательных температурах.

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

1. A. Kusoglu, Ahmet, A. Z. Weber. Chem. Rev. 117, 3 (2017).
2. R. M. Mensharapov, N. A. Ivanova, et al. Polymers. 14, 20 (2022).

С 123 Исследование концевых соединителей токонесущих элементов на основе ВТСП с помощью неразрушающих методов нейтронной визуализации

*М.М. Мурашев, В.В. Гурьев, Д.Н. Диев, А.В. Наумов, А.В. Поляков,
М.Н. Макаренко, С.В. Шавкин*

НИИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Развитие сверхпроводниковых технологий играет ключевую роль во многих высокотехнологичных областях, таких как создание установок физики высоких энергий и управляемого термоядерного синтеза. Одним из важнейших аспектов является создание надежных токовых контактов (концевых соединителей) при подключении токонесущих элементов (ТНЭ) к внешнему питающему устройству. В данной работе представлены результаты исследований концевых соединителей ТНЭ на основе композитных ВТСП лент с применением методов нейтронной визуализации. Эксперименты проводились на станции нейтронной визуализации ДРАКОН и стенде нейтронной томографии ПОНИ, расположенных на базе исследовательского реактора ИР-8.

Полученные данные позволили получить детальное представление о внутренней структуре и распределении материалов с субмиллиметровым разрешением. Продемонстрировано качественное согласие с данными прямого измерения контактного сопротивления отдельных ВТСП лент, что подтверждает эффективность метода нейтронной визуализации для оценки качества токовых контактов.

Полученные результаты будут использованы при дальнейшей разработке токонесущих элементов для различных магнитных систем, включая установки управляемого термоядерного синтеза.

С 124 Получение, состав и особенности строения монокристаллов металлоорганического полимера CuBTC типа HKUST-1

А.Г. Муштаков¹, В.А. Лазаренко², И.А. Каурова¹, Г.М. Кузьмичева¹,
Е.Б. Маркова³

¹МИРЭА-Российский технологический университет

²НИЦ «Курчатовский институт»

³Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы

Металлоорганические каркасы (MOF, Metal-Organic Framework) как класс новых функциональных материалов, привлекают все большее внимание исследователей, благодаря практически неограниченным возможностям структурного дизайна и широкому спектру функциональных свойств. Среди большого числа композиций выделяются MOF CuBTC ($\text{Cu}^{2+}_3(\text{BTC})^{3-}_2$; $(\text{BTC})^{3-} \equiv \text{C}_6\text{H}_3(\text{COO})^{3-}$) типа HKUST-1 (MOF-199; пр. гр. $Fm\bar{3}m$, $Z = 16$) с большим параметром кубической ячейки, существенным внекаркасным объемом, в котором могут находиться молекулы воды, растворителя и пр., и перманентной пористостью. В работе [1] на основании расчетов теоретических дифрактограмм по структурным данным CuBTC показано, как составы каркаса и внекаркасного пространства оказывают влияние на дифракционную картину поликристаллических объектов, которая не всегда однозначна и очень редко совпадает с экспериментальной.

Цель работы - получение монокристаллических образцов CuBTC и определение их кристаллической структуры.

Кристаллы CuBTC октаэдрической формы (размер ребра до ~117 мкм) выпали в осадок в результате сольвотермического синтеза ($t = 80^\circ\text{C}$, $\tau = 22$ ч) из $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и $\text{C}_6\text{H}_3(\text{COOH})_3$, растворенных в смеси 9 мл диметилформамида (ДМФА; $(\text{CH}_3)_2\text{NCHO}$), 9 мл $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, 9 мл ледяной уксусной кислоты (CH_3COOH) и 9 мл дистиллированной воды.

Анализ дифракционной картины и параметры ячейки измельченных в порошок кристаллов совместно с литературными данными и проведенным уточнением кристаллической структуры монокристалла CuBTC (эксперимент выполнен на станции Белок/РСА КИСИ Курчатов) по составам каркаса ($[\text{Cu}_3(\text{BTC})_2(\text{H}_2\text{O}_w)_3] \rightarrow [\text{Cu}_3(\text{BTC})_2(\text{H}_2\text{O}_w)_3(\text{ДМФА})_3]$) и с учетом возможного нахождения молекул H_2O и ДМФА вне каркаса позволили предложить состав полученных монокристаллов. Обсуждается влияние условий получения монокристаллов на формирование MOF CuBTC типа HKUST-1.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Проект 075-15-2021-1362 (продолжение).

I.A.A. Gainanova, G. M. Kuz'micheva, et al., J. Phys. Chem. 127, 37 (2023)

С 125 Рост эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Mn_xTe$ (Ga) на монокристаллах $PbTe$

А.М. Назаров, Р.М. Садыгов

Институт физики им. академика Г.М.Абдуллаева, Баку, Азербайджан

Представлены результаты исследования особенностей роста эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Mn_xTe$ различных химических составов ($x=0,01\div 0,05$) выращенных на подложках $PbTe$ с ориентацией (001) методом конденсации молекулярных пучков в вакууме 10^{-4} Па.

В качестве источника использовались заранее синтезированные легированные галлием ($N_{Ga}\leq 0,8$ ат.%), твердые растворы $Pb_{1-x}Mn_xTe$ с соответствующим химическим составом.

Структура и морфология поверхности пленок контролировалась электронографическим, рентгенодифрактометрическим и электронномикроскопическим методами.

Установлено, что эпитаксиальные пленки $Pb_{1-x}Mn_xTe$ с ГЦК решеткой $a=6,10\div 6,05$ Å на подложках $PbTe$ растут плоскостью (100) повторяя ориентацию подложки.

Показано, что на поверхности полученных пленок наблюдаются черные скопления, свидетельствующие о наличии включений второй фазы, количество которых растет с уменьшением скорости конденсации и увеличением температуры подложки.

Пленки с более совершенной кристаллической структурой, толщиной $0,3\div 0,5$ мкм и с чистой гладкой поверхностью, были получены с применением компенсирующего источника паров Te в процессе роста. При этом температура подложки ($T_{п}$), температура компенсирующего источника ($T_{к.ист.}$) и скорость конденсации (v_k) составляли: $T_{п}=573\div 623$ К; $T_{к.ист.}=380$ К; $v_k=7\div 8$ Å/сек.

С 126 Процесс фазообразования в тонких пленках AgCuS

А.М. Назаров¹, Ю.И. Алыев², Г.И. Багирова³

¹*Институт физики им. академика Г.М.Абдуллаева, Баку, Азербайджан*

²*Азербайджанский государственный педагогический университет, Баку, Азербайджан*

³*Университет Азербайджан, Баку, Азербайджан*

Соединение AgCuS выделяется среди полупроводниковых материалов интересными физическими свойствами. Поэтому оно широко изучается в последнее время. Несмотря на то, что структура, фазовые переходы, тепловые и электрические свойства этого соединения изучены достаточно хорошо, его тонкие пленки не исследованы [1,2]. В последнее время тонкие пленки все чаще используются для получения преобразователей меньшего объема. Поэтому необходимо изучать тонкие слои функциональных материалов. Для этого были получены тонкие пленки AgCuS и изучены процессы фазообразования в них.

В работе изучались тонкие пленки AgCuS, полученные на стеклянной подложке. Исходные компоненты в необходимом количестве взвешивали на аналитических весах, заливали в кварцевые ампулы и проводили синтез поликристалла. Синтезированный поликристалл использовался в качестве источника испарения для получения эпитаксиальных слоев. Эпитаксиальные слои получали методом молекулярно-лучевой конденсации на установке УВН-71П-3 в вакууме, установленном на $(1-2) \cdot 10^{-4}$ Па. В процессе роста эпитаксиальных слоев использовался дополнительный компенсирующий источник паров халькогена.

Толщину полученного тонкого слоя определяли весовым методом. Установлено, что получен тонкий слой AgCuS толщиной $h=500$ нм. Процесс фазообразования в этом слое изучался методом рентгеновской дифракции. Спектр рентгеновской дифракции, полученный при комнатной температуре и нормальных условиях, сравнивали со спектром рентгеновской дифракции, полученным для соединения AgCuS. Установлено, что, несмотря на дополнительный фон, была получена картина исходного вещества. Таким образом, в полученном спектре наблюдалось 6 основных максимумов в диапазоне углов дифракции $5^\circ \leq 2\theta \leq 60^\circ$. В ходе анализа этих максимумов было установлено, что полученная структура соответствует ромбической симметрии с пространственной группой $Cmcm$. Установлено, что система Ag–Cu–S сформировалась на стеклянной подложке толщиной $h=500$ нм, характерной для соединения AgCuS.

1. Y. I. Aliyev, Y. G. Asadov, et al., Mod. Phys. Lett. B. 34, 2050066 (2020).

2. Y. I. Aliyev, P. R. Khalilzade, et al., Int. J. Mod. Phys. B. 33, 1950339 (2019).

С 128 Исследования гадолиния методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронов

В.Г. Назин

НИИ “Курчатовский институт” Москва

Методом спектроскопии характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ) исследованы особенности электронной структуры металлического гадолиния вблизи Gd4d порога поглощения при энергиях E_p первичного пучка электронов от 200 эВ до 1500 эВ. При возбуждении фотоном или электроном исходного электронного состояния атома Gd $4d^{10}4f^7$ образуется 1077 возможных возбужденных состояний [1]. В спектре фотонного поглощения проявляются те переходы, которые соответствуют правилам оптического отбора (изменения полного орбитального момента атома $\Delta J=0; +1$ и -1). В случае СХПЭЭ при больших E_p спектры энергетических потерь вблизи Gd4d резонанса близки к спектрам оптического поглощения и в спектре потерь энергии наблюдаются большой пик поглощения при энергии потерь (ΔE) 149,0 эВ, менее интенсивный широкий пик при $\Delta E=164$ эВ и несколько малых предпиков при $\Delta E=138,9$ эВ, $\Delta E=140,6$ эВ и $\Delta E=142,4$ эВ, в согласии с данными работы [2]. А при E_p менее 400 эВ спектры значительно видоизменяются, появляются новые особенности, меняются соотношения интенсивностей различных участков спектра. Особенно сильно меняется спектр в области предпиков. Так, при $E_p=200$ эВ количество предпиков увеличилось, они стали более интенсивными и наблюдаются при $\Delta E=136,7$ эВ, $\Delta E=137,4$ эВ, $\Delta E=138,6$ эВ, $\Delta E=139,6$ эВ, $\Delta E=140,3$ эВ, $\Delta E=141,4$ эВ и $\Delta E=143,7$ эВ. Доминирующим становится предпик при $\Delta E=138,6$ эВ. Следовательно, при малых E_p не выполняются правила дипольного оптического отбора. Это может быть следствием того, что переданный в процессе возбуждения импульс слишком велик, чтобы выполнялись правила дипольного приближения. Кроме того, так как вторичный (рассеянный) электрон имеет малую скорость, то при взаимодействии с возбужденным состоянием Gd4d он может изменить импульс и спин конечного состояния.

1. Frank de Groot and Akio Kotani. Core Level Spectroscopy Solids. В книге «Advances in Condensed Matter Science». Edited by D.D. Sarma, G. Kotliar and Y. Tokura. CRC Press, (2008) Volume 6

2. F.P. Netzer, G. Strasser, et al., Surface Science. V.152–153, Part 2, (1985), Pages 757-764

С 129 Создание и исследование лазерно-индуцированных покрытий диоксида титана методами электронной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии для задач фотокатализа

Е.Ю. Понкратова¹, Д.А. Зуев¹

¹ Университет ИТМО

Диоксид титана (TiO_2) благодаря химической стабильности, нетоксичности и высокой фотоакаталитической активности является идеальным кандидатом для таких применений, как генерация водородного топлива, утилизация парниковых газов, устранение загрязняющих веществ из окружающей среды и т.д. Одним из ключевых параметров структур на основе TiO_2 , определяющих их фотокаталитические свойства, является фазовый состав. TiO_2 имеет три хорошо известных полиморфных модификации: анатаз и рутил и менее распространенный брукит. Известно, что анатаз обладает наиболее высокой каталитической активностью из-за непрямо́й запрещенной зоны, что обеспечивает более низкую скорость рекомбинации фотоиндуцированных электронно-дырочных пар. Более того, ряд исследований показывает, что смесь фаз анатаз/рутил способна проявлять улучшенные каталитические свойства по сравнению с одиночными фазами благодаря формированию гетероперехода на границе раздела фаз, приводящему к более эффективному разделению зарядов. Стоит отметить, что оптимальное соотношение фаз зависит от каталитической реакции и ее типа. Поэтому значительный интерес представляют методы, способные контролировать фазовый состав.

В данной работе демонстрируется создание покрытий TiO_2 с контролируемым соотношением фаз рутил/анатаз при помощи наносекундного облучения титановой пластины. Для характеристики морфологии и фазового состава применяется сочетание методов сканирующей электронной микроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с высоким разрешением. Исследуется связь между содержанием поверхностной фазы анатаз и фотокаталитической активностью полученных покрытий TiO_2 .

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).

С 130 Период магнитной спирали в шпинели $^{114}\text{Cd}_{0,3}\text{Zn}_{0,7}\text{Cr}_2\text{Se}_4$ под давлением

Р.А. Садыков^{1,2}, В.П. Глазков³, Г.Г. Шабунина⁴

¹Институт ядерных исследований РАН, Москва, Троицк

²Институт физики высоких давлений РАН, Москва, Троицк

³НИЦ Курчатовский институт, Москва

⁴Институт общей и неорганической химии РАН, Москва

Влияние давления на магнитную спиральную структуру (SS) образца $^{114}\text{Cd}_{0,3}\text{Zn}_{0,7}\text{Cr}_2\text{Se}_4$ было измерено на дифрактометре ДИСК с длиной волны $\lambda=2.41$ Å (РНЦ «Курчатовский институт» ИР8, Москва) с использованием камеры поршень-цилиндр и сапфировых наковален-(КВД) в вертикальной и горизонтальной геометриях. Образец синтезирован с изотопом ^{114}Cd , малопоглощающего тепловые нейтроны и нейтронографически исследован ранее [1]. Для выяснения, что магнитная преимущественная ориентация (текстура) и есть основная причина сильного уменьшения интенсивности пика 000+- под давлением в наших нейтронографических измерениях спирали в вертикальной геометрии, проведены измерения нейтронограмм в КВД и с горизонтально расположенными сапфировыми наковальнями [2]. Измерения проводились в шахтном криостате [3] с диаметром шахты для образца 120 мм, что позволяет менять ориентацию КВД с вертикальной к горизонтальной.

Получено, что для горизонтальной геометрии при различных давлениях наблюдается мощный нулевой сателлит 000+-. Определена зависимость периода спирали от давления и получено его уменьшение. Таким образом происходит «сжатие» простой магнитной спирали (SS) под давлением.

Авторы благодарят А.В. Белушкина и П.В. Борисову за помощь в организации нейтронографических работ по заявке № 2128 на ИР8.

1. Р.А. Садыков, П.Л. Грузин, Ф.Ф. Минаков, и др., Письма в ЖЭТФ, том28, вып.9 стр.596- 599, (1978).

2. Глазков В. П., Гончаренко И. Н. //ФТВД. – Т.1– С.56. (1991).

3. Черников, А. Н., Буздавин А. П., Журавлев В.В., и др., Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. №. 11 – С. 29-34 (2010).

С 131 Исследование кислородных вакансий в монокристалле β -Ga₂O₃

*В.А. Спиридонов¹, Д.Ю. Панов¹, А.Ю. Иванов¹, П.А. Богданов¹, Д.А. Бауман¹,
А.Е. Романов¹*

¹ Университет ИТМО

Монокристалл β -Ga₂O₃ представляет собой ультраширокозонный (~4.8 эВ) полупроводник. Одним из главных его преимуществ, по сравнению с другими такими (GaN, SiC, алмаз) материалами является возможность роста монокристаллов жидкофазными методами, такими как метод Чохральского, что делает возможным изготовление подложек из оксида галлия в промышленных масштабах [1]. Исследование кислородных вакансий в бета оксиде галлия представляет огромный интерес, поскольку они влияют на концентрацию носителей заряда [2], а следовательно, на проводимость данного полупроводникового материала. Прямые оценки содержания вакансий, например методами спектроскопии глубоких уровней, затруднены в силу низких значений концентрации вакансий (около 10^{14} - 10^{16} см⁻³ [3]), а также из-за высокого фонового легирования *n*-типа ($n_e \approx 10^{18}$ см⁻³). Однако, возможны косвенные оценки количества вакансий по изменению характеристик материала вследствие отжига в кислородной среде, при котором возникает диффузия и перераспределение вакансий.

В работе представлены результаты экспериментов по отжигу на воздухе объемных кристаллов оксида галлия, выращенных в атмосферах Ar+O₂ и CO₂ при температуре 1400°C. Время отжига составило 5 часов; время выхода на температуру отжига - 3,5 часа; время охлаждения - 20 часов. Отожженные образцы демонстрируют увеличение пропускания в инфракрасной области электромагнитного спектра и уменьшение ширины кривой качания рентгеновской дифракции, что означает уменьшение количества кислородных вакансий в кристаллах. Полная ширина кривой качания на половине максимума для отожженных образцов была практически одинаковой для обеих атмосфер: FWHM_a = 84 угловых секунды для образца, выращенного в атмосфере Ar+O₂, и FWHM_a = 80 угловых секунд для образца, выращенного в атмосфере CO₂, что означает, что после отжига качество образцов стало сопоставимым, несмотря на изначальную разницу.

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант №24-12-00229

1. D. A. Bauman, D. I. Panov, et al. Rev. Adv. Mater. Technol. 4. (3) (2022)
2. Z. Galazka, K. Irscher, et al. Journal of Crystal Growth. 404. (2014)
3. A. Almalki, et al. Materials Today Electronics. 4. (2023)

С 132 Структура и оптические свойства центров серебра, сформированных в PZ стекле до и после обработки ФС лазером

*В.В. Срабионян¹, И.А. Викленко¹, М.П. Ветчинников², А.С. Липатъев²,
А.Л. Бугаев³, Л.А. Авакян¹, Г.Ю. Шахгильдян², В.Н. Сигаев², Л.А. Бугаев¹*

¹ ЮФУ, Ростов-на-Дону

² РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва

³ Институт Пауля Шеррера, Виллиген, Швейцария

Наночастицы (НЧ) плазмонных металлов в составе оксидных стекол, содержащих редкоземельные (РЗ) ионы, способны многократно усиливать люминесцентные характеристики последних. Одним из перспективных способов получения таких НЧ является метод лазерной обработки стекла, содержащего в своем составе атомы или ионы плазмонных металлов. Преимуществом такого подхода является возможность создания упорядоченных массивов плазмонных НЧ, обладающих настраиваемыми оптическими характеристиками. Трудности формирования и исследования таких плазмонных структур обусловлены, с одной стороны, малостью областей стекла с образовавшимися НЧ и, следовательно, низкой концентрацией плазмонного металла в состоянии НЧ по сравнению с его общим содержанием в образце, а с другой – техническими сложностями измерения XAFS сигнала с относительно малых площадок, подвергнутых лазерному облучению.

В настоящей работе взаимодополняющими методами электронной микроскопии, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ТЕМ-EDX), и спектроскопий оптического и рентгеновского поглощения (XAFS) изучена структура и оптические свойства центров серебра в цинк-фосфатных (PZ) стеклах до и после обработки фемтосекундным (ФС) лазером. С помощью перечисленных методов установлено формирование НЧ серебра под действием ФС лазерного излучения, определены размеры НЧ, их атомная структура и степень агломерации. Измерены и проанализированы спектры оптического поглощения и люминесценции синтезированных PZ стекол.

Полученные структурные и оптические характеристики допированных серебром PZ-стекол создают основу для их дальнейшего допирования РЗ ионами с целью создания лазерных сред с повышенной люминесценцией.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-12-00102. <https://rscf.ru/project/23-12-00102/> в Южном федеральном университете.

С 133 Исследования радиационных свойств материалов с помощью реакций мультифрагментации (энергия пучка более 1гэв/нуклон): графит, ленты втсп, тантал, висмут, золото, уран, торий, актиниды, ленты втсп

В.И. Стегайлов, С.И. Тютюнников, С.П. Авдеев, О.В. Белов, И.П. Юдин,
В.В. Карч

ОИЯИ, Дубна

Эксперименты проводятся в рамках программы электроядерных исследований радиационных свойств материалов на ускорителях ОИЯИ на экспериментальных комплексах ЛЯП и ЛФВЭ ОИЯИ, созданных на базе ускорителей, в «on-line» и «off-line» режимах.

В докладе описана методика экспериментов, как при использовании урановой сборки «Квинта», так и при облучении на прямом пучке ускорителей ОИЯИ, описана работа и полученные результаты на многодетекторном спектрометре ФАЗА. (См.рис 2.)

Рассматриваются протекающие реакции, а также структура образующихся исследуемых ядер. Особое внимание уделено реакциям мультифрагментации идущих при больших (более 1 Гэв) энергиях. Представлены результаты исследований с мишенями графита, золота, урана, актинидов (рис.2). В докладе делаются экспериментальные оценки образования и наработки быстрых нейтронов необходимых для протекания реакций деления. Рассматриваются планы дальнейших экспериментов, (см.доклад) на ускорителях Курчатовского института.

/3/ рис.1

/4/ рис.2

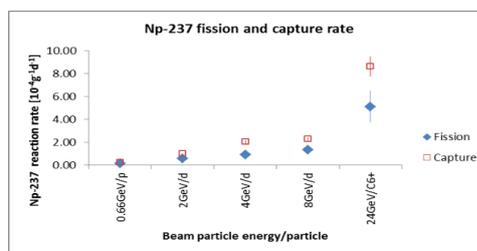
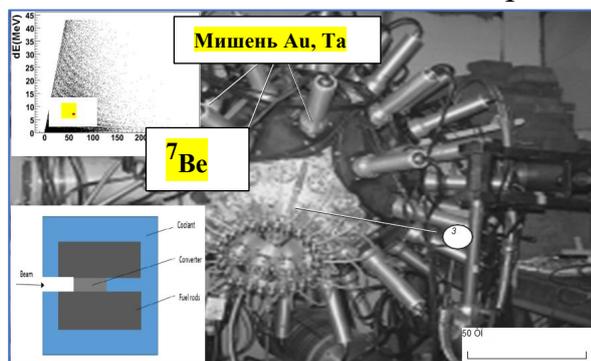


Figure 5. Np-237 fission and capture rate for each experiment.

Многодетекторный спектрометр «ФАЗА». (1-спектры продуктов реакций, 2-3 детекторы и датчики режимов работы спектрометра, 4- схема «гипотетической» активной зоны реактора в режиме ADC).

1. S.I. Tyutyunnikov, V.I. Stegailov *et al.* «Nucleus-2023». Sarov. 2023. P.17-18.
2. S.I. Tyutyunnikov, V.I. Stegailov *et al.* «Nucleus-2020». St-Petersburg. 2020. P.117-118.
3. S.P. Avdeyev, W. Karcz, V.I. Stegailov *et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys, 2020, 84, P. 979–980.
4. S. Kilim, S.I. Tyutyunnikov, V.I. Stegailov *et al.* XXIII Inter. Baldin Seminar, Dubna, 2016, P. 80-81.

С 134 Исследование свойств высокоспиновых изомеров в области (N=88-89) в ядрах гольмия и европия методами ядерной и лазерной спектроскопии в рамках программы изучения радиационных свойств материалов

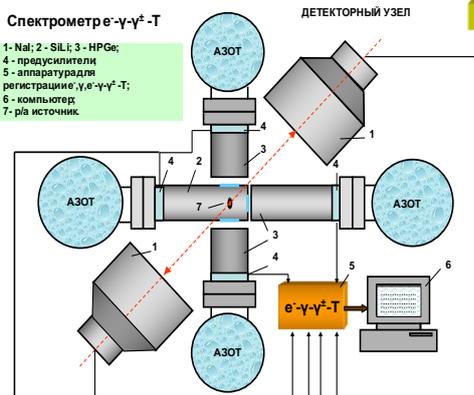
В.И.Стегайлов¹, С.И.Тютюнников¹, О.В.Белов¹, С.В. Розов¹, И.П.Юдин¹, Н.Г. Шакун¹, В.Г. Картавенко¹, И.А.Щербаков², Е.В.Бармина², А.В.Симакин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна
² Физический лазерный институт им. А.М.Прохорова, Москва

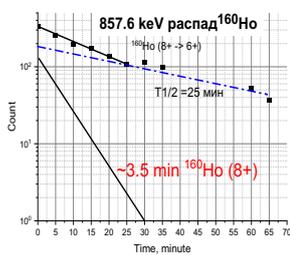
В докладе представлены итоги многолетних исследований изомерии ядер в области скачка квадрупольной деформации (N=88-90).

Эксперименты проводились на ускорителях ОИЯИ в рамках программы по исследованию радиационных свойств материалов в диапазоне ядер от углерода до урана. При исследовании изомерии ядер гольмия использовалась мишень ¹⁶⁵Ho. Распад ¹⁵²Eu изучался с использованием лазерных методик (см. доклад). Отдельные результаты представлены на рис. (1-4). В нечетно-нечетных ядрах гольмия с A=156,158,160 при изучении структуры ядер исследовано более десяти высокоспиновых изомеров и времен жизни, половина из них измерена впервые.

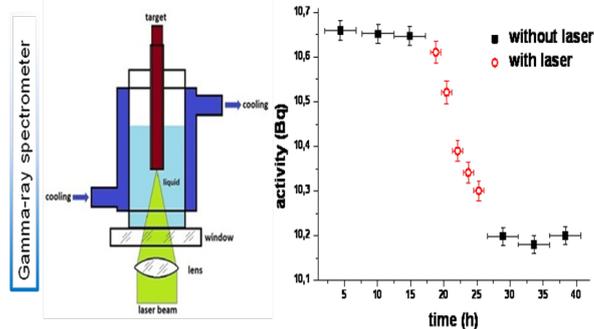
Спектрометр гамма совпадений. рис.1



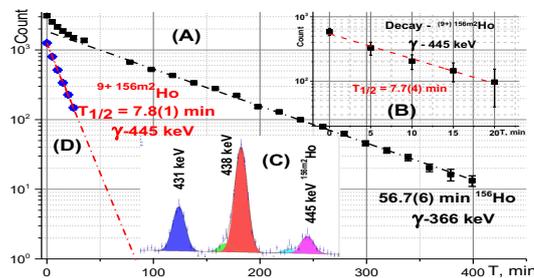
Новый изомер в ядре ¹⁶⁰Ho рис.3.



Исследуемый источник ¹⁵²Eu в поле лазера. рис.2



Новый изомер в ядре ¹⁵⁶Ho рис.4.



1. С.И.Тютюнников, В.И.Стегайлов и др.//Тез.докл.межд.конф. по яд.физике (Саров, 2023г.), с.107.
2. С.И.Тютюнников, В.И.Стегайлов и др.Квантовая электроника 47(7) 627-630(2017).

С 136 Дефектная кристаллическая структура $\alpha\text{-Na}_{0.5-x}\text{R}_{0.5+x}\text{F}_{2+2x}$ ($\text{R} = \text{Dy-Lu, Y}$) по данным рентгеновской и электронной дифракции

Е.А. Сульянова¹, Б.П. Соболев¹, В.И. Николайчик², А.С. Авилов¹

¹ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатковского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ “Курчатовский институт”, Москва*

² *Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка*

Методом рентгеновской дифракции при 293 и 85 К изучены кристаллы $\alpha\text{-Na}_{0.4}\text{R}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ ($\text{R} = \text{Ho-Lu, Y}$) [1]. Для построения их дефектной структуры применена унифицированная кластерная модель наноструктурированных кристаллов со структурой типа флюорита [2, 3], основанная на полиморфизме соединения KR_3F_{10} ($\text{R} = \text{Er, Yb}$) [4-6]. Матричная составляющая $\alpha\text{-Na}_{0.4}\text{R}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ содержит Na^+ и R^{3+} в отношении 1:1. Часть анионов матрицы смещена в позицию $32f$ (пр. гр. $Fm\bar{3}m$). Избыток R^{3+} образует с Na^+ октаэдро-кубические кластеры с ядрами в форме кубооктаэдров $\{\text{F}_{12}\}$, образованных межузельными анионами в позиции $48i$. Кластерная составляющая $\alpha\text{-Na}_{0.4}\text{R}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ образована кластерами i -типа. Метод дифракции электронов показал, что кластерная составляющая $\alpha\text{-Na}_{0.4}\text{Yb}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ имеет форму пластинок толщиной около 5 нм со сверхструктурным упорядочением [1]. Предложена их структурная модель на основе структуры $\text{K}_{0.265}\text{Gd}_{0.735}\text{F}_{2.47}$ [7]. Впервые методом дифракции электронов получено экспериментальное подтверждение отнесения $\alpha\text{-Na}_{0.5-x}\text{R}_{0.5+x}\text{F}_{2+2x}$ к наноструктурированным кристаллам. При понижении температуры от 293 до 85 К тип кластерной составляющей дефектной структуры $\alpha\text{-Na}_{0.4}\text{R}_{0.6}\text{F}_{2.2}$ с $\text{R} = \text{Ho-Lu, Y}$ не меняется. При 293 К граница смены типа дефектной структуры в ряду $\alpha\text{-Na}_{0.5-x}\text{R}_{0.5+x}\text{F}_{2+2x}$ расположена между $\text{R} = \text{Dy}$ (атомный номер $Z=66$) [8] и Ho ($Z=67$). При понижении температуры от 293 до 85 К положение границы не изменяется.

1. Е.А. Сульянова, Б.П. Соболев, В.И. Николайчик, А.С. Авилов, Кристаллография. в печати, 69, № 6 (2024).
2. Е.А. Sulyanova, B.P. Sobolev B.P., CrystEngComm. 3762, 24 (2022).
3. Е.А. Sulyanova, B.P. Sobolev B.P., J. Phys. Chem. C. 4200, 128 № 10 (2024).
4. S. Aleonard, J.C. Guitel, Y. Le Fur., et al., Acta Cryst B. 3227, 32 № 12 (1976).
5. S. Aleonard, J.C. Guitel, M.Th. Roux, J. Solid State Chem. 331, 24 (1978).
6. A. Grzechnik, J. Nuss, K. Friese, et al., Z. Kristallogr. 460, 217 (2002).
7. Y. Le Fur, S. Aleonard, M.F. Gorius., et al., Z. Kristallogr. 281, 182 (1988).
8. Е.А. Сульянова, Б.П. Соболев, В.И. Николайчик, А.С. Авилов, Кристаллография. 772, 69, № 5 (2024).

С 137 Октамер, как трехмерный фрагмент формирования кристалла дигидрофосфата калия

*А.Е. Суханов¹, П. В. Конарев¹, В.И. Тимофеев¹, Е.С. Смирнова¹, Г.С. Петерс¹,
Ю.В. Писаревский¹, О.А. Алексеева¹, М.В. Ковальчук¹*

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Структура водного раствора дигидрофосфата калия (KH_2PO_4 , KDP) исследована [1] с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) и метода молекулярной динамики (МД). Согласно экспериментальным данным МУРР, в растворе помимо ионов K^+ , $(\text{H}_2\text{PO}_4)^-$ и мономера KH_2PO_4 образуется предкристаллизационный кластер-прекурсор [2] октамер $(\text{KH}_2\text{PO}_4)_8$, а присутствие других типов олигомеров не наблюдается. При понижении температуры ниже температуры насыщения ($\sim 60^\circ\text{C}$) объемная доля октамеров резко возрастает (рис.1а), достигая 50 % при 4°C . Результаты МД-расчетов временных зависимостей устойчивости димеров $(\text{KH}_2\text{PO}_4)_2$, тетрамеров $(\text{KH}_2\text{PO}_4)_4$ и октамеров $(\text{KH}_2\text{PO}_4)_8$ показывают, что димеры и тетрамеры быстро распадаются (50-100 пс), а октамеры (рис.1б) остаются стабильными. Был проведен сравнительный анализ связей между октамерами и кристаллической решеткой KDP, когда октамер рассматривался в процессе роста кристалла в направлениях $[001]$ и $[100]$. Обсуждается корреляция полученных результатов с изменением анизотропии скоростей роста (габитуса) кристаллов KDP (рис. 1в при малом пересыщении) при различных степенях пересыщения.

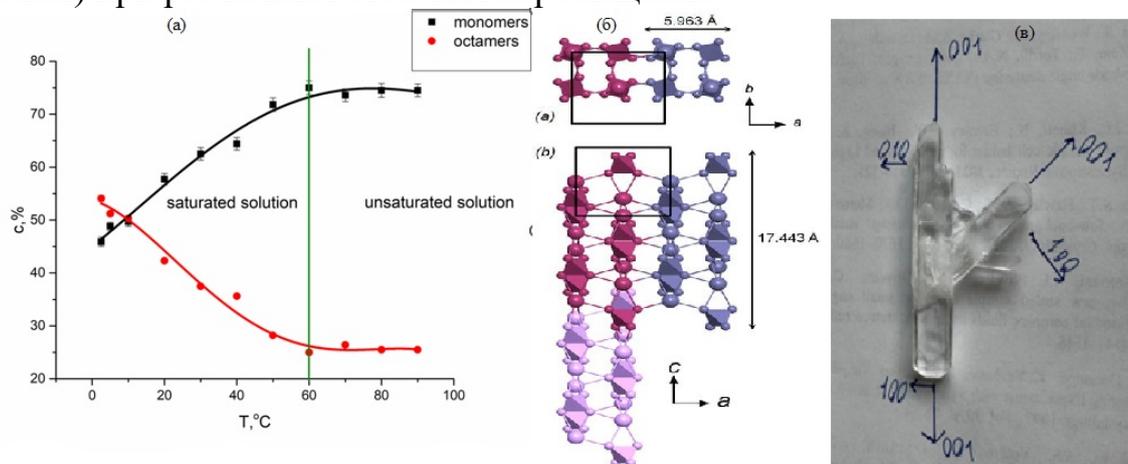


Рис.1. а) Зависимость объемной доли мономеров и октамеров от температуры. б) Трехмерный фрагмент октамера. в) Фото друзы кристалла KDP, выращенного при малом пересыщении. Габитус кристалла удлинен в кристаллографическом направлении $[001]$.

Работа проведена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования (№ 075-15-2024-637), а также в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. A. E. Sukhanov, P. V. Konarev, et al., Crystals. 13(11), 1577 (2023)
2. D. Gebauer, M. Kellermeier, et al., Chem. Soc. Rev., 43, 2348 (2014)

С 138 Определение количественных параметров локальной атомной структуры стекол систем LNB и LTaB

*Г.Б. Сухарина¹, А.М. Ермакова¹, Л.А. Авакян¹, Р.О. Алексеев²,
Г.Ю. Шахгильдян³, В.И. Савинков³, Н.А. Романов³, А.А. Велигжанин⁴,
Л.А. Бугаев¹, В.Н. Сигаев³*

¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

² Сколковский институт науки и технологий, Москва

³ Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва

⁴ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Стекла на основе оксида бората широко применяются в биомедицине, электротехнике и в оптических устройствах [1]. Уникальные оптические и другие физико-химические свойства боратных стекол во многом определяются их составом и локальной атомной структурой [2].

В данной работе было выполнено исследование структурных особенностей ближнего окружения лантана в стеклах $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-V}_2\text{O}_3$ (LNB) и $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Ta}_2\text{O}_5\text{-V}_2\text{O}_3$ (LTaB) в зависимости от содержания соответствующих оксидов. Был рассмотрен ряд образцов с определенным содержанием оксида лантана и оксида бора. Анализ экспериментальных $\text{La } L_3\text{-XANES}$ спектров LNB и LTaB, измеренных с использованием оборудования Курчатовского источника синхротронного излучения [3], был выполнен на основе метода многомерной интерполяции, реализованного в программном комплексе FltIt [4]. Полученные экспериментальные и теоретические данные позволили определить количественные характеристики локальной атомной структуры окружения атомов лантана в исследуемых образцах трехкомпонентных стекол.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-12-00106.

1. G.B. Sukharina, A.M. Ermakova, et al., *Journal of Non-Crystalline Solids* 616, 122454 (2023)
2. R.O. Alekseev, L.A. Avakyan, et al., *J. Alloys Compd.* 917, 165357 (2022)
3. A.A. Chernyshov, A.A. Veligzhanin, et al., *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.* 603, 95–98 (2009)
4. G. Smolentsev, A. Soldatov, *J. Synchrotron Radiat.* 13, 19-29 (2006)

С 140 Определение структуры комплексов Ag^+ с аминогруппами в среде олигооксипропилендиамина методами EXAFS и XANES

А.Л. Тригуб¹, И.Н. Сенчихин², Е.С. Жаворонок³

¹НИИЦ «Курчатовский институт»

²Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН

³МГУ тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова

Наноконпозиты на основе частиц серебра в эпоксиаминных матрицах представляют значительный интерес благодаря перспективам использования в микро- и оптоэлектронике, а также выраженным биоцидным свойствам. Начальной стадией формирования таких композитов является взаимодействие прекурсора (соли серебра (I) – источника ионов Ag^+) с основными компонентами эпоксиаминных матриц – эпоксидным олигомером и аминным отвердителем. В данной работе выполнено определение локальной атомной геометрии ионов Ag^+ , образующих комплекс с аминогруппами жидкого аминного отвердителя – олигооксипропилендиамина ($M_n=230$).

В докладе будут представлены основные методы анализа экспериментальных данных для получения информации о локальной атомной геометрии металлоорганических комплексов: классическая методика посферной подгонки EXAFS спектров [1], эволюционный подход, реализованный в программе EvAX [2] и подгонка спектров XANES (расчет программой FEFF10 [3]) путем варьирования структурных параметров. На примере решаемой структурной задачи будут представлены возможности и ограничения каждого метода.

В результате согласованного описания дальней и ближней тонкой структур рентгеновского спектра удалось определить, что ионы Ag^+ координируются двумя аминогруппами, пространственное расположение которых удалось восстановить методами рентгеновской спектроскопии поглощения.

1. Newville M. J. Synchrotron Rad. 8 (2001) 96.
2. J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans. J. Phys.: Condens. Matter. 26 (2014) 055401.
3. J. J. Kas, F. D. Vila, et al. J. Synchrotron Rad. 28 (2021) 1801

С 141 Кристаллическая структура, оптические и магнитные свойства координационных комплексов металлофталоцианинов

*М.А. Фараонов¹, Н.Р. Романенко¹, А.В. Кузьмин², И.А. Якушев³, С.С. Хасанов²,
Д.В. Конарев¹*

¹ *ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН*

² *Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН*

³ *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*

Металлофталоцианины (МРС) широко применяются для получения функциональных материалов. Одним из способов направленной модификации макрогетероцикла является синтез би- и полиметаллических координационных соединений, полученных за счет координации соединений металлов на центральный атом металла РС.

Разработаны методы синтеза гетерометаллических координационных комплексов $\{M_1 \cdot (M_2 \text{Макроцикл})\}$ на основе различных металломакрогетероциклов (РС, нафталоцианин, порфирин и аналоги) с различными соединениями переходных металлов (Co, Fe, V, Rh, Ru, Vo, Os, Ir) [1–3]. В виде кристаллов получена большая серия комплексов, установлена их кристаллическая структура, исследованы оптические и магнитные свойства.

Показано, что ред-окс активный макрогетероцикл находится в разном зарядовом состоянии: от исходного (Макроцикл²⁻) до тетраанионного (Макроцикл⁴⁻), в том числе он может быть парамагнитным (Макроцикл^{•3-}).

Наблюдается разная упаковка координационных фрагментов в кристалле. Например, координационные $[\text{Cp}^{(*)}\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CO})_2 \cdot \text{Sn}^{\text{II}}(\text{Макроцикл}^{\bullet 3-})]$ фрагменты образуют плотноупакованные димеры с сильным π - π взаимодействием, величина которого достигает $J/k_B = -170$ К. Наиболее сильное магнитное взаимодействие ($J/k_B = -183$ К) наблюдается в комплексе $[\text{Ph}_5\text{CpRu}^{\text{II}}(\text{CO})_2 \cdot [\text{Sn}^{\text{II}}(\text{РС}^{\bullet 3-})]]$.

При введении в состав комплексов Cp^*_2Cr^+ ($S = 3/2$) катионов получены соединения с несколькими парамагнитными центрами.

Соединения имеют хорошую растворимость, имеют интенсивное поглощение в широком диапазоне. В них может наблюдаться сильное магнитное взаимодействие. Разработанные методы и подходы могут быть использованы для синтеза соединений с заданной структурой и свойствами.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке государственного задания ФИЦ ПХФ и МХ РАН (№124013100858-3).

1. M.A. Faraonov, E.I. Yudanov, et al., CrystEngComm 4620, 25 (2023).
2. M.A. Faraonov, E.I. Yudanov, et al., Dalton Trans. 12049, 52 (2023).
3. M.A. Faraonov, A.V. Kuzmin, et al., Eur. J. Inorg. Chem. e202300407, 52 (2023).

С 142 Оснастка для исследования взрывных процессов во взрывной камере с использованием синхротронного излучения

В.П. Халеменчук¹, К.А. Тен¹, Э.Р. Прууэл¹, М.М. Гусельников¹

¹ *Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск*

Проведение взрывных экспериментов с использованием синхротронного излучения (СИ) требует использования специальных приспособлений точной юстировки взрывной камеры (ВК) и прецизионной юстировки экспериментальной сборки относительно пучка СИ.

Разработана оснастка для исследования взрывных процессов с применением СИ во взрывных камерах с предельной массой взрывчатого вещества (ВВ) 50 и 200 г., расположенных на ускорительных комплексах ВЭПП-3 и ВЭПП-4 в ИЯФ СО РАН.

При проведении работ пучок СИ проходит по вакуумному каналу, с глубиной вакуума 10^{-6} Торр, и попадает во взрывную камеру и через промежуточный вакуумный канал выходит в хатч с детектором DIMEX. Объем взрывной камеры разделен с двух сторон от объема вакуумных каналов бериллиевыми окнами толщиной 2 мм. Для защиты рентгеновских окон разработаны глушители ударной волны, которые снижают интенсивность ударной волны до 200 кПа и защищают от поражения осколков.

При проведении экспериментов необходимо перемещать экспериментальную сборку относительно пучка СИ с целью изменения области исследований. Так как пучок СИ стационарный, то необходимо разработать юстировочный механизм, устанавливаемый во взрывной камере и обеспечивающий перемещения сборки относительно пучка СИ и детектора DIMEX.

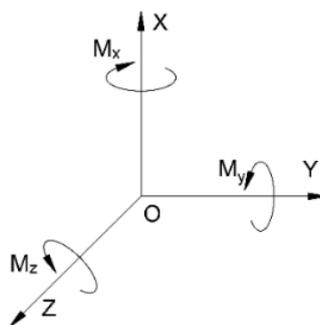
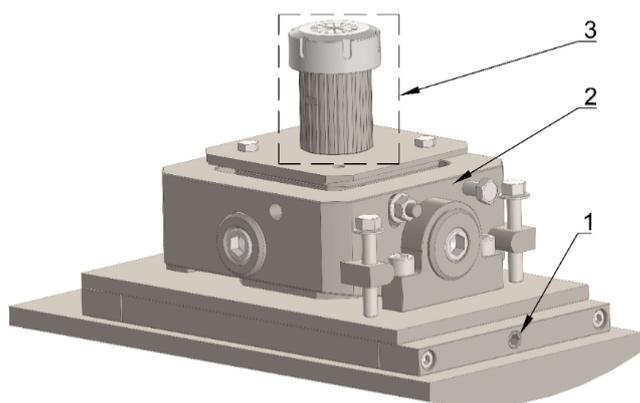


Рис.1- степени свободы (пучок СИ движется вдоль оси Oz).

Изготовленный механизм спроектирован по модульному (блочному) принципу (рис.2). Модуль горизонтального перемещения (рис.2, поз.1) обеспечивает ход поперек пучка СИ (движется вдоль оси Oz) по оси Oy (рис.1) с точностью 0,05 мкм. Поворотный модуль (рис.2, поз.2) позволяет наклонять экспериментальную сборку по M_z и M_y (рис.1) с точностью 0,1 мрад. Модуль вертикального перемещения (рис.2, поз.3) представляет собой талреп обеспечивающий вертикальный ход по оси Ox с точностью 0,1 мкм.



а



б

Рис. 2 – Юстировочный механизм (а); юстировочный механизм после 200 подрывов (б)
1- модуль горизонтального перемещения; 2- поворотный модуль; 3- модуль вертикального перемещения.

Использование юстировочного механизма позволило повысить качество проводимых экспериментов и сократить время на подготовку работ. Данная оснастка эксплуатируется более 2 лет и с ее использованием проведено более 200 подрывов (рис. 1б).

С 143 Зарядовое состояние Pt в бинарных соединениях

П.В. Чареева¹, А.Л. Тригуб², Д.А. Чареев³, М.С. Никольский¹, Б.Р. Тагиров¹

¹ ИГЕМ РАН

² НИЦ «Курчатовский институт»

³ ИЭМ РАН

Комбинацией квантово-химических расчетов парциального заряда Pt (методы QTAIM и DDEC6) и анализа спектров XANES модельных соединений были изучено зарядовое состояние Pt и его влияние на параметры XANES спектра (энергия края поглощения (E_0) и белой линии (E_{WL}), площадь (S_{WL}) и высота (I_{WL}) белой линии). Для этого использовались 21 платиновые фазы, условно поделенные на 6 групп: (1) халькогениды $PtChal_2$: PtO₂, PtS₂, PtSe₂, PtTe₂; (2) пниктиды $PtPn_2$: PtAs₂, PtSb₂ и PtBi₂; (3) интерметаллиды Pt_xSn_y : PtSn, Pt₂Sn₃ и PtSn₂; (4) интерметаллиды Pt_xGa_y : PtGa, Pt₂Ga₃, Pt₅Ga₃ и Pt₃Ga₇; (5) интерметаллиды Pt_xIn_y : PtIn, Pt₂In₃ и Pt₃In₇; (6) *Other*: PtTe, PtS, K₂PtCl₄ и Pt. В группах $PtChal_2$ и $PtPn_2$ соединения отличаются типом лиганда при сохранении стехиометрии, а в группах Pt_xSn_y , Pt_xGa_y и Pt_xIn_y отличительной чертой является соотношение лиганд/Pt ($n(L)/n(Pt)$) при сохранении типа лиганда.

Путем квантово-химических расчетов были выявлены общие тенденции между парциальным зарядом Pt и электроотрицательностью лиганда. Анализ спектральных особенностей XANES позволил определить влияние типа лиганда и стехиометрии соединения на перенос заряда между электронными оболочками.

По установленным корреляциям между парциальным атомным зарядом Pt в $PtChal_2$ и параметрами их XANES спектров (S_{WL} и I_{WL}) был определен заряд Pt в кристаллах синтетического Pt-содержащего пирита. Установленные корреляции спектральных особенностей и парциального атомного заряда Pt могут служить простым инструментом для определения состояний (электронного состояния и геометрии на атомном уровне) Pt в природных минералах различного состава.

С 144 Моделирование атомных конфигураций интерфейсов CeO₂-Cu

Е.Н. Черковский¹, О.М. Жигалина¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Одним из важнейших направлений в технике в настоящее время является создание и исследование альтернативных источников энергии, например топливных элементов с протонообменной мембраной, использующих окислительно-восстановительные реакции водорода для продуцирования электроэнергии. Перспективный путь повышения показателей таких энергетических элементов – добавление в их состав нанокатализаторов, состоящих из наночастиц оксидов переходных металлов, покрытых благородными металлами в виде моно-, биатомных слоёв или кластеров. Одним активно исследуемым составом для таких нанокатализаторов является сочетание наночастиц диоксида церия с распределёнными на их поверхности частицами меди и/или её оксидов [1].

Проведено поэтапное квантовомеханическое моделирование различных конфигураций межфазной границы медь-церий на основе DFT-теории, выполнено уточнение координат атомов, оценка периодов базовой кристаллической ячейки и расчёт её энергии, сравнительный анализ полученных данных. Определены четыре возможные с точки зрения DFT-теории конфигурации интерфейса CeO₂-Cu, их структурные и энергетические параметры рассчитаны и приведены в таблице 1. Далее из этих четырёх конфигураций на основе опытных данных выделены две возможные в реальных материалах данной группы.

Таблица 1

Тип	<i>a, b, Å</i>	<i>E_c, Ry</i>	<i>d_{Cu-O}, Å</i>	<i>C_{O vac}</i>	<i>C_{Cu vac}</i>
CeO ₂ (без Cu)	5.182	80	-	0.00	-
1	4.894	111	1.828	0.00	0.00
2	4.984	103	1.776	0.00	0.25
3	4.994	109	1.801	0.25	0.00
4	4.850	101	1.802	0.25	0.25

1. Olga M. Zhigalina, Olga S. Morozova, Dmitry N. Khmelenin, Alla A. Firsova, Olga V. Silchenkova, Galina A. Vorobieva, Andrey V. Bukhtiyarov, Evgeny N. Cherkovskiy, Victoria G. Basu. Effect of Copper Particle Size on the Surface Structure and Catalytic Activity of Cu–CeO₂ Nanocomposites Prepared by Mechanochemical Synthesis in the Preferential CO Oxidation in a H₂-Rich Stream (CO-PROX). *Catalysts*, 14(4), 2024 – p. 222.

С 145 Структурные особенности изолирующей матрицы LiNbO_3 композитных мемристоров типа $(\text{Co-Fe-V})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$

*К.Ю. Черноглазов¹, С.Н. Николаев¹, Р.Г. Чумаков¹, Е.В. Храмов¹,
А.В. Ситников^{1,2}, В.А. Демин¹, В.В. Рыльков^{1,3}*

1 Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва

2 Воронежский Государственный Технический Университет, Воронеж

*3 Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
Фрязино*

Значительный интерес к мемристивным структурам на основе металл-диэлектрических нанокompозитов (НК), демонстрирующих обратимые эффекты резистивного переключения (РП), обусловлен перспективами их использования для создания элементов многоуровневой памяти и массивов мемристоров в матричном исполнении, имитирующих синапсы при построении нейроморфных вычислительных систем [1].

В данной работе с использованием синхротронных методов были выполнены сравнительные исследования структурных особенностей изолирующей пленки Li-Nb-O и образцов НК $(\text{Co-Fe-V})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$, полученных, соответственно, из поликристаллической мишени LiNbO_3 и составной мишени $\text{Co}_{40}\text{Fe}_{40}\text{V}_{20}\text{-LiNbO}_3$ методом ионно-лучевого распыления.

Для исследования локальной структуры изолирующей матрицы НК были использованы методы спектроскопии поглощения рентгеновского излучения вблизи краевой структуры (XANES) на K -краях Nb.

Показано, что спектры XANES пленки Li-Nb-O , снятые в различных ее точках, идентичны. При этом локальная структура Nb в пленочных образцах заметно отличается от таковой в кристаллическом LiNbO_3 : расстояние Nb-Nb сдвигается на $\sim 0.9 \text{ \AA}$ в сторону меньших значений, что указывает на сильную нестехиометрию пленок и частичное восстановление Nb в виде закиси NbO и/или мелких металлических частиц.

Моделирование образцов (НК) $(\text{Co-Fe})_x(\text{LiNbO}_{3-y})_{100-x}$ показывает, что кислородная координация $3+3$ сохраняется при любой концентрации ниобия. При этом сдвиг пути рассеяния Nb-Nb в структуре ниобата лития в сторону меньших межатомных расстояний, не наблюдается – образец имеет структуру, наиболее сходную с LiNbO_3 . Данные по составу образцов, полученные методом энергодисперсионного микроанализа, подтверждают выявленные их особенности.

Измерения спектров поглощения рентгеновских лучей выполнены с использованием оборудования УНУ “КИСИ”. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках соглашения № 075-15-2023-324.

1. M. Lanza, A. Sebastian, W.D. Lu, M.L. Gallo, M.-F. Chang, D. Akinwande, F.M. Puglisi, H.N. Alshareef, M. Liu, J.B. Roldan, Science **376**, 1066 (2022).

С 146 Синхротронные исследования электронного строения и состава тонких эпитаксиальных и магнетронных слоев оксида олова

*О.А. Чувенкова¹, Н.И. Бойков¹, С.В. Рябцев¹, Е.В. Парина¹, Р.Г. Чумаков²,
А.М. Лебедев², Ю.С. Какулия¹, С.С. Титова¹, К.А. Фатеев¹, С.Ю. Турищев¹*

*¹Воронежский государственный университет
²НИЦ "Курчатовский институт"*

Материалы системы олово-кислород и тонкопленочные структуры на их основе являются современными и актуальными для создания широкого ряда электронных приборов. Управление свойствами при формировании таких материалов и структур является важным вызовом при варьировании технологических режимов. Исследования синхротронными методами XANES и XPS позволяют без разрушения получить высокоточные экспериментальные данные о специфике локального атомного окружения и зарядовом состоянии атомов на поверхности изучаемого объекта. Тем самым, изучить особенности состава, физико-химического состояния поверхности и доступных границ раздела.

В работе исследованы тонкие слои оксидов олова, полученных современными методами молекулярно-лучевой эпитаксии и магнетронного распыления. XANES и XPS исследования были выполнены на синхротронах BESSY II (Берлин, Германия) "Курчатов" НИЦ "Курчатовский институт" (Москва, Россия).

Слой олова, сформированный методом молекулярно-лучевой эпитаксии, после хранения такой же длительности в лабораторных условиях, полностью окисляется до SnO₂ с включениями фаз промежуточных оксидов. Поверхность буферного слоя кремния подвергается окислению атомами атмосферного кислорода в результате их диффузии через эпитаксиальный слой Sn. Слои олова, полученные магнетронным распылением, содержат на поверхности те же самые фазы промежуточных оксидов олова SnO и SnO₂ орторомбической модификации, однако, отмечается наличие неокисленного металлического олова. Таким образом, тонкие слои олова при окислении от поверхности проходят одни и те же стадии образования оксидов независимо от метода получения этих слоев. В то же время, результат взаимодействия с атмосферным кислородом существенно зависит от толщины сформированного нанослоя как показатель количества доступного для окисления металлического олова.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 23-22-00465.

С 154 Анализ рентгеновских спектров марганца с использованием свёрточной нейронной сети

К.М. Шамьюнов^{1,2}, А.Л. Тригуб¹

¹ НИЦ "Курчатовский институт"

² МФТИ

Спектр поглощения рентгеновского излучения можно условно разделить на две области: вблизи края поглощения (XANES), дальняя структура спектра (EXAFS). Спектроскопия поглощения рентгеновского излучения вблизи края поглощения широко используется в естественных науках для получения информации о структуре локального окружения поглощающего атома, его степени окисления. Несмотря на полное теоретическое описание и наличие классических методов анализа XANES спектров, не всегда возможно с достаточной точностью определить степень окисления вещества в образце. Неопределённости в полученных данных возникают из-за низкого соотношения сигнал/шум или, когда существует сдвиг спектра по энергии, вызванный некорректной калибровкой оборудования. В работе представлен подход к анализу спектра XANES с помощью свёрточной нейронной сети. Сеть обучалась на данных, сгенерированных с использованием известных спектров с добавлением шума и сдвига по энергии. Данный подход позволяет определять степень окисления марганца с довольно хорошей точностью там, где классический метод разложения в линейную комбинацию бессилён. Среднеквадратичное отклонение предсказанных долей содержания степеней окисления от экспериментальных данных составляет 6-8%.

С 147 Расшифровка фотоэлектронных спектров валентной зоны кластерных структур Ge(111), GeO₂/Ge(111), C₆₀F₁₈/Ge(111), C₆₀F₁₈/GeO₂/Ge(111)

Е.А.Шрамков^{1,2}, Р.Г. Чумаков¹

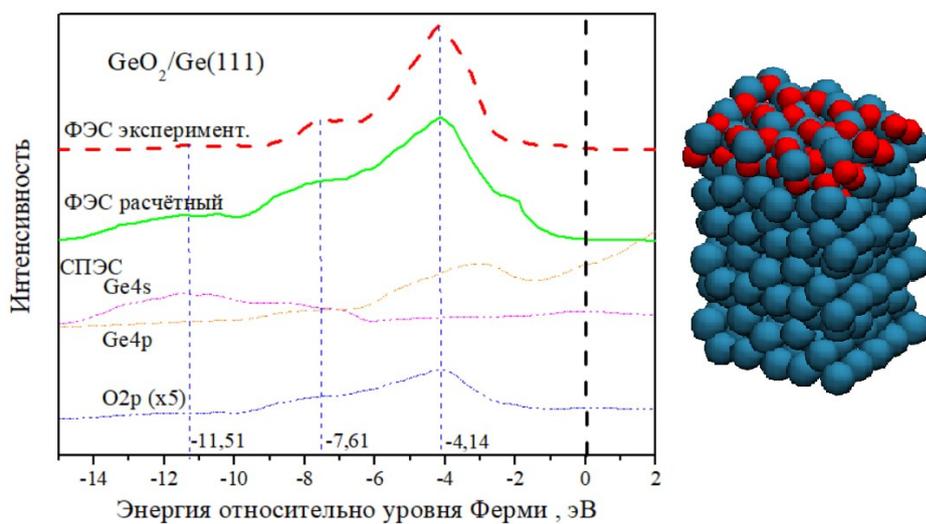
¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Фотоэлектронный спектр, получаемый от различных кластерных структур [1] (образцы с оксидными плёнками, адсорбированными молекулами на поверхности и т.д.), имеет распределение плотности электронных состояний вблизи валентной зоны, сложное для интерпретации [2-3]. В основном это вызвано наличием в комплексных образцах широкого спектра различных химических связей, что влечёт за собой смешивание пиков плотности электронных состояний, характерных для отдельных химических связей.

С целью расшифровки (определения электронных энергетических уровней (ЭЭУ), образующих энергетические пики в спектре) таких «сложных» фотоэлектронных спектров валентной зоны для кластерных структур Ge(111), GeO₂/Ge(111), C₆₀F₁₈/Ge(111), C₆₀F₁₈/GeO₂/Ge(111) в данной работе были рассчитаны распределения плотностей электронных состояний (ПЭС) для кластеров в оптимальном энергетическом положении. Из ПЭС были получены спроецированные плотности электронных состояний (СПЭС) для различных ЭЭУ. Для получения теоретического фотоэлектронного спектра ЛПЭС умножались на характерные для их ЭЭУ нормированное сечения захвата фотона. Путём сопоставления нормированного теоретического фотоэлектронного спектра с нормированными СПЭС для всех ЭЭУ, участвующих в расчётах, была произведена расшифровка исследуемых спектров (рисунок 1).

Расчёты были выполнены с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>).



1. Жидомиров Г.М. Кластерное приближение в квантовохимических исследованиях хемосорбции и поверхностных структур. — М. : ВИНТИ, 1984. — 162 с. ил.; 21. — (Итоги науки и техники).
2. J. Eidhagen et al., Journal of the electrochemical society. – 2023. DOI: 10.1149/1945-7111/acba4b
3. D. Zagidulin et al., Surf. Interface Anal. — 2013. — №45 — С. 814-822.

С 148 Структурные изменения в дисперсных порошках при механоактивации

О.Э. Шубабко¹, Н.А. Попова¹, М.А. Вартанян¹

¹РХТУ им. Д.И. Менделеева

Для осуществления спекания в процессе обжига тугоплавких бескислородных материалов на практике требуются большие энергетические затраты из-за высоких температур плавления исходных соединений и наличия жестких ковалентных связей.

На сегодняшний день уже известно о влиянии процесса механоактивации на физико-механические характеристики нанодисперсных порошков [1].

В основе лежит процесс диспергирования вещества, сопровождающийся различными структурно-химическими изменениями: дислокации, точечные дефекты, изменение электронной структуры, длины и углов межатомных связей. Все это приводит к разрыву связей в веществе и распаду на отдельные структуры, что ведет к переходу вещества в высокореакционное состояние и образованию метастабильных состояний в области контактов фаз, хим. гомогенизация и в итоге релаксации продуктов до равновесного состояния [1].

В данной работе, для оценки вклада механоактивации в изменение структуры компонентов шихты и их активности к спеканию, посредством рентгенофазовой спектроскопии, оценивали строение спектров на серии сложных модельных объектов. Механоактивации порошков TaN и HfC осуществляли в планетарной мельнице PULVERISETTE 5/2 с мелющими шарами из WC в течение 15-135 минут, с шагом 15 минут.

В дальнейшем был получен материал на основе высокотемпературной шихты системы TaN – HfC с добавкой SiC.

Получена структурная информация об изменении параметров кристаллической решетки в исследуемых образцах. Для TaN максимальное отклонение по параметру a составила 0,22%, по параметру c 0,05%, для HfC максимальное отклонение по параметру a составило 0,03%.

1. Уваров Н. Ф., Размерные эффекты в химии гетерогенных систем / Н. Ф. Уваров, В. В. Болдырев // Успехи химии. – 70 (4). – 2001. – с. 307 – 329.

С 149 Анализ структуры наносфер фотонных кристаллов по данным малоуглового рассеяния рентгеновских лучей

А.В. Шуленина^{1,2}, А.А. Велигжанин², Г.С. Петерс², И.И. Юрасова³, Н.И. Юрасов³

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова,

² НИЦ «Курчатовский институт»

³ Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана

В данной работе с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) изучена структура наносфер фотонных кристаллов (ФК), выращенных на основе аморфного кремнезема при различных молярных соотношениях вода/ТЭОС в исходных смесях. Данные материалы интересны с точки зрения целенаправленного синтеза ФК на основе наносфер кремнезема с заданными оптическими свойствами, так как структура наночастиц в ФК существенно влияет на их оптические свойства [1]. Помимо этого, достоверно известно о перспективах применений диоксида кремния в качестве прекурсора микрокапсул для иницилируемого высвобождения цитотоксических препаратов, в качестве загустителей дисперсных сред, сорбентов и кристаллизующих реактивов, в роли аэрогелей и УФ-фильтров.

ФК были получены модифицированным методом Штобера с естественной седиментацией наносфер из водно-этанольного раствора с молярным соотношением вода/ТЭОС – 130. Основными параметрами, контролирующими синтез ФК являлись концентрации реагентов (воды и ТЭОС), а именно молярное соотношение вода/ТЭОС.

Определены структурные параметры упорядоченных полидисперсных наносфер ФК с использованием комбинированной схемы восстановления функции распределения частиц по размерам [2]. Проведен сравнительный анализ кривых рассеяния МУРР с данными МУРР для образцов с исходным молярным соотношением вода/ТЭОС в диапазоне от 30 до 111,5.

Полученные данные свидетельствуют о том, что с помощью исходного молярного соотношения вода/ТЭОС можно контролировать и влиять на конечные размеры наночастиц кремнезема.

1. Z. Cai, Z. Li, S. Ravaine et al., Chem. Soc. Rev.V. 50. P. 5898 (2021).

2. В.В. Волков, П.В. Конарев, А.Е. Крюкова, Писма в ЖЭТФ, Т.112, вып. 9, с.632-636 (2020).

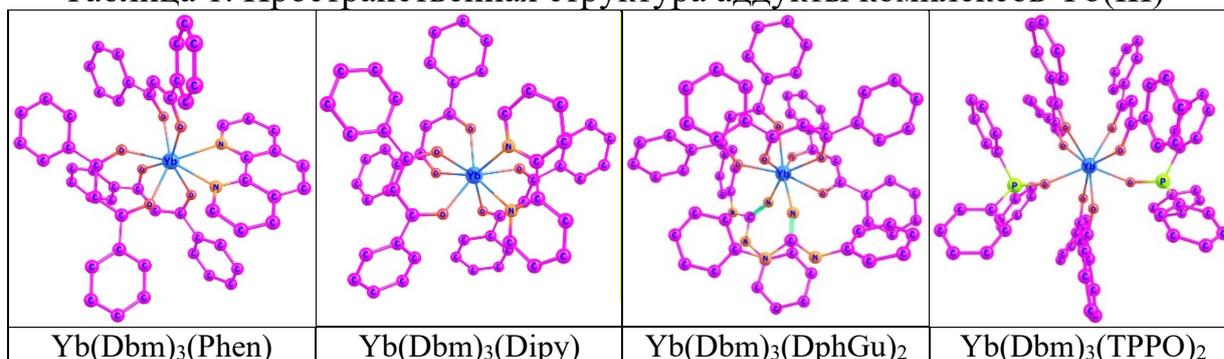
С 150 Структура светотрансформирующих материалов на основе органических комплексов Yb(III) по данным EXAFS

А.В. Шурыгин

¹ Дальневосточный Федеральный Университет, Владивосток

Аддукты комплексов трис-добензоилметаната (Dbm) Yb(III) с присоединяемыми лигандами 1,10-фенантролина (Phen), 2,2-дипиридил (Dipy), 1,3-дифенилгуанидина (DphGu) и трифенилфосфиноксида (TPPO) (таблица 1) обладают фотолюминесцентным свойством преобразования поглощенного УФ-излучения в излучение ИК-области. По результатам порошковой рентгеновской дифракции было установлено наличие существенной аморфной составляющей и сложную структуру полос, что кратно усложняет процесс расшифровки структурных данных. Применение методов XAS позволяет установить структуру первой координационной сферы с усреднением по всему материалу.

Таблица 1. Пространственная структура аддукты комплексов Yb(III)



Спектры рентгеновского поглощения L3-края иона Yb (энергия 8944 эВ) для образца в твердом состоянии были получены на станции структурного материаловедения с использованием «Курчатовского источника синхротронного излучения» НИЦ «Курчатовский институт».

Структурные параметры, включая координационное число (N) межатомные расстояния (R) и фактор Дебая-Валлера (σ^2), были найдены путем нелинейной подгонки теоретических спектров к экспериментальным.

Результаты EXAFS позволили определить координационное окружение Yb(III), подтвердить существование координации присоединяемых лигандов и установить достоверность модели полученной по результатам моделирования ТФП.

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

С 151 Результаты рентгеновского анализа образцов искусственного опала, синтезированного, при различных молярных соотношениях ВОДА/ТЭОС в исходной смеси для выделения субглобулярной структуры наносфер

И.И. Юрасова¹, Н.И. Юрасов¹, А.А. Велигжанин², Г.С. Петерс², Д.Р. Стрельцов²

¹ МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва

² НИЦ “Курчатовский институт”, Москва

Искусственный опал является одним из важнейших видов глобулярных фотонных кристаллов (ГФК) и состоит из наносфер аморфного кремнезёма, и имеющих диаметр от десятков до сотен нанометров. ГФК рассматриваются как перспективный материал для оптоэлектроники и вызывают интерес как переносчики лекарственных препаратов для адресной доставки к клеткам человеческого организма (искусственный опал является биосовместимым материалам), а также создания искусственной сетчатки глаза. На пути решения этих задач имеется общая проблема, а именно: получения в высокой степени идентичных наносфер; и она пока не решена. Для её решения нужно исследование субглобулярной структуры наносфер при различных условиях их роста. Анализ должен проводится на уровне размеров 1 нм и менее. Поэтому важнейшим инструментом для контроля результатов синтеза является рентгеновское излучение с длиной волны около 0,1 нм и достаточно интенсивное, т. е. область работы установок мегасайенс и был выбран КИСИ. ГФК были получены модифицированным методом Штойбера с естественной седиментацией наносфер. Поверхность наносфер кремнезема исследована с помощью атомно-силовой микроскопии. Все образцы имеют структуру поверхности в форме цветной капусты. Структура фотонных кристаллов изучена методом мало углового рассеяния синхротронного излучения (МУРСИ). На кривых МУРСИ наблюдаются две или три области интенсивности рассеяния. Предложены три оригинальные методики анализа полученных данных. Обнаружена периодичность в зависимости логарифма интенсивности от вектора рассеяния при наименьших волновых числах, связанная с рассеянием в наносферах. Обнаружено влияние молярного соотношения вода/ТЭОС на размеры и концентрацию этих частиц. При низких концентрациях воды 6–8 моль/л наблюдаются два вида частиц: наносферы и субглобулы, а при концентрациях воды 13–23 моль/л – три: наносфера, субглобула и зерно. Оценена морфология найденных частиц.

1. I.I. Yurasova, N.I. Yurasov, et.al., Nanobiotechnology Reports. 19, No. 3(2024)

С 152 Синтез и исследование каталитически активных биметаллических материалов на основе палладия и платины с применением рентгеновской спектроскопии EXAFS и XANES

И.А. Якушев¹, Е.А. Сосунов^{1,2}

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

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

Нанесенные катализаторы на основе палладия и платины широко используются в различных областях промышленных каталитических процессов и тонкого органического синтеза. Для повышения активности и селективности катализаторов часто используют дополнительный металл [1]. Таким образом свойства каталитически активного металла значительно изменяются при его сплавлении с другим элементом [2], а повышение каталитической эффективности также требует максимального увеличения количества активных центров на поверхностях при сохранении их однородности. Биметаллические соединения имеют упорядоченную кристаллическую решетку с фиксированным расположением чередующихся атомов, которые можно рассматривать как перспективные предшественники каталитические наноматериалы с изолированными активными центрами. Синтез таких новых материалов важной задачей в области получения катализаторов, требующих полной характеристики исходных материалов для нанесения, и детального изучения процесса подготовки катализатора. С использованием синхротронного излучения установлены кристаллические структуры (Рис. 1) ряда биметаллических карбоксилатных комплексов $[PtM(OOCMe)_4]$ и исследованы пути термических превращений (Рис. 2), а также изучена активность в реакции парциального гидрирования тройных связей (Рис. 3).

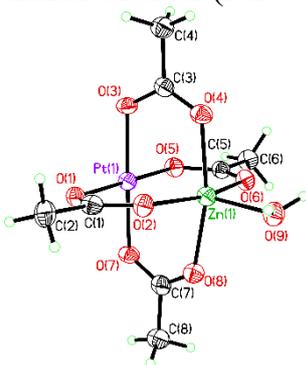


Рис. 1. Строение комплекса $[PtZn(OOCMe)_4]$

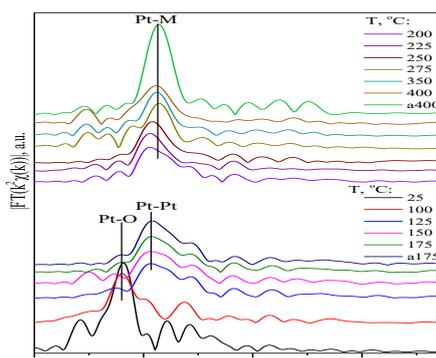


Рис. 2. Данные спектроскопии XAFS *in situ* при термическом разложении $[PtZn(OOCMe)_4]$

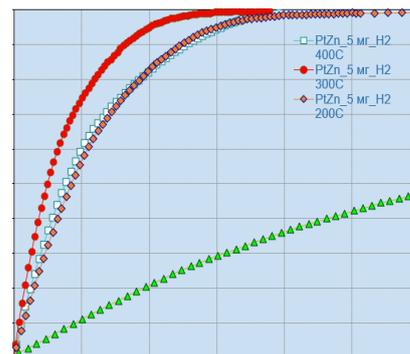


Рис. 3. Поглощение H_2 в реакции гидрирования дифенилацетилена

1. Shinya Furukawa, Takayuki Komatsu, ACS Catal. 7, 1, (2017).
2. Georgios Kyriakou, Matthew B. Boucher, *et al.*, Science 335, 6073, (2012)

Секция 2
Синхротронное излучение и нейтроны для
биологии и наук о жизни

С 201 Синтез и исследование катализаторов на основе новых комплексов титана (IV) с лигандами ОХ-типов в реакции полимеризации олефинов

С.Ч. Гагиева¹, М.Д. Евсеева¹, В.С. Богданов²

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, Москва

Феноксиминные комплексы титана (IV) являются одной из наиболее изученных групп пост-металлоценовых катализаторов реакции полимеризации олефинов. Использование каталитических систем на их основе в качестве катализатора реакции полимеризации этилена позволяет получать полимеры с очень высокой молекулярной массой и узким молекулярно-массовым распределением. Но у подобных катализаторов существует и крупный недостаток: при использовании в качестве сокатализатора алюминийорганических соединений иминный фрагмент молекулы комплекса может вступать в реакцию с ними. Подобные реакции могут приводить к восстановлению или метилированию –C=N- фрагмента с получением другого феноксиминового комплекса [1]. Все это приводит к уменьшению срока существования потенциальной каталитической частицы, непредсказуемому и неуправляемому протеканию процесса полимеризации олефинов. Использование в качестве лиганда комплекса молекулы, в которых нет подобного фрагмента или других фрагментов, способных вступать в подобные реакции: феноксамины, феноксиифиры и фенокситиоэфиры, позволяет обойти эту проблему.

В данной работе синтезированы дихлоридные и диалкоксидные комплексы титана (IV) с феноэфирными и фенокситиоэфирными лигандами. Полученные комплексы исследованы методами ¹H-, ¹³C- ЯМР и РСА.

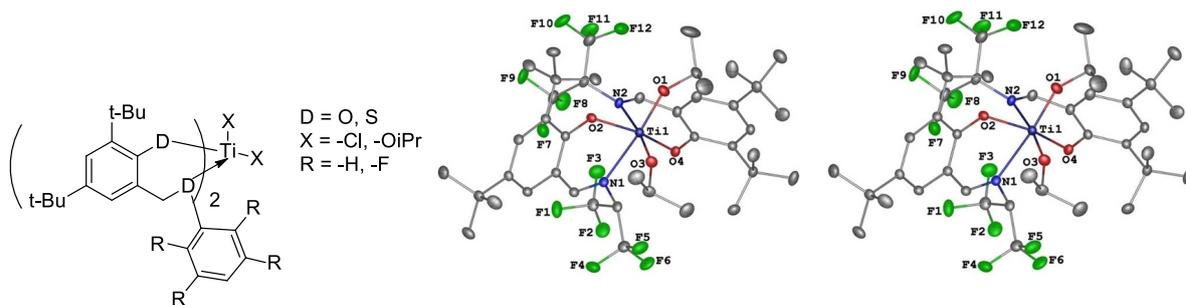


Рис.1. Структура синтезированных комплексов Ti(IV) с лигандами OS-, OO-типа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 23-23-00308.

1. Matsui S., Mitani M., Saito J., Tohi Y., Makio H., Matsukawa N., Takagi Y., Tsuru K., Nitabaru M., Nakano T., Tanaka H., Kashiwa N., Fujita T. A Family of Zirconium Complexes Having Two Phenoxy-Imine Chelate Ligands for Olefin Polymerization. // Journal of American Chemical Society. 2001. Vol. 123. P. 6847-6856.

С 202 Особенности колебательных спектров ибупрофена по результатам комплексных исследований

П.А. Гергележиу¹

¹Филиал МГУ имени М. В. Ломоносова в г. Дубне

Ибупрофен – известный и широко используемый представитель нестероидных противовоспалительных препаратов, входит в перечень жизненно важных лекарственных средств. Структура ибупрофена (Рис. 1) характеризуется наличием хирального центра, а большинство известных лекарственных форм этого соединения в качестве активного фармацевтического ингредиента содержит рацемическую смесь двух (S и R) энантиомеров.

В рамках выполненного исследования рассмотрены следующие аспекты: исследование конформационного пространства ибупрофена в приближении DFT; барьеры внутримолекулярного вращения основных структурных фрагментов ибупрофена; соотношение между экспериментальными [1] и расчетными (BP86/def2-TZVP) значениями для параметров молекулярной геометрии и ключевых частот нормальных колебаний ибупрофена. Обсуждается влияние межмолекулярных взаимодействий в ассоциатах S- и R-энантиомеров ибупрофена на характеристики его колебательных спектров.

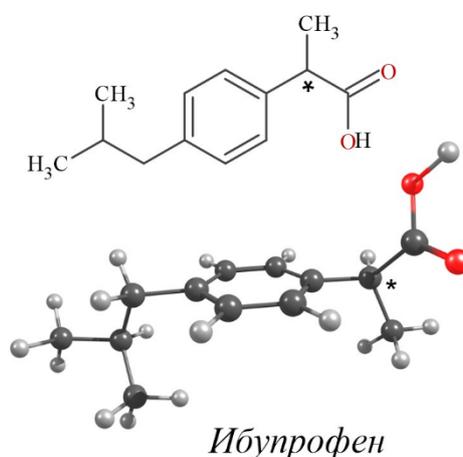


Рис. 1. Химическая структура ибупрофена (* отмечен хиральный центр) и структура его наиболее стабильного конформера, полученная на уровне теории BP86/def2-TZVP

1. K. Logacheva, P. Gergelezhiu, E. Raksha, et al., Phys. Part. Nuclei Lett. 21, 839 (2024)

С 203 Пути формирования кристаллической и надмолекулярной структуры биоминералов CaCO₃, осажденных *V. cereus*

Л.А. Иванова^{1,2}, Г.П. Копица¹, А.Д. Япрынцев³, А.Е. Баранчиков³, Д.В. Лебедев¹,
А.А. Кульминская^{1,2}

¹ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Гатчина

² Курчатовский геномный центр – ПИЯФ, Гатчина

³ Институт общей и неорганической химии им. Курнакова Российской академии наук, Москва

Биоминерализация (БМ) – явление образования минералов живыми организмами – широко распространено в природе. Так во время метаболических реакций с окружающей средой бактерии с уреалитической активностью могут вызывать осаждение CaCO₃ в почве и горных породах, в то время как другие подобные микроорганизмы могут осаждать CaCO₃ с образованием инкрустированных биопленок, которые закупоривают мочевые катетеры, создавая серьезные проблемы в клинической практике [1]. Исследования механизмов БМ важны как для поиска путей ее торможения при решении клинических задач, так и для ее стимулирования при создании новых экологических инженерных технологий [2, 3]. Известно, что кристаллизация CaCO₃ протекает в несколько стадий, в ходе которых аморфная (АКК) фаза последовательно модифицируется в ватерит, затем в кальцит/аргонит, как показано методом FTIR в экспериментах *in situ* без участия бактерий [4]. Однако этот процесс может быть существенно изменен в живой системе бактериальных клеток и синтезируемом ими внеклеточном матриксе (ВКМ). В нашей работе методами SANS, SAXS, FTIR, XRD, SEM и конфокальной микроскопии изучена эволюция структуры осадков CaCO₃, образующихся при биоминерализации, индуцированной планктонной культурой *Bacillus cereus*. Биоминералы, содержащие аморфный CaCO₃ в виде фрактальных агрегатов, обнаруживались уже через 24 часа роста бактерий на среде, богатой Ca²⁺ и мочевиной. В осадке были обнаружены фрактальные кластеры размером в сотни ангстрем и фрактальной размерностью около 2,7. Трансформация полиморфов CaCO₃ проходила по пути АКК-ватерит-кальцит/арагонит в течение 14 суток и сопровождалась значительным увеличением характерных размеров фрактальных кластеров, а также уплотнением их структуры. Совместная локализация преципитатов CaCO₃ с компонентами ВКМ, а именно внеклеточной ДНК, была показана с помощью конфокальной микроскопии с флуоресцентным окрашиванием.

1. Yuan F., Huang Z., Yang T., Wang G., Li P., Yang B., Li J. 2021 Pathogenesis of *Proteus mirabilis* in Catheter-Associated Urinary Tract Infections. *Urol Int* 105:354-361.

2. Dhami N.K., Reddy M.S., Mukherjee A. 2014. Application of calcifying bacteria for remediation of stones and cultural heritages. *Front Microbiol* 5.

3. Le Métayer-Levrel G., Castanier S., Oriol G., Loubière J.-F., Perthuisot J-P. 1999. Applications of bacterial carbonatogenesis to the protection and regeneration of limestones in buildings and historic patrimony. *Sediment Geol* 126:25–34.
4. Meng Cheng, Shengtong and Peiyi Wu 2019. Microdynamic changes of moisture-induced crystallization of amorphous calcium carbonate revealed via in situ FTIR spectroscopy. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21: 21882-21889.

С 204 Анализ структуры дисперсий (био)полиэлектrolитных комплексов на основе хитозана и желатина с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния синхротронного излучения

М.Ю. Литвинов¹, А.И. Каширин¹, А.В. Подшивалов¹

¹ *Университет ИТМО*

В настоящее время большой научный интерес представляют (био)полиэлектrolитные комплексы ((био)ПЭК) на основе хитозана и желатина ввиду их высокого потенциала для разработки доступных и эффективных носителей лекарственных препаратов. Такие комплексы в зависимости от степени ионизации противоположно заряженных ионогенных групп в результате полиэлектrolитного взаимодействия могут формировать как растворимые нестабильные частицы, так и нерастворимые коацерваты. Данные особенности самосборки (био)ПЭК отражают сложную структуру их дисперсий, которая зависит от значений рН и баланса зарядов в системе. При этом особое внимание при разработке современных систем доставки лекарств на основе (био)ПЭК между хитозаном и желатином следует уделить изучению первичных субмолекулярных структур.

В ходе работы с помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) была изучена структура первичных (био)ПЭК в смесях растворов хитозана и желатина при варьировании значений рН и соотношений ионизированных групп полимеров. Исследования проводили в Курчатовском центре синхротронного излучения на станции «БиоМУР» [1].

Было установлено, что в смесях растворов хитозана и желатина при значениях рН выше изоэлектрической точки (ИЭТ) желатина происходит изменение характера кривых рассеяния в отличие от исходных растворов полимеров и их смесей при рН ниже ИЭТ. Данное изменение проявлялось в увеличении значений нулевого вектора интенсивности в среднем в 3 раза. Анализ функций парных расстояний дисперсий (био)ПЭК показал, что при рН выше ИЭТ и соотношении ионизированных групп $z > 0,29$ происходит увеличение значений максимального диаметра рассеивающих частиц в среднем с 50 до 110 нм. Также наблюдалось изменение формы частиц первичных (био)ПЭК со сплюснутой сферической на вытянутую стержнеобразную, что связано с эффективным процессом полиэлектrolитного взаимодействия макромолекул полимеров при выбранных условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1349).

1. G. S. Peters, et al., Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip. 1025 (2022).

С 205 Исследование взаимодействия S-белка коронавируса с изолированными моделями клеточных мембран

*В.Р. Самыгина¹, А.В. Власкина¹, Е.Б. Пичкур¹, Д.Н. Щербаков², Е.Д. Мордвинова²,
Е.А. Волосникова², Ю.Н. Малахова^{1,3}, К.В. Николаев^{1,4}, А.В. Рогачев¹,
Н.Е. Малышева¹, Н.Н. Новикова¹, М.В. Ковальчук¹*

¹НИИЦ “Курчатовский институт”, Москва

²Государственный научный центр вирусологии и биотехнологии “Вектор”, Кольцово

³МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва

⁴Московский физико-технический институт, Москва

Проведены исследования взаимодействия эктодомена белка-шипа коронавируса человека с фосфолипидными монослоями, сформированными на поверхности водной субфазы. Изучали изменения молекулярной организации монослоев нейтральных фосфолипидов – фосфатидилхолин (DPPC) и фосфатидилэтаноламин (DPPE) – после введения под монослой раствора белка. В экспериментах применяли рекомбинантный эктодомен S-белка, полученный с использованием клеточной линии CHO-K1. Данные электронной микроскопии показали, что S-белок тримеризован. С помощью метода двумерной дифракции изучали влияние тримера эктодомена S-белка на структуру монослоя DPPC. Установлено, что после введения белка нарушения кристаллической структуры монослоя не происходит. Для монослоев обоих фосфолипидов были проведены измерения методом изотерм сжатия. Суммируя полученные результаты, можно сделать заключение, что для изученных фосфолипидов взаимодействие с S-белком не приводит к дестабилизации монослоя. Кроме того, в обоих случаях после введения раствора S-белка наблюдалось изменение в релаксационном поведении монослоя, причем для монослоя DPPE эти изменения были более заметны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение от 12.10.2021 № 075-15-2021-1355) в рамках реализации отдельных мероприятий ФНТП развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 гг.

С 206 Определение относительной биологической эффективности в зависимости от ЛПЭ и дозы при облучении мышей протонами с энергией 100 МэВ

*Н.С. Стрельникова¹, В.Е. Балакин¹, О.М. Розанова², Т.А. Белякова^{2,3},
Е.Н. Смирнова², А.Е. Шемяков^{1,2}*

¹ Филиал “Физико-технический центр” Физического института им. П. Н. Лебедева РАН,
Протвино

² Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пуцдино

³ Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова НИЦ “Курчатовский институт”,
Протвино

Определение величины относительной биологической эффективности (ОБЭ) протонов с разными ЛПЭ в различных диапазонах доз является важной задачей для их оптимального использования для радиотерапии рака и оценки радиационных рисков при полетах в дальний космос. Основной проблемой при исследовании действия ускоренных частиц на организм является зависимость величины ОБЭ от многих факторов, как биологического характера, так и физико-технических характеристик облучения.

Целью работы являлось определение ОБЭ протонов в различных областях кривой Брэгга в области малых, средних и высоких доз относительно рентгеновского излучения при облучении мышей и опухолевых клеток.

ОБЭ в области малых и средних доз изучали на мышах линии SHK при облучении тонким сканирующим пучком протонов до пика Брэгга (ЛПЭ ~0.7 кэВ/мкм) и в пике Брэгга (ЛПЭ ~2.5 кэВ/мкм) в диапазоне доз 0.1–1.5 Гр с помощью микроядерного теста. Для изучения действия высоких доз мышей облучали протонами в дозах 4.5–15 Гр в тех же областях кривой Брэгга (ЦКП «Прометеус», ФИАН). Для определения ОБЭ протонов по критерию прививаемости опухолей мышам клетки асцитной карциномы Эрлиха облучали протонами в пике Брэгга в диапазоне доз 30–90 Гр. Параллельно мышей подвергали тем же дозам рентгеновского излучения (2 кэВ/мкм).

Значение ОБЭ для протонов в диапазоне 0.1–1.5 Гр, вычисленное по уровню цитогенетического повреждения в клетках костного мозга мышей, в пике Брэгга равнялся 1.15, а до пика Брэгга – 0.63. Величина ОБЭ, определенная по критерию 30-ти суточной выживаемости мышей в диапазоне доз 4.5–15 Гр, в пике Брэгга составила 0.94, а до пика – 0.86, что соответствует большинству результатов, полученных при облучении *in vitro* клеточных культур аналогичными дозами схожих по физическим характеристикам пучков протонов. ОБЭ в области доз 30–90 Гр в пике Брэгга, рассчитанное по критерию 90-суточной индукции опухолей у мышей, составило 0.72. Показано, что в области малых и средних доз протонов величина ОБЭ зависит от ЛПЭ, а с увеличением дозы этого не наблюдается.

С 209 Влияние поверхностей, несущий пробу гибридного материала «клетки млекопитающих – наночастицы кремния» на исследования синхротронным методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

*С.С. Титова¹, Л.А. Осминкина², Ю.С. Какулия¹, Р.Г. Чумаков³, А.М. Лебедев³,
А. А. Кудрявцев⁴, Е.В. Паринава¹, О.А. Чувенкова¹, С.Ю. Турищев¹*

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва

⁴ Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пуцино

Исследования гибридных материалов методами чувствительными к изменениям развитой поверхности внедряемых наноразмерных объектов представляет особый интерес в мировой науке. Такие материалы при нормальных условиях являются жидкофазными. При внесении в вакуум, который необходим для достижения точности исследований, материал клеток становится источником загрязнений. По этой причине биогрибридные объекты нуждаются в специальной пробоподготовке при проведении высокоточных исследований с использованием сверхвысоковакуумных установок.

Немаловажную роль в технологиях и исследованиях, связанных с гибридными объектами, играет выбор материала поверхности подложки, который должен быть инертен по отношению к биологическим процессам, происходящим в биогрибридном материале, и, кроме того, должен быть пригоден для набора специфических требований высокоточных методов, в том числе метода XPS. Выбор материала подложки для сверхвысоковакуумных исследований является актуальной и важной задачей.

Образцы для данной работы были получены в результате интеграции суспензии наночастиц пористого кремния в клеточные культуры 3T3 NIH (фибробласты мыши) на различных подложках. Клеточная культура 3T3 NIH была выращена на различных по составу поверхности подложках (никель, золото и титан), после чего в нее интегрировали суспензию наночастиц кремния. Спустя 72 часа для клеточной культуры на золоте и никеле, 48 часов для клеточной культуры на подложке титана, рост клеток останавливался, питательная среда вымывалась, клетки фиксировались формальдегидом, который удалялся с поверхности образцов после закрепления.

Результаты XPS исследований показали неоднозначность определения энергий связи кремния в случае подложки из золота. В случае использования поверхности никеля показана существенная фрагментация биогрибридного материала, значительное его отслаивание. Наилучшим образом показала себя поверхность титана. Помимо хорошей адгезии, качественного и количественного распределения клеточной культуры по поверхности подложки, наблюдается четкая дифференциация линий (оксида) титана (Ti 3p, Ti 3s) и кремния (Si 2p, Si 2s), что не препятствует дальнейшей идентификации состава и структуры

наночастиц кремния внедренных в клеточную культуру методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высокого разрешения.

Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-135.

Секция 3
Электронная микроскопия

С 301 Особенности атомного строения аморфной фазы политетрафторэтилена (ПТФЭ) по данным электронной дифракции

А.С. Авилов, А.К. Кулыгин, Н.В. Садовская

НИЦ "Курчатовский институт", Москва

Неутихающий интерес к изучению политетрафторэтилена обязан комплексу его уникальных свойств. ПТФЭ - высокомолекулярный продукт полимеризации тетрафторэтилена C_2F_4 , состоящий из длинных полимерных цепей $\dots-CF_2-\dots$. Он химически инертен по отношению к большинству агрессивных сред. У него одна из самых низких среди всех известных твердых тел поверхностная энергия. Это один из наиболее термостойких полимеров. ПТФЭ – частично кристаллический полимер, в котором кристаллическая и аморфная фазы находятся в состоянии равновесия. Кристаллическая фаза обуславливает относительно высокую температуру плавления ($\sim 327^\circ C$), а аморфная - обеспечивает эластичность и низкую температуру хрупкости.

В работе получена тонкая пленка чисто аморфной фазы ПТФЭ (Ф4Д) из суспензии путем спекания и исследована ее атомная структура электронографическим методом. Измерения проведены на разработанном авторами прецизионном электронном дифрактометре при ускоряющем напряжении 100 кВ. Проведена полная запись всего эксперимента в реальном времени с последующим анализом качества и выявлением помех. К полученной электронограмме применена ранее разработанная авторами методика [1] анализа аморфных структур, основанная на определении коэффициента нормировки путем варьирования теплового параметра. Полученное из функции радиального распределения значение первого координационного числа $n_1 \approx 2$ (атома) соответствует структуре полимерной цепи $\dots-CF_2-\dots$ при учете в качестве первой координационной сферы атомов, связанных ковалентной связью с данным атомом. Выявлены характерные расстояния, соответствующие структуре макромолекулы (полимерной цепи) ПТФЭ спиралевидной конформации 15/7 и гексагональной кристаллической укладке таких цепей. Такие особенности объясняются отклонением структуры фторопласта от классической аморфной структуры и ее нетривиальным поведением в процессах термического расширения/сжатия.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ “Курчатовский институт”.

1. Васин О.И., Кулыгин А.К., Новикова В.В., Авилов А.С. // Кристаллография. 2019. Т. 64. № 5. С. 732.

С 302 Микроструктура микронных и субмикронных частиц ватерита по данным 3D ФИП томографии

В.В. Артемов¹, В.И. Бондаренко¹, Д.Б. Трушина¹

¹ Курчатовский Комплекс кристаллографии и фотоники (КККиФ) НИЦ «Курчатовский институт»

Так называемый метод 3D ФИП томографии активно развивается последние 30 лет [1,2]. Благодаря техническим достижениям, различными фирмами были созданы коммерческие серийные приборы с высоким разрешением, стабильным программным обеспечением, позволяющим в автоматическом режиме получать отдельные слайсы с шагом в единицы нанометров. Следует отметить, что ФИП-томография применяется к широкому кругу объектов – от микроэлектроники до живых клеток и полимерных материалов.

Карбонат кальция в форме ватерита активно используется в качестве разлагаемой матрицы для эффективного инкапсулирования и доставки биологически активных молекул. Платформы доставки на основе ватерита продемонстрировали многочисленные преимущества, такие как высокая эффективность загрузки благодаря пористой структуре частиц и их развитой поверхности, высокая механическая стабильность и биосовместимость [3,4]. Следует отметить, что до настоящего времени нет работ по получению трёхмерной модели данных частиц. В работе [5] показаны единичные срезы и просвечивающая электронная микроскопия.

В настоящей работе была впервые описана трёхмерная микроструктура микронных и субмикронных частиц ватерита с помощью послойной резки сфокусированным ионным пучком галлия (рис.1). Была произведена сегментация пространства пор, получены данные о связности пор, их структуре, относительного объема.

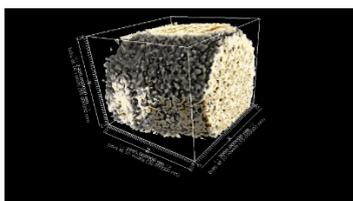


Рис. 1. Изображение 3D модели матрицы микрочастицы ватерита.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования ЦКП.

1. Tetsuo SAKAMOTO, Zhaohui CHENG, et al. The Japan Society of Analytical Chemistry .Vol. 47, No. 6, pp. 313-319 (1998)
2. Diego Roldán , Claudia Redenbach , et al., Ultramicroscopy 226 (2021) 113291
3. Vikulina A., Webster J., et al... Mater. Des. 197, 109220. (2021)
4. Daria Trushina, Tatyana Borodina, et al., Belyakov Sergei. Mater. Today Adv. 14 (2590-0498), 100214. (2022).
5. Roman E. Noskov, Andrey Machnev, et al., Adv. Mater. 2021, 33, 2008484

С 303 Применение матрицы анодированного оксида алюминия для синтеза наноструктур SmS

Е.Б. Баскаков, С.И. Супельняк, Д.Н. Хмеленин

НИЦ “Курчатовский институт”

Пористые структуры анодированного оксида алюминия (АОА), полученные электрохимическим анодированием чистого алюминия, могут использоваться в качестве матриц для контролируемого формирования наноструктур с качественным изменением свойств используемых материалов [1]. В представленной работе [2] рассмотрены особенности процесса осаждения сульфида самария (SmS) в поры АОА. SmS известен своим изоструктурным фазовым переходом полупроводник-металл, возникновением термоЭДС без принудительного создания градиента температуры (термовольтаическим эффектом) и другими свойствами с перспективами практического применения [3].

Матрицы из АОА с диаметром пор 40 – 140 нм и 60 – 210 нм были изготовлены анодированием алюминия двухэтапным методом. С применением СЭМ и сервиса распознавания одноптипных объектов DLgram представлена статистика распределения оксидных ячеек и пор матриц по диаметру, за счёт чего было установлено, что увеличение времени травления привело к росту статистического максимума среднего диаметра пор от 108 до 155 нм. Методом магнетронного распыления получены наноструктуры SmS, образовавшиеся в порах матриц АОА на среднюю глубину 120 нм. Предположено образование проводящего канала в виде тонкого слоя SmS, соединяющего наноструктуры SmS и барьерный слой АОА. Измерено сопротивление наноструктур SmS в матрице АОА с Ni металлизацией, которое составило 23 и 22 Ом.

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

1. G. D. Sulka. Nanostructured materials in electrochemistry, (2008).
2. Е.Б. Баскаков, С.И. Супельняк, Д.Н. Хмеленин. ЖТФ, 94, 10 (2024).
3. A. Sousanis, P. F. Smet, D. Poelman. Materials, 10, 8 (2017).

С 304 Фуллеренизация алмаза при облучении электронным пучком в колонне ПЭМ

М.А. Березин, А.А. Зайцев, Б.Ю. Романенко, П.А. Логинов

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) *in situ* в сочетании с дифракционным анализом является мощным инструментом для изучения динамических изменений микроструктуры материалов при нагреве. Данный инструментарий позволяет получать важную информацию для разработки передовых материалов с улучшенными свойствами.

В условиях наблюдения в электронный микроскоп сильное облучение по своему воздействию на структуру углерода напоминает высокотемпературный режим.

В ходе исследования композитной ламели алмаз-FeCoCrNiTi при 700 °С методом ПЭМ мы в реальном времени наблюдали стремительное изменение структуры алмаза на границе с металлом при облучении электронным пучком. Нами был задокументирован процесс графитизации алмаза с четко видимым центром зарождения, сопровождающийся образованием наноразмерных структур, напоминающих фуллереновые волокна. Фуллеренизация алмаза при облучении электронным пучком в ПЭМ – редкое явление, возникающее вследствие перестройки структуры алмаза под действием энергии электронного луча. Сходный процесс - графитизация аморфного углерода в колонне ПЭМ, был продемонстрирован Ugarte [1]. Поглощение энергии образцом при облучении приводит к разрыву связей вследствие возбуждения электронов. Кроме того, частицы с высокой энергией могут передавать импульс ядрам, перемещая нокаутированные электронным пучком атомы в промежуточные узлы решетки. Такие условия могут быть реализованы путем электронной бомбардировки в ПЭМ [1, 2]. Как следствие, при благоприятных условиях можно в реальном времени наблюдать изменения тонкой структуры образца вплоть до мельчайших деталей. Последующий дифракционный анализ позволил нам получать информацию об изменениях состава композита в динамике.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (Соглашение № 22-79-10144).

1. D. Ugarte, Nature. 359, 707– 709 (1992). Curling and closure of graphitic networks under electron-beam irradiation.

2. V. V. Roddatis, V. L. Kuznetsov, et. al., Phys. Chem. Chem. Phys. 4, 1964–1967 (2002). Transformation of diamond nanoparticles into carbon onions under electron irradiation.

С 305 Изменение поверхностных наноструктур на основе Ge-Co-In при использовании в литий-ионных аккумуляторах

Р.Л. Волков¹, И.М. Гаврилин², И.С. Маринкин¹, Н.И. Боргардт¹

¹ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

² *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН*

Литий-ионные аккумуляторы получили широкое распространение благодаря сочетанию высокой электроемкости и малым размерам. Одним из путей их дальнейшего совершенствования является применение электродов на основе перспективных наноматериалов, к которым относятся наноструктуры на основе германия, формируемые каталитическим методом из раствора.

В настоящей работе выполнены электронно-микроскопические исследования наноструктур Ge-Co-In, выращенных на поверхности Ti фольги, до и после 25 и 60-тикратного внедрения и экстракции Li в электрохимической ячейке. Их тонкие фольги поперечного сечения приготавливались методом фокусированного ионного пучка, а изучение осуществлялось на просвечивающем электронном микроскопе Titan Themis 200.

На поверхности исходного образца (рис. 1а) располагались наночастицы кристаллического Ge с тонким слоем In. Сверху них имелись древоподобные образования из α -CoGe₂, окруженные оболочкой из α -GeO₂. Многократные циклы внедрения и экстракции Li (рис. 1б, 1в) привели к преобразованию описанной исходной наноструктуры в сеть, состоящую из нанонитей α -CoGe₂ и расположенную внутри слоя с продуктами электрохимических реакций, которые содержали кристаллические наночастицы Li₂CO₃.

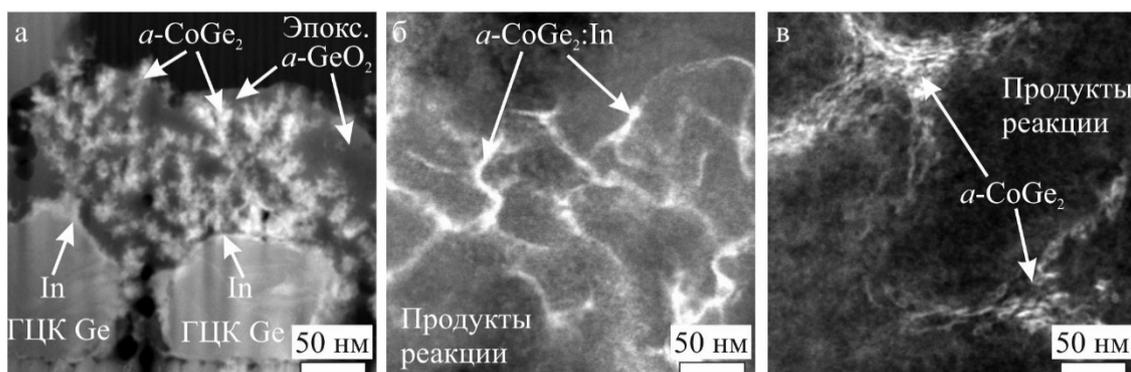


Рис. 1. ПРЭМ-изображения наноструктур на основе Ge-Co-In до внедрения Li (а) и после 25 (б) и 60 (в) циклов внедрения и экстракции Li в электрохимической ячейке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10312).

С 306 Свойства покрытий Al_2O_3-AlN , формируемых при воздействии электродуговой азотной плазмы

И.С. Волчков, А.Э. Муслимов, А.В. Буташин, В.М. Каневский

Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники Национального исследовательского центра “Курчатовский институт”, Москва

Методами растровой электронной микроскопии (РЭМ), рентгенофазового анализа (РФА), энергодисперсионной спектроскопии (ЭДС) и измерения микротвердости исследованы свойства покрытий AlN , формируемые при воздействии электродуговой азотной плазмы по методике, описанной в [1,2].

Определена связь исходного порошка алюминия с фазовым составом и свойствами покрытий. Обнаружено, что покрытия, полученные из исходных порошков крупной фракции ($d \approx 20 - 100$ мкм) Al , практически полностью состоят из Al . Покрытия, полученные из исходных порошков мелкой фракции ($d \approx 20 - 100$ нм) Al представляют собой уже неоднородную структуру, состоящую из матрицы Al_2O_3 со значительными областями фазы AlN . РФА-исследования подтверждают результаты РЭМ и ЭДС: образцы, полученные из исходного порошка крупной фракции, имеют одну фазу Al , в то время как образцы, полученные из исходного порошка мелкой фракции, обладают превалирующей фазой Al_2O_3 со значительными рефлексами фазы AlN и незначительными рефлексами, соотносимыми с фазой Al_5O_6N . В процессе измерения микротвердости (Н) методом индентирования было обнаружено, что наибольшей Н обладали фазы Al_2O_3 и $AlN \sim 9.097 \pm 0.324$ ГПа и 17.800 ± 0.674 ГПа, соответственно. Полученные результаты демонстрируют перспективность нанесения покрытий Al_2O_3-AlN с использованием низкотемпературной плазмы для повышения эксплуатационной стойкости стальных конструкций.

Работа проведена в рамках государственного задания НИЦ “Курчатовский институт” с использованием оборудования ЦКП “Структурная диагностика материалов” Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт».

1. A. Muslimov, et al., *Metals*, **13**, 1927 (2023).
2. Э.Х. Исакаев, и др., *Теплофизика высоких температур*, **48**(1), 105-134 (2010).

С 307 Определение параметров доменной структуры монокристаллов $RFe_{11}Ti$ по данным магнитно-силовой микроскопии

А.М. Гусева, А.И. Синкевич, С.Д. Сметанникова, Е.М. Семенова

Тверской государственный университет

Соединения типа $RFe_{11}Ti$ (R–редкоземельный металл) с большим содержанием железа характеризуются высокой намагниченностью насыщения, большими значениями констант магнитокристаллической анизотропии и температурой Кюри. Поэтому в ряде исследований эти составы рассматриваются как перспективные материалы для постоянных магнитов [1]. Для всестороннего анализа процессов перемагничивания и оценки возможного поведения этих соединений в составе порошковых магнитов или гетерогенных композитов необходимо знать их микромагнитные характеристики. В связи с этим актуальной является экспериментальная методика анализа доменной структуры одноосных магнетиков, которая позволяет определить их поверхностную плотность энергии доменных границ (γ) [2].

В работе представлены результаты экспериментального исследования магнитной доменной структуры на базисной плоскости монокристаллов $RFe_{11}Ti$ (R=Y, Gd, Ho, Er). При комнатной температуре соединения характеризуются магнитокристаллической анизотропией типа «ось легкого намагничивания». Исследования выполнены методом магнитно-силовой микроскопии на СЗМ SolverNext. Особенностью исследования является то, что метод Боденбергера-Хуберта, применяемый для вычисления γ на основе анализа МСМ-изображений, изначально разработан и апробирован для изображений доменов, полученных средствами оптической микроскопии [2]. МСМ регистрирует поля рассеяния доменной структуры, поэтому для того, чтобы определить ширину самих доменов на основе топографии их полей рассеяния, МСМ-изображения регистрировались на серии высот с последующей аппроксимацией плотности структуры на поверхность шлифа.

На основе данных МСМ были определены параметры дополнительных доменов на базисной плоскости образцов и рассчитана γ . Установлено, что величина поверхностной плотности энергии доменных границ γ для рассматриваемых составов варьируется в диапазоне 2,98 – 5,93 мДж/м².

Также в работе выполнен анализ фрактальной размерности (D_L) доменной структуры всех образцов. Показано, что D_L доменов имеет значения 2,62 для соединений с R = Y, Gd, Ho и 2,72 – для R = Er.

1. G.C. Hadjipanayis, A.M. Gabay, A.M. Schönhöbel et al., Engineering. 6 (2020).
2. Hubert, A., Schäfer, R. Magnetic Domains. (1998). Springer, Berlin, Heidelberg.

С 308 Анизотропная проводимость металлполимерных композитов полученных методом матричного синтеза

И.М. Долуденко¹, И.С. Волчков¹, Д.Р. Хайретдинова¹, В.М. Каневский¹

*¹ Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

В настоящее время активно развиваются различные композитные материалы. Основное их преимущество заключается в возможности сочетания свойств компонентов входящих в их основу. Одним из таких материалов являются проводящие металлполимерные нанокомпозиты. Существуют различные методы получения подобных материалов. В данной работе рассматривался метод получения подобных композитов на основе электрохимического заполнения пор трековых мембран. Уникальная для данного метода возможность изменение положения наноструктур в полимере и их строгой фиксации дает возможность контролируемого изменения проводимости итогового композита, в том числе с модулируемой анизотропией электрических свойств. Подобные материалы могут быть применены в качестве элементов устройств гибкой микро- и нанoeлектроники, различных датчиков и устройств на основе спиновых эффектов.

Принцип возникновения проводимости в подобных структурах основан на формировании проводящей цепи из нанопроволок в поровых каналах матрицы. Угол наклона и ось наклона пор будет определять в таком случае степень анизотропной проводимости, а длина нанопроволок и общая геометрия матрицы - общую проводимость композита.

В работе матрицы из ПЭТФ с углом отклонения от нормали $\pm 30^\circ$ по одной оси и $\pm 0,5^\circ$ по второй оси заполнялись сплавом FeNi по составу приближенному к пермалою. Методом РЭМ исследовались массивы получаемых нанопроволок. Были подтверждены отклонения углов от нормали оси роста в обоих направлениях. Общий вид массивов подтвердил формирование короткой проводящей цепи вдоль плоскости с наибольшим углом отклонения нанопроволок. Исследование длин нанопроволок показало прямую зависимость длин нанопроволок и с проводимости всей системы от времени роста.

Установлено, что электрические свойства обладают ярко выраженной анизотропией. Данная зависимость также зависит от длин нанопроволок.

Работа проведена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт»

С 309 Применение ионной жидкости в сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии

А.В. Дудиловская, А.И. Иванова, О.Е. Журавлев, Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет

При изучении микроструктуры непроводящих образцов методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) исследователи часто сталкиваются с проблемой образования поверхностного статического заряда, способствующего искажениям контраста изображений, дефокусировке и ошибкам при проведении количественного микроанализа. Основными приемами для решения этой проблемы являются использование режима низкого вакуума и напыление слоя металлического покрытия на поверхность образца. Использование ионной жидкости, как средства пробоподготовки биологических объектов, описано в ряде научных работ [1-2]. Непроводящая поверхность, рассматриваемая с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ), не требует нанесения проводящего металлического покрытия, однако проблема накопления поверхностного заряда существует, в частности, при работе АСМ в режиме силовой микроскопии пьезоотклика, когда на проводящий зонд подается переменное электрическое поле.

Цель настоящей работы – проведение испытаний по применению ионной жидкости в качестве электропроводящего покрытия для диэлектрических образцов при их исследованиях методами СЭМ и АСМ. Ионные жидкости комнатной температуры (ИЖКТ) на основе дицианамидов N-алкилпиридиния, изученные в работе, обладают высокой ионной проводимостью и антистатической природой, что дает возможность рассматривать их как альтернативу методам металлического и углеродного напыления на диэлектрические образцы. Эксперименты были проведены на кристаллических образцах, биологических объектах, образцах керна, сегнетокерамики, порошков с помощью электронного микроскопа JEOL 6610 и атомно-силового микроскопа NanoEducator II.

Установлено, что использование ИЖКТ, обладающей термической и химической стабильностью, дает возможность получать СЭМ-изображения с высоким разрешением, а также позволяет визуализировать топографический и композиционный контраст исследуемых диэлектрических образцов. В случае АСМ нанесение ионной жидкости на образец уменьшает заряд на исследуемой поверхности, затрудняющий подвод зонда к поверхности и увеличивающий шумовую составляющую измеряемого сигнала, что особенно важно для режима силовой микроскопии пьезоотклика.

1. L.A. DiCecco, A. D'Elia, C. Quenneville et al. *Micron*. 153, 103192 (2022).
2. O.E. Zhuravlev, A.I. Ivanova, R.M. Grechishkin. *J. Surf. Invest. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 9, 5 (2015).

С 310 Структура композитов на основе пористых пленок PZT

О.М. Жигалина^{1,2}, Д.Н. Хмеленин¹, А.В. Атанова

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

В последнее время пленки из пористой сегнетоэлектрической керамики привлекают все большее внимание, например, за их способность сохранять трещиностойчивость при значительной толщине, что важно для производства пьезоэлектрических микроэлектромеханических систем (MEMS). Уменьшение диэлектрической проницаемости при образовании пор обеспечивает лучшую добротность пьезоэлектрических детекторов, а заполнение пор другим материалом можно использовать для создания различных композитных структур. Новый подход к получению сегнетоэлектрических композитных пленок был успешно разработан путем объединения золь-гель синтеза пористых пленок цирконата титаната свинца (PZT) [1] с атомно-слоевым осаждением (ALD) титана. Процесс порообразования, в котором используется поверхностно-активное вещество типа Brj, способствует образованию крупных столбчатых зерен перовскита с узкими (~20 нм) взаимосвязанными порами, при этом ALD, обеспечивает равномерный рост оксида титана в порах по всей толщине пленки, что продемонстрировано с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Полученные композитные пленки PZT-TiO_x демонстрируют выраженный фотовольтаический ток при освещении видимым светом. Значение фототока изменяется в зависимости от направления поляризации. Такое поведение представляет собой потенциальный метод управления фотопроводимостью посредством поляризации с возможным применением в электронных и фотонных устройствах.

1. Atanova AV, Zhigalina OM, Khmelinin DN, Orlov GA, Seregin DS, Sigov AS, et al. Microstructure analysis of porous lead zirconate–titanate films. *J Am Ceram Soc.* 2021;00:1–14. <https://doi.org/10.1111/jace.18064>

С 311 Определение толщины наноразмерных поликристаллических слоев в гетерокомпозициях методом просвечивающей электронной микроскопии

Г.С. Киреев, А.С. Приходько, Н.И. Боргардт

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Многослойные гетерокомпозиции применяются в микроэлектронике для изготовления интегральных микросхем, фотошаблонов и др. Одной из задач, возникающих при измерении толщины слоев в таких композициях, является определение положений межслойных границ. В настоящей работе разрабатывался подход к прецизионному выявлению границ между поликристаллическим и аморфными маскирующими слоями фазосдвигающего фотошаблона на основе изображений просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ), полученных на приборе FEI Titan Themis 200.

На исходном ПРЭМ-изображении (Рис. 1а) пунктиром отмечен исследуемый поликристаллический слой. На профиле интенсивности (Рис. 1б), построенном для выделенного вертикального сегмента, границы этого слоя должны располагаться на участке монотонного снижения интенсивности вблизи точек перегиба графика (стрелки на Рис. 1б). Для точного выявления положения границ фурье-образ изображения умножался на функцию полосового частотного фильтра Баттерворта, пропускающего частоты в пределах светлого кольца (вставка на Рис. 1в). Его радиусы выбирались так, чтобы выделить область фурье-образа, соответствующую кристаллическим зернам. После фильтрации их интенсивность на изображении существенно увеличилась, а примыкающих аморфных слоев – уменьшилась (Рис. 1в).

На профиле интенсивности, построенном для изображения после фильтрации (Рис. 1г), светлым кристаллитам соответствует пик в его правой части. Для сглаживания локальных перепадов интенсивности полученный пик аппроксимировался суммой двух функций Гаусса, и координаты границ слоя определялись на половине его высоты (стрелки на Рис. 1г). Разработанный подход позволил измерить толщину слоя, которая составила $(14,56 \pm 1,28)$ нм.

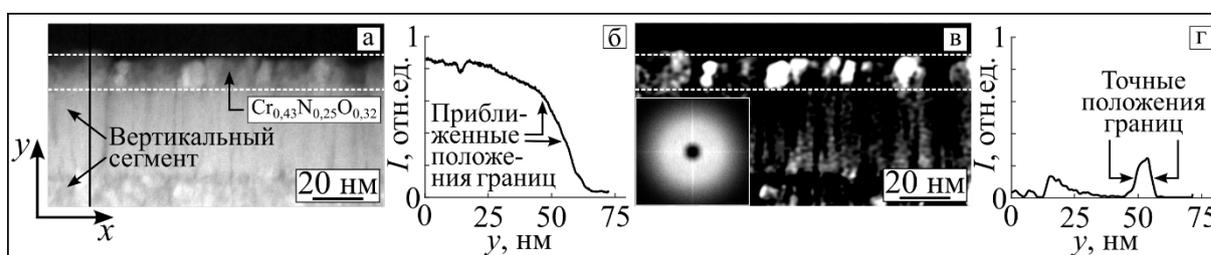


Рис. 1. ПРЭМ-изображение маскирующих слоев до (а) и после (в) частотной фильтрации и соответствующие усредненные профили интенсивности (б, г)

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания (Рег. номер FSMR-2024-0013).

С 312 Фотополимеризация пленок Ленгмюра–Шефера симметричных молекул диинových *N*-арилкарбаматов с различным количеством СН₂ групп в спейсерах

В.В. Клечковская³, А.С. Алексеев¹, С.Ю. Вязьмин², А.Б. Иванов¹, М.С. Лукасов³

¹ Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет им. Ж. И. Алферова РАН

³ "Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова" Курчатковского Комплекса «Кристаллография и фотоника», НИЦ Курчатровский Институт

Проблема получения стабильной голубой фазы (особенно для спиртовых производных ДА) существовала на протяжении многих лет. Недавние исследования пленок ЛШ спиртовых производных несимметричных диинových *N*-арилкарбаматов позволили обнаружить переход под действием УФ света бесцветных пленок молекул мономеров в ПДА пленки красной, пурпурной и голубой фазы.

В настоящей работ изучались процессы фотополимеризации мономолекулярных пленок диинových *N*-арилкарбаматов с симметричной структурой молекулы, когда на концах находились метоксигруппы. При этом отличались молекулы только количеством метиленовых групп (спейсеров). Цель работы – это создание мономолекулярных пленок диинových *N*-арилкарбаматов с симметричным строением молекул $\text{MeOC}_6\text{H}_4\text{NH}(\text{C}=\text{O})\text{O}(\text{CH}_2)_n\text{C}\equiv\text{CC}\equiv\text{C}(\text{CH}_2)_n\text{O}(\text{C}=\text{O})\text{NHC}_6\text{H}_4\text{OMe}$ и изучение изменений их спектральных и структурных характеристик в результате фотоиндуцированного перехода пленок ДА в ПДА пленки в зависимости от количества СН₂ групп в составе молекул ДА *n*3-3, *n*6-6 и *n*9-9. Пленки диинových на твердых подложках полимеризовались излучением ртутной лампы низкого давления (Philips, $\lambda_{\text{max}} = 254$ нм). Спектры поглощения измерялись как до, так и после каждого сеанса УФ воздействия на образец. Морфология поверхностей монослойных пленок, перенесенных на кремниевые подложки, изучалась с помощью метода сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием автоэмиссионного сканирующего двухлучевого электронно-ионного микроскопа FEI Scios (Thermo Fisher Scientific, США). Обнаружены важные фундаментальные свойства этих соединений, которые могут оказаться полезными для их практического использования.

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

С 313 Применение растровой электронной микроскопии для изучения микротрещин и субмикронных частиц горных пород

А.Н. Кочанов¹, И.Ж. Бунин¹

¹*Институт проблем комплексного освоения недр им. академика Н.В. Мельникова РАН*

Методы растровой электронной микроскопии (РЭМ) активно используются для исследования микроструктурных особенностей минералов, горных пород и руд, а также изменений морфологии и микрорельефа поверхности геоматериалов при различных видах внешних энергетических воздействий. В докладе представлены результаты электронно-микроскопических исследований (РЭМ, микроскопы LEO1420VP, JEOL-JSM-6610LV и JEOL-JSM 5910LV) структурных изменений поверхности образцов минералов и горных пород (кварца, гематита, магнетита, гранита, мрамора, доломита и др.), вызванных действием взрыва и мощных наносекундных электромагнитных импульсов (МЭМИ) [1, 2]. Установлены некоторые общие закономерности формирования иерархии микротрещин на различных структурных уровнях [3]. Минимальная величина раскрытия микротрещин составила 0,1 мкм. Эта же величина характерна для минимального размера субмикронных частиц, образующихся при взрывной дезинтеграции горных пород. Методами РЭМ определены размеры и минеральный состав отдельных частиц (Рис. 1). Для условий эксперимента максимальное увеличение, при котором возможен достоверный количественный анализ особенностей микроструктуры образцов, составляло 5000-10000^x. В отдельных случаях использование электронного микроскопа JEOL-JSM 5910LV позволило достичь высокого разрешения изображений микротрещин при увеличении до 75000^x.

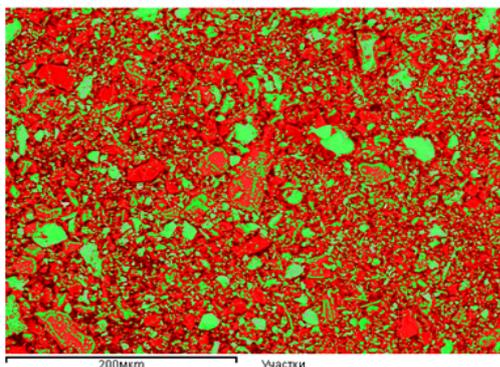


Рис.1. Изображения частиц кварца и рудных минералов, образовавшихся при дезинтеграции железистых кварцитов в результате взрывного воздействия (РЭМ LEO 1420VP)

1. S.D Viktorov, A.N Kochanov, Bull. Rus. Acad. Sci.: Phys. 79, 6 (2015).
2. A.N Kochanov, I. Zh. Bunin, et al., Bull. Rus. Acad. Sci.: Phys. 85, 9 (2021).
3. L.R. Botvina, et al., Physical Mesomechanics: 22, 6 (2019).

С 328 К вопросу комплексного исследования микро- и наноструктуры тернарного сплава CoCrMo: электронная микроскопия и атомистическое моделирование

Д.А. Кравченко, А.Ю. Колосов, Н.И. Непша, Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет

В настоящее время аддитивные технологии активно используются для получения различных металлических изделий [1], в том числе и из многокомпонентных сплавов [2]. В данной работе в качестве объекта исследования выбран порошок ПР-КХ28М6 (Co 63 %, Cr 29 % Mo 8 % [2]) из которого был получен ряд образцов с использованием селективного лазерного плавления. В качестве примера на рис. 1 приведены микрофотографии поверхности тернарного сплава CoCrMo.

Для идентификации структуры образца было проведено атомистическое моделирование процесса синтеза наночастицы CoCrMo с аналогичным элементным составом (число частиц 10000 атомов) в ПО LAMMPS. Получены соответствующие калорические зависимости внутренней энергии (см. рис. 2; скорость моделирования 1 К/пс), а также проанализирована конечная локальная структура наночастицы после охлаждения (см. рис. 3). Установлено, что для наночастицы CoCrMo характерна структурная сегрегация с доминирующими ГЦК и ГПУ фазами. При этом атомы Co формируют оболочку наночастицы, атомы Cr её ядро, а Mo распределены по всему объему наночастицы.

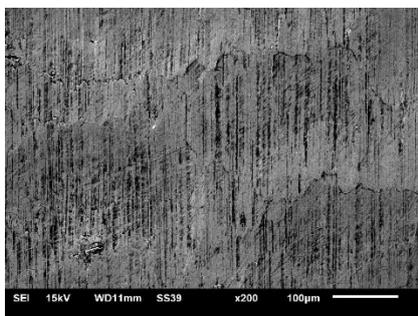


Рис. 1. Изображение поверхности образца CoCrMo, полученное в режиме вторичных электронов [2].

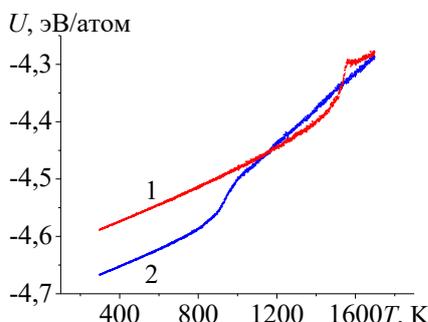


Рис. 2. Калорические зависимости удельной внутренней энергии: 1 – плавление, 2 – кристаллизация.

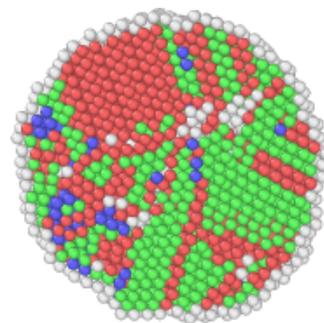


Рис. 3. Локальная структура: зеленый цвет – ГЦК, красный ГПУ, синий – ОЦК, белый – нераспознанные.

1. L. Yang, K. Hsu, B. Baughman, et al. Additive manufacturing of metals: the technology, materials, design and production. Cham, Springer, 2017, VII, 168 p.

2. Д.А. Кравченко, О.Н. Медведева, Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 14, 652 (2022).

3. A. Stukowski, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.18, 015012 (2010).

С 314 Анализ атомарной структуры аморфного слоя Mo-Si-N методом дифракции электронов

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

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Тонкие пленки Mo-Si-N применяются в качестве одного из слоев в структуре фазосдвигающих фотошаблонов. Добавление атомов Mo в слои на основе нитрида кремния позволяет достичь требуемых оптических свойств, однако влияние атомов Mo на структуру получаемых пленок подробно не изучалось. В данной работе исследовался слой $\text{Mo}_7\text{Si}_{34}\text{N}_{59}$ многослойной гетерокомпозиции, изображение которой в режиме просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ), полученное с использованием прибора FEI Titan Themis 200, показано на Рис. 1а. Ее состав определялся методом энергодисперсионного рентгеноспектрального микроанализа.

Полученная электронограмма (Рис. 1б) свидетельствует об аморфной структуре слоя $\text{Mo}_7\text{Si}_{34}\text{N}_{59}$, которая описывалась с применением парной функции распределения $g(r)$ (ПФР). Для ее построения в среде Digital Micrograph вычислялся профиль азимутально усредненной интенсивности рассеяния, который затем обрабатывался в пакете eRDF Analyser. Так, была оценена фоновая интенсивность и вычислена функция приведенной интенсивности, выполнение преобразования Фурье от которой позволило построить ПФР (Рис. 1в). На полученной ПФР наблюдаются три пика с координатами по оси абсцисс $r_1 \approx 1,73 \text{ \AA}$, $r_2 \approx 2,95 \text{ \AA}$ и $r_3 \approx 4,35 \text{ \AA}$. Эти значения сравнивались с данными для $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$ [1] – первый пик соответствует связи Si-N, второй пик отвечает межатомному расстоянию Si-Si. Установлено (см. Рис. 1в), что добавление 7% атомов молибдена приводит к сдвигу первого пика ПФР относительно его положения в $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$ примерно на 3%.

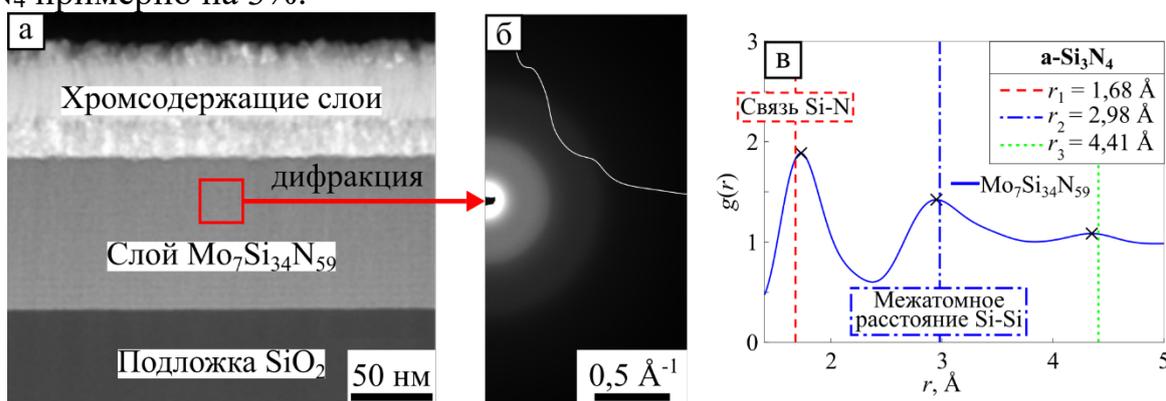


Рис. 2 – ПРЭМ-изображение поперечного сечения гетерокомпозиции (а), электронограмма слоя $\text{Mo}_7\text{Si}_{34}\text{N}_{59}$ (б) и соответствующая ПФР (в). Пики отмечены символом «x», вертикальные линии соответствуют положениям пиков на ПФР для $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$

1. Alvarez F., Valladares A. A. Rev. Mex. Fis. V. 48, 6 (2002).

С 316 Синтез, структура и каталитическая активность Ag/CeO₂ в реакции окисления СО

*Е.Ю. Либерман¹, Е.И. Суворова², А.Ю. Васильков³, А.А. Воронова³,
А.Ю. Переславцев⁴, Т.В. Конькова¹*

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН – НИЦ «Курчатовский институт»

³Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова

⁴Всероссийский НИИ автоматики им. Н.Л. Духова

Синтезированы нанодисперсные катализаторы Ag/CeO₂ окисления СО, в которых в качестве носителя использовали CeO₂, полученный осаждением ионов Ce⁺³ осадителями различной химической природы: NH₄OH, (NH₄)₂CO₃ и H₂C₂O₄ с последующим прокаливанием при температуре 500°C в окислительной атмосфере. Характеризация образцов проведена методами РФЭС, ПЭМ, СЭМ, низкотемпературной адсорбции азота. Показано, что в зависимости от выбранного осадителя агрегаты наночастиц CeO₂ имеют различную морфологию: при использовании NH₄OH – сферическую, в случае применения (NH₄)₂CO₃ и H₂C₂O₄ – пластинчатую. Наиболее развитую пористую структуру имеет образец, синтезированный с применением (NH₄)₂CO₃: S_{уд} – 81 м²/г, V_Σ – 0.14 мл/г. Импрегнирование наночастиц Ag на поверхность носителя CeO₂ проводили путем пропитки образца Ag-содержащим органозолем, полученным методом металлопарового синтеза. Содержание Ag в катализаторах, по данным ISP, составляет 0.2–0.3 вес.%. После импрегнирования наблюдаются незначительные изменения величин текстурных характеристик для образцов Ag/CeO_{2hydr} и Ag/CeO_{2oxal}, в то время как для Ag/CeO_{2carb} характерно резкое снижение удельной поверхности до 43 м²/г, что, вероятно, обусловлено низкой термической стабильностью образца, вызванной частичным спеканием CeO₂ при температурной выдержке образца при 400°C, необходимой для удаления следов органического растворителя после пропитки органозолем Ag. По данным ПЭМ, размер частиц Ag в синтезированных катализаторах находится в интервале 20 – 80 нм. Каталитическая активность образцов в реакции окисления СО уменьшается в ряду Ag/CeO_{2carb} > Ag/CeO_{2oxal} > Ag/CeO_{2hydr}. Для катализаторов Ag/CeO_{2carb} и Ag/CeO_{2oxal} характерно наличие ионов Ce⁺³, слабосвязанных форм поверхностного кислорода, что может быть причиной проявления более высокой каталитической активности. Образец Ag/CeO_{2oxal} продемонстрировал стабильную работу в течение 10 циклов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования, контракт No. 075-00277-24-00 и FSSM-2023-0004.

С 317 Строительная и облицовочная керамика: комплексное исследование структуры и состава фрагментов из коллекции Государственного музея-заповедника «Куликово Поле», Тула

Р.В. Лобзова¹, С.А. Писарева¹, И. Маркина², И.С. Простяков²

¹Государственный научно-исследовательский институт (ГОСНИИР)

²Государственный музей-заповедник "Куликово поле"

Методами оптической и электронной микроскопии, рентгенофлуоресцентного анализа исследовались кирпичи горна и фрагменты изразцов из музейного собрания.

Анализы проб и прозрачно-полированных шлифов проводились с помощью стереомикроскопа Leica EZ4 D (Германия); поляризационного микроскопа Olympus BX 51(США) в проходящем и отраженном свете; сканирующего электронного микроскопа Hitachi TM4000 Plus с приставкой для энергодисперсионного микроанализа Quantax 75 (Bruker)); портативного рентгенофлуоресцентного анализатора ХМЕТ8000 (Hitachi),

Исследовались фрагменты кирпичей горна, обнаруженного при археологических раскопках в Туле в 2013 году на территории гончарной слободы (пересечение улиц Луначарского и Герцена) и датированного, согласно археологическим данным серединой – 3-й четвертью XVIII в. Горн относится к группе двухкамерных округлых кирпичных горнов с опорным столбом в центральной части нижней камеры. Общая длина горна (с топочным коридором) – 1,88 м, при ширине 1,2 м и предназначался для обжига небольших изделий.

Кирпичи пода горна имеют разную окраску, размеры и форму (квадратные и прямоугольные) и не совпадают со стандартными размерами кирпича того периода. Цветовые оттенки поверхностей граней, сколов, отслоений и трещин характеризуются неоднородность цвета с переходами от красного и светло-оранжевого до бурого и темно-серого. Петрографические исследования показали, что кирпичи отличаются по текстурно-структурным особенностям и минеральному составу В элементном составе кирпичей преобладают основные компоненты - Si, Al, Fe, Ca, Mg, K, находящиеся в различных соотношениях в зависимости от локализации участков (внутренней, трещинной, угловой). По данным РФА в качестве примесей присутствуют Ti, P, Mn, Ba, Sr, V, а также в следовых количествах Cr, Co, Cu, Pb, Sn, Sb, Zr. Значения, полученные для основных компонентов методами СЭМ-ЭДС и РФА сопоставимы. Различия в составе исследованных кирпичей, видимо, связано с воздействием высоких температур в районе топочного коридора, условиями обжига и первичной подготовкой глинистого сырья.

Сравнительный анализ фрагментов изразцов из этой же коллекции с близкими по цвету к исследованным кирпичным образцам показал сходство их химического состава (основной массы черепков - метаглины). Существенные отличия имеются по текстурно-структурным особенностям,

гранулометрическому составу и минеральному составу крупной фракции, что связано с особенностями подготовки сырья. Для изготовления кирпича использовалось сырье в естественном виде, не отмученное, что сказалось на неоднородности черепка. Черепок изразцов более однородный: в лицевой пластине преобладает более тонкая фракция, а в румпе – близкая к кирпичной.

Решающее значение в изготовлении керамических изделий разного назначения играют выбор первичного глинистого сырья, способы его подготовки, приемы формовки и режим обжига, что определяет их качество. Нестандартность этапов изготовления исследованных изделий объясняется производством сугубо для внутреннего употребления.

Проведены экспериментальные работы по обжигу местных глин, которые при обжиге дали красный черепок различных оттенков и интенсивности цвета.

С 318 Тормозная способность вещества для фокусированного моноэнергетического пучка легких ионов средних и низких энергий

Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах

НИИ “Курчатовский институт”

Фокусированный ионный пучок – многофункциональный инструмент, широко используемый в современных нанотехнологиях и локальных методах диагностики свойств создаваемых на основе этих технологий структур. Для эффективного применения количественных методов исследования наноматериалов, например, в сканирующей гелиевой микроскопии, необходимы надежные знания о тормозной способности исследуемых образцов по отношению к альфа-частицам с энергией от 1 кэВ до 60 кэВ. В рамках традиционно используемой исследователями базовой концепции непрерывного торможения удовлетворительной теории, позволяющей проводить расчеты тормозной способности вещества для заряженных частиц средних и низких энергий адекватно экспериментально измеряемым величинам, пока не создано. Как правило, используются табулированные данные, основанные на аппроксимации усредненных, так называемых, “наиболее достоверных” экспериментальных измерений.

В настоящей работе представлены результаты практического применения новой статистической модели [1,2] дискретного процесса многократного рассеяния заряженных частиц в веществе для расчетов тормозной способности твердотельных материалов и нахождения величин пробегов легких ионов в образце (при энергиях ионов в диапазоне от 1 кэВ до 100 кэВ). Приводятся результаты эффективного учета зарядового состояния низкоэнергетического пучка легких ионов при расчете тормозной способности. Они основаны на использовании принципиально новой методики [3,4], которая впервые учитывает зависимость этого параметра от отношения скорости ионов к минимальной скорости атомных электронов вещества. Показано наличие равновесного зарядового состояния для пучка ионов, когда отношение этих скоростей становится $\leq 1,55$. Приводятся формулы и базовые параметры, описывающие максимальный пробег пучка низкоэнергетических легких ионов, и результаты их апробации на соответствие экспериментальным данным.

1. Н.Н. Михеев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 94, 3, (2022). (DOI:10.31857/S1028096022030141).
2. Н.Н. Михеев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 56, 8, (2022). (DOI:10.31857/S10280960220).
3. Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 20, 1, (2023). (DOI:10.31857/S1028096023010168).
4. Н.Н. Михеев, И.Ж. Безбах, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 72, 3, (2024). (DOI:10.26201/Surf.2024.3.72).

С 319 Методы конфокальной лазерной сканирующей, растровой электронной и флуоресцентной микроскопии в исследовании объектов тканевой инженерии

А.А. Михуткин, Т.Д. Пацаев, А.М. Азиева, А.Л. Васильев

НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Создание биоискусственных систем для регенеративной медицины – сложный многоэтапный процесс, начинающийся изготовлением биосовместимых матриц с необходимым комплексом морфологических, биохимических и механических свойств, с дальнейшим формированием тканей на основе таких матриц. Последний этап включает засеивание матриц клетками, их адгезию, пролиферацию и дифференцировку; биодеградацию матриц. Для изучения морфологии, микроструктуры матриц, используемых в медицинских приложениях, матриц с клетками используется конфокальная лазерная сканирующая микроскопия (КЛСМ) и растровая электронная микроскопия (РЭМ). В частности, полноценно охарактеризовать матрицы можно методами трехмерной реконструкции и количественного анализа как порового пространства, так и волокон матриц [1-2]. Трехмерные модели матриц могут быть использованы в моделировании процессов, происходящих в биореакторе, например, протекание жидкости, что позволяет определить оптимальные условия роста клеток и микроорганизмов [3].

Адгезия клеток к поверхности матрикса зависит от её микрорельефа, который можно трехмерно реконструировать и численно оценить [4] по РЭМ-изображениям, используя стереофотограмметрический подход [5]. Оценить степень адгезии клеток можно с использованием методов флуоресцентной микроскопии (ФМ) и РЭМ в режиме естественной среды (ЕРЭМ) [6].

В докладе будут представлены результаты исследований материалов матриц, включая матрицы с клетками, методами КЛСМ, ФМ, РЭМ и ЕРЭМ.

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

1. А. А. Mikhutkin, et al., BioNanoScience. 8, 511 (2018).
2. Т. К. Tenchurin, et al., Polymers. 14, 4352 (2022).
3. А. А. Михуткин и др., Известия РАН. Серия Физическая. 83, 1497 (2019).
4. Е. В. Ястремский и др., Кристаллография. 67, 451 (2022).
5. А. А. Михуткин и др., Кристаллография. 59, 999 (2014).
6. А. М. Азиева и др., Кристаллография. 68, 983 (2023).

С 320 КриоЭМ реконструкция капсида гигантского бактериофага AR9

А.В. Моисеенко¹, Т.Б. Станишинева-Коновалова¹, М.В. Якунина¹, О.С. Соколова¹

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический факультет

² Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Научно-образовательный центр нанобиотехнологии, лаборатория молекулярной микробиологии

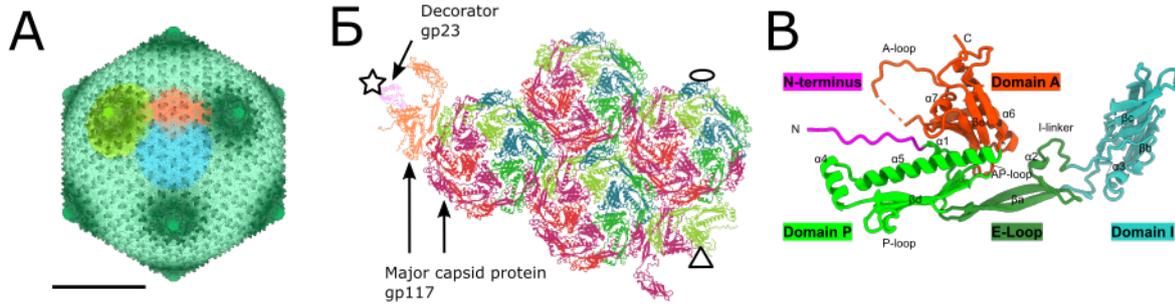
К гигантским бактериофагам относят фаги с двухцепочечной ДНК и геномом размером не менее 200 т.п.н. Для упаковки такого длинного генома требуется капсидная оболочка большого диаметра. Известно, что капсиды гигантских бактериофагов помимо ДНК содержат в себе большое количество белков, необходимых для репликации фага и противодействия клеточным механизмам защиты. В частности, капсид инфицирующего *Bacillus subtilis* бактериофага AR9 несет две вирусные РНК-полимеразы. Благодаря этому, ранняя стадия транскрипции может проходить практически независимо от белков хоста. Наличие большого количества белков, эжектируемых в клетку в процессе инфекции, в сочетании с большим диаметром капсида, делают бактериофаг AR9 перспективным с точки зрения использования его в качестве адресного средства доставки, а также для потенциального использования в рамках фаговой терапии.

На сегодняшний день доступно немного детальных структурных исследований, посвященных гигантским фагам. Опубликованы только две криоЭМ реконструкции, обладающие достаточным для построения атомных моделей разрешением: капсидные оболочки фагов phiKZ и phiKp24. Эти структуры отличаются достаточно сильно как по белковому составу, так и по структурной организации отдельных белков. Для выявления характерных структурных компонентов, общих для гигантских бактериофагов, требуется исследования аналогичных структур в других гигантских фагах.

С помощью криоЭМ нам удалось построить реконструкцию капсида гигантского фага AR9 с разрешением 3.3А. В полученной карте плотности мы идентифицировали два структурных белка оболочки капсида: главный капсидный белок gp119 и декорирующий белок gp23, организованный в пентамеры на вершинах капсида. Оболочка капсида имеет диаметр 137 нм и организована в правильный икосаэдр. Асимметричная единица состоит из 27 цепей главного капсидного белка и одной цепи декорирующего белка.

Главный капсидный белок AR9 обладает особенностями, не свойственными phiKZ и phiKp24. В частности, отличается строение С-концевого участка, расположенного на наружной поверхности в районе поры в центрах капсомеров. С-конец в AR9 не участвует в формировании поры и плотно прижат к поверхности капсида в гексонах. В пентонах же С-концевой фрагмент в сочетании с петлей, формирующей пору, образуют сайт связывания с декорирующим белком gp23. I-домен капсидного белка, расположенный на поверхности капсида, существенно отличается от аналогичных доменов в phiKZ и phiKp24, по всей видимости являясь крайне вариабельной частью капсидного белка.

Субъединицы капсидного белка формируют дополнительные контакты друг с другом за счет выступающих длинных петель, присоединяющимся к бета-листам в соседних субъединицах. Такие связи формируются только внутри гексонов, но не в пентонах. Как и в *phiKZ* и *phiKP24*, капсидные белки фага AR9 не связаны между собой изопептидными связями, типичными для НК97. Вместо них выступает комбинация солевых мостиков и водородных связей, также уникальная для AR9. Работа поддержана грантом РФФ (24-44-02003)



С 315 Особенности формирования дефектов инициирующих усталостные разрушения в гранулированном сплаве эП741нп

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

¹Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва

²Филиал ПАО “ОДК–УМПО” ОКБ им. А. Льюльки, Москва

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

Образцы, изготовленные из никелевого жаропрочного гранулируемого сплава ЭП741НП для изготовления жаропрочных изделий ответственного назначения, разрушенные в процессе усталостных испытаний, были исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии, энергодисперсионного рентгеновского микроанализа и электронной дифракции. Особенно пристальное внимание было направлено на исследование композиционного и фазового состава дефектов, обнаруженных на границах усталостных трещин. Показано, что такие дефекты, преимущественно, имеют морфологию вытянутых плоских «ковров», содержащих NiO, STi_xNb_{1-x} , аморфный AlO_x , HfO_2 , $\alpha-Al_2O_3$, $\beta-Al_2O_3$, Al_2MgO_4 , Co_7Mo_6 , Co_3O_4 , S_4Ti_3 , NbO_2 , TiO_2 , а также аморфные области содержащие С, О, Са, S, Na и Cl. Сделаны предположения об источнике и моменте формирования исследованных дефектов.

1. Трунькин И.Н. и др. // Кристаллография. 2019. Т. 64. С. 539. doi: 10.1134/S002347611904026X.

С 321 Исследование имплантации низкоэнергетических ионов ксенона в кремний методами просвечивающей электронной микроскопии

*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*

Пучки ускоренных ионов широко применяются в современных технологиях, например, для прецизионного формирования структур, а также при очистке и полировке поверхностей. Особый интерес для таких приложений представляют ионы инертных газов, например, ксенона, так как они не образуют химических связей с атомами подложки. Тем не менее, концентрация имплантированных атомов в образце может достигать 10 ат. %, а их распределение во многом определяет структуру приповерхностной области образца.

В данной работе проводилось экспериментальное исследование методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (РМА) поперечных сечений образцов монокристаллического кремния, облучённого ионами ксенона с энергией 8 кэВ и дозой около 10^{16} см⁻². ПЭМ-изображение аморфизованного слоя с наложенным профилем концентрации атомов Хе (C_{Xe}) показано на Рис. 1а. Их распределение также оценивалось путем моделирования ионного облучения методами Монте-Карло (МК) и молекулярной динамики (МД), которое выполнялось в пакетах SDTrimSP 5.07 и LAMMPS соответственно. Вычисления методом МК проводились при использовании подхода, учитывающего перераспределение имплантированных ионов пучка под действием механизмов диффузии, реализованного в SDTrimSP 5.07. Сравнение результатов (Рис. 1б) показало, что метод МД позволяет с приемлемой точностью предсказывать форму профилей и величину C_{Xe} . Полученный на основе применения метода МК профиль концентрации адекватно оценивать значение C_{Xe} в пиковой области.

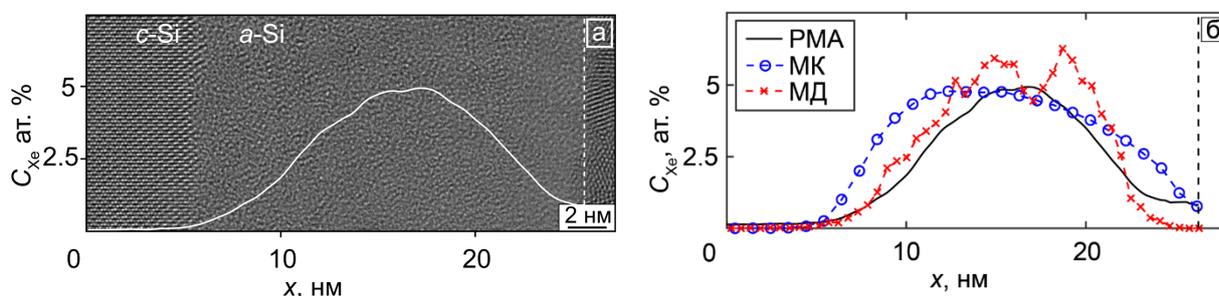


Рис. 1. Экспериментальное ПЭМ-изображение облучённой области (а), экспериментальный и расчётные профили концентрации имплантированных с энергией 8 кэВ ионов ксенона (б)

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

С 322 Электронно-микроскопический анализ пористости наноразмерного поликристаллического слоя

А.Р. Решетняк, Р.Л. Волков, Н.И. Боргардт

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Пористые поликристаллические слои нанометровой толщины влияют на механические, физические и функциональные свойства материалов. Многослойные гетерокомпозиции с такими слоями применяются, в частности, в микроэлектронике для изготовления фазосдвигающих фотошаблонов.

Тонкая фольга фотошаблона была приготовлена методом фокусированного ионного пучка в электронно-ионном микроскопе Helios Nanolab 650 и исследована методом просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) на приборе FEI Titan Themis 200.

На изображении изучаемого слоя $\text{Cr}_{0,58}\text{N}_{0,42}$ визуализированы поры и поликристаллические частицы (Рис. 1а). Для устранения неравномерности распределения фона на микрофотографии применялись усредняющая фильтрация, нерезкое маскирование и процедура «катыщегося шара». Для бинаризации изображения (Рис. 1б) использовался итерационный алгоритм [1], в который внесены изменения, позволяющие варьировать величину порога. Как видно из Рис. 1 в-1, в-3, при неоптимальных значениях порога сегментация пор выполнялась некорректно. После порогового преобразования полученное бинаризованное изображение (Рис. 1б) использовалось для определения геометрических параметров пор путем аппроксимации кругом их формы. Гистограмма распределения размеров пор представлена на Рис. 1г. Средний эквивалентный диаметр пор составил примерно 2 нм, а пористость слоя – 8 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания (Рег. номер FSMR-2024-0013).

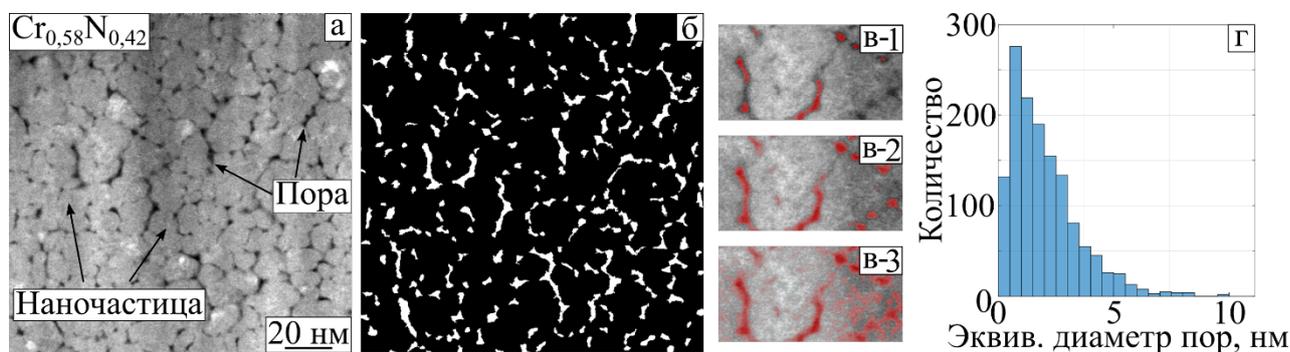


Рис. 1. Исходное ПРЭМ-изображение (а), бинаризованное изображение (б), изображения определения оптимального порога (в), гистограмма распределения эквив. диаметра пор (г)

1. Гонсалес Р., Вудс Р., Эддинс С. Цифровая обработка изображений в среде MATLAB. – М.: Техносфера, 2006. – 616 с.

С 323 Формирование структур в многослойных подложках методом фокусированного ионного пучка

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

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

Распыление методом фокусированного ионного пучка (ФИП) характеризуется относительно низкой селективностью и успешно используется для травления канавок в многослойных мишенях. Предсказание формы получаемых структур затруднено из-за влияния переосаждения распыленных атомов и, как правило, выполняется с применением компьютерного моделирования. В работе методами просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) и численных расчетов изучалось распыление углублений методом ФИП в системе диоксид кремния – кремний ($\text{SiO}_2\text{-Si}$).

В подложке Si, покрытой слоем термического SiO_2 толщиной примерно 600 нм изготавливались прямоугольные углубления размером 1×1 мкм². Выполнялся один проход ионного пучка с током 900 пА по шаблону сканирования с временем остановки 4.9 мс и шагом 60 нм. На Рис. 1а, б показано ПРЭМ изображение полученной структуры и карта распределения кислорода в области переосажденного слоя $\text{Si}_x\text{O}_y^{(r)}$, полученная методом рентгеновского микроанализа. Расчеты выполнялись методом функций уровня и учитывали различия в скоростях распыления различных материалов композиции [1]. Состав $\text{Si}_x\text{O}_y^{(r)}$ вычислялся как сумма потоков распыленных атомов всех облученных слоев подложки. Вычисленный профиль поверхности углубления наложен на микрофотографию Рис. 1а, а расчетная карта концентрации кислорода показана на Рис. 1в. Анализ приведенных изображений свидетельствует, что моделирование удовлетворительно описывает как форму углублений, так и состав переосажденного материала.

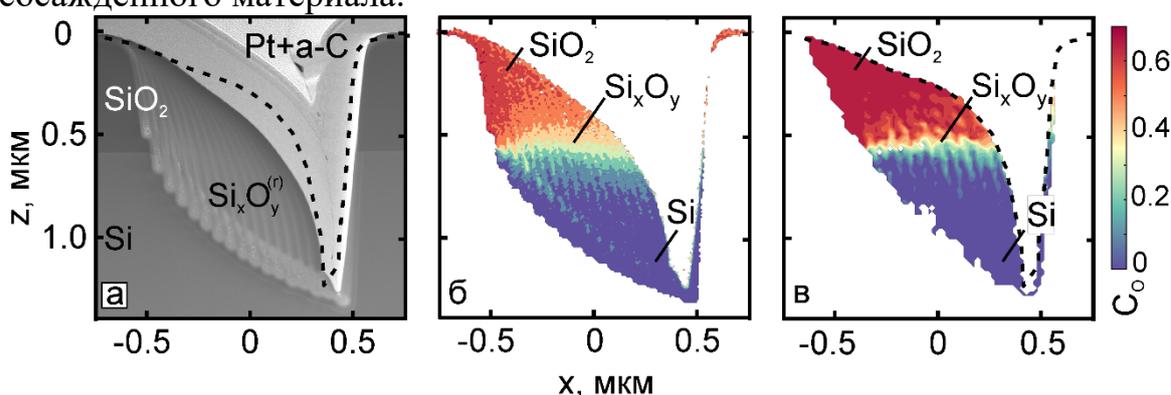


Рис. 1. ПРЭМ изображение углубления (а), экспериментально полученная (б) и расчетная (в) карты распределения кислорода в переосажденном материале.

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

1. Rumyantsev, A. V., Borgardt, N. I., et al. Beilstein J. Nanotechnol. 15, 1 (2024).

С 324 Критерии обнаружения сконденсированного импактного материала при электронно-микроскопическом изучении

А.П. Рыбчук¹, А. В. Мохов¹, Т.А. Горностаева¹, П.М. Карташов²

¹ГЕОХИ РАН

²ИГЕМ РАН

При высокоэнергетичных импактных событиях, обусловленных метеоритной или кометной бомбардировкой, возникает высокотемпературное газово-плазменное облако, стремительно теряющее температуру и плотность. В какой-то момент создаются условия для возникновения конденсационного процесса продуцирующего различные сконденсированные фазы. В виду крайне малой (до нескольких секунд) продолжительности этого процесса размер сконденсированных фаз не может превышать первых микрон. Поэтому наиболее адекватным методом их обнаружения и изучения является аналитическая электронная микроскопия. При этом необходимым условием являются критерии, позволяющие идентифицировать сконденсированный материал на фоне окружающего материала.

Долгое время единственными свидетельствами конденсатного материала являлись субмикронные сфероиды с высоким содержанием SiO₂ обнаруженные методами ПЭМ (диаметром 200–400 нм), а также более тонкие стеклянные плёнки на частицах из образцов миссии Apollo (1). Авторы утверждали, что эти наносфероиды, обнаруженные методом ПЭМ, представляют собой конденсаты, образующиеся одновременно с формированием низкремниевых стёкол. Они же (2) также обнаружили возможные отложения конденсатов в качестве покрытий на 12 лунных частицах реголита. Эти покрытия толщиной порядка 100 нм богаты включениями наноразмерного железа и имеют высокое содержание SiO₂. По результатам обнаружения конденсатных стёкол в лунном реголите методами ПЭМ **были сформулированы их основные характеристики: высокая кремниземистость и размер, не превышающий сотен нанометров** подтверждённые в ряде работ. Помимо сфероидов конденсатного стекла на частицах лунного реголита были обнаружены конденсатные плёнки толщиной от 60 до 200 нм. Позднее (3,4) для самых низкотемпературных конденсатов было установлено, что размер их сфероидов может достигать первых микрон. Нами были обнаружены и изучены конденсаты в лунном реголите и земных импактиках кратера Лонар.

1. Keller L.P., McKay D.S. Micrometer-sized glass spheres in Apollo 16 soil 61181: implications for impact volatilization and condensation // Proceedings of Lunar and Planetary Science Conference. 1992. V. 22. P. 137–141.

2. Keller L.P., McKay D.S. The nature and origin of rims on lunar soil grains // Geochimica et Cosmochimica Acta. 1997. V. 61. № 11. P. 2331–2341.

3. Горностаева Т.А., Мохов А.В., Карташов П.М., Богатииков О.А. Конденсатный

компонент в импактных стёклах кратера Жаманшин //Докл. АН.2015.Т.464.№ 1.С. 91–95.

4. Мохов А.В., Яковлев О.И., Горностаева Т.А., Рыбчук А.П. Исследование морфологии и состава конденсата, полученного при ударном испарении серпентинита. Геохимия. 2022. №7(12). С. 1312-1320.

С 325 Особенности морфологии продуктов изнашивания при трении радиационных модификаций композитов ПТФЭ

Н.В. Садовская^{1,2}, А.М. Таджибаев², А.С. Авилов¹, С.А. Хатипов²

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² ООО «НПП «Арфлон»

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) широко применяется в промышленности благодаря уникальному набору физико-химических свойств. Ограничения по применению этого полимера связаны с рядом недостатков, в число которых входит низкая износостойкость. Повышение износостойкости ПТФЭ может быть достигнуто созданием композиционных материалов. Так, например, в композитах ПТФЭ с углеволокном, графитом и коксом удается повысить износостойкость на 2–3 порядка по сравнению с ненаполненным ПТФЭ. Использование метода радиационно-химического модифицирования (РХМ), основанного на облучении полимера гамма-квантами в расплаве, дает возможность повысить износостойкость ПТФЭ на 5 порядков, а его композитов на 7 порядков [1]. Известно, что макроскопические свойства полимерных тел существенно зависят от надмолекулярной структуры, что находит свое отражение и в процессах трения и изнашивания.

В работе проведено электронно-микроскопическое исследование морфологии продуктов изнашивания, а также пленки переноса и поверхности трения при трении скольжения ПТФЭ и композитов ПТФЭ до и после РХМ с целью понимания механизмов износа данных материалов.

Исследовали образцы блочного спеченного ПТФЭ и композитов ПТФЭ суспензионной полимеризации. Радиационное модифицирование проводили гамма-квантами (⁶⁰Со) при поглощенных дозах 50, 100 и 200 кГр вблизи температуры плавления кристаллической фазы ПТФЭ. Продукты изнашивания, поверхность трения и пленку переноса на контртеле получали в результате сухого трения палец–диск по стали при скорости скольжения 1 м/с и контактном давлении 5 МПа. Морфологию продуктов изнашивания, пленки переноса и поверхности трения исследовали методом растровой электронной микроскопии.

Показано, что в процессе трения необлученного ПТФЭ и его композитов на поверхности трения образуются трещины, продукты износа представляют собой крупные чешуйки размером до 1 мм, что характерно для деламинационного механизма изнашивания. После облучения размер продуктов износа существенно уменьшается (100–1000 нм). На поверхности трения трещин нет, наблюдаются только многочисленные борозды и царапины, характерные для абразивного механизма изнашивания.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Н.В. Садовская, А.Ю. Обвинцев, Р.С. Хатипов, С. А. Хатипов. Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 38, 9 (2016)

С 326 Электронно-микроскопические исследования эпитаксиального слоя $\text{GaP}_x\text{N}_{1-x}$, выращенного на подложке Si(100) с буферным слоем GaP

*В.А. Сазонов¹, Р.Л. Волков¹, Н.И. Боргардт¹, К.В. Saddik²,
S. Fernández -Garrido^{2,3,4}, B.J. Garcia^{2,3,4}*

¹ Национальный исследовательский университет «МИЭТ», г. Москва, г. Зеленоград

² Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

³ Centro de Microanálisis de Materiales, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

⁴ Instituto Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

В трехкомпонентных полупроводниковых соединениях типа A_3B_5 основные атомы частично заменяются примесными. Соединения на основе $\text{GaP}_x\text{N}_{1-x}$, сформированные эпитаксиально на подложках Si, могут применяться в качестве фотодетекторов, светодиодов и солнечных элементов.

В настоящей работе представлены результаты электронно-микроскопических исследований слоя $\text{GaP}_{0,94}\text{N}_{0,06}$, выращенного на буферном слое GaP на подложке Si(100) методом химически-пучковой эпитаксии на установке Riber CBE32. Образец планарного сечения с ориентацией поверхности (001) исследовался на просвечивающем электронном микроскопе FEI Titan Themis 200 при ускоряющем напряжении 200 кВ.

На рис. 1а представлено просвечивающее растровое электронно-микроскопическое (ПРЭМ) изображение слоя $\text{GaP}_{0,94}\text{N}_{0,06}$. На нем выявляются отмеченные стрелками области с низкой интенсивностью, которые, согласно приведенной на рис. 1б карте распределения атомов P и N, содержат повышенную концентрацию N. В таких областях, одна из которых показана стрелкой на рис. 1б, выявлены дислокации, высокоразрешающее ПРЭМ-изображение одной из них представлено на рис. 1в. На нем визуализируются отмеченная пунктирной линией вставленная полуплоскость (010) и изгиб взаимно перпендикулярной плоскости (100) вблизи ядра дислокации.

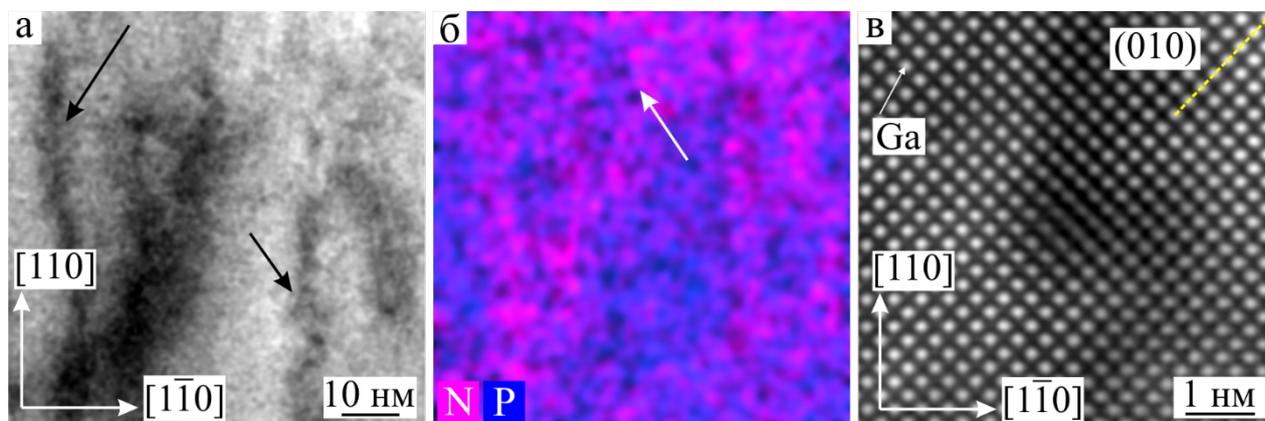


Рис. 1. ПРЭМ-изображение общего вида (а) и соответствующая ему карта распределения атомов P и N (б), высокоразрешающее ПРЭМ-изображение дислокации (в)

С 327 Структура внешнего гептамерного α -кольца 26S иммунопротеасомы человека в преактивационном состоянии, выявленная методом криоэлектронной микроскопии с разрешением 3.6 Å

*Г.А. Саратов^{1,3}, Т.Н. Баймухаметов², А.Л. Коневега², А.А. Кудряева¹,
А.А. Белогуров¹*

¹ «Государственный научный центр Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова» РАН»

² НИЦ «Курчатовский институт»

³ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

26S протеасома представляет собой уникальный мультикаталитический комплекс, участвующий в контролируемой деградации большинства внутриклеточных белков у эукариот. Важной особенностью протеасомы является её способность формировать различные внутриклеточные формы благодаря модульной сборке. Иммунопротеасома, активируемая при воздействии интерферона-гамма (IFN γ), играет ключевую роль в иммунном ответе клеток за счёт изменения специфичности каталитических субъединиц.

Настоящее исследование представляет собой первое детализированное описание структуры 26S иммунопротеасомы человека, полученной методом криоэлектронной микроскопии с разрешением 3.6 Å. Сравнительный анализ с конститутивной формой протеасомы выявил структурные отличия, заключающиеся в разобщении N-концевых участков субъединиц PSMA4 и PSMA5 и формировании π - π -укладки между остатками Tyr5 и Phe9 субъединиц PSMA5 и PSMA6. Это приводит к раскрытию входа в центральный канал 20S субъединицы иммунопротеасомы, что может свидетельствовать о её преактивационном состоянии даже в отсутствие связанного субстрата. Данный структурный переход в иммунопротеасоме важен для понимания её функционирования и может объяснять более высокую скорость деградации клеточных субстратов по сравнению с конститутивной формой. Полученные результаты открывают новые перспективы для изучения молекулярных механизмов работы иммунопротеасомы и её роли в клеточных процессах, связанных с иммунным ответом.

Исследование выполнено в рамках гранта Российского научного фонда № 23-74-00053 «Молекулярные механизмы действия модуляторов активности протеасомы химической и белковой природы».

1. Г. А. Саратов, Т. Н. Баймухаметов, А. Л. Коневега, А. А. Кудряева, А. А. Белогуров, *Биоорганическая химия*, 50(3), 311-323 (2024).

С 329 Методы обработки изображений полей рассеяния одноосных ферромагнетиков, полученных с помощью магнитно-силового микроскопа

А.И. Синкевич, Е.М. Семенова, С.Д. Сметанникова

Тверской государственный университет

В работе обсуждаются различные математические методы постобработки изображений полей рассеяния доменной структуры одноосных ферромагнетиков, полученных с помощью магнитно-силового микроскопа (МСМ). За исходные экспериментальные данные взяты серии МСМ изображений, полученные на различных образцах одноосных магнетиков с анизотропией типа «легкая ось» с варьирующейся в широком диапазоне высотой подъема зонда над поверхностью образца. Изображения были получены двухпроходной методикой в фазовом режиме.

Для каждой экспериментальной серии был проведен ряд постобработок. Сигнал магнитного зонда был нормирован для каждого отдельно взятого снимка с целью исключения влияния сил, не связанных с магнитной доменной структурой образца. Для изображений с достаточно большой высотой подъема (> 0.5 мкм) отдельно обсуждается влияние электростатических шумов на финальный вид изображения и расчет его количественных характеристик, а также предлагается и сравнивается ряд способов устранения этого влияния.

На основе обработанных МСМ серий рассчитаны количественные характеристики изображений и их зависимости от расстояния между зондом и поверхностью образца. Построены зависимости средней плотности экстремумов на линию сканирования от высоты подъема зонда, получены аналитические выражения для аппроксимации этих зависимостей, рассчитано значение на поверхности образца. На основе этих значений произведен расчет микромагнитного параметра поверхностной плотности энергии доменных границ для различных ферромагнитных соединений. С использованием встроенных пакетов программного обеспечения Gwyddion рассчитана фрактальная размерность изображений полей рассеяния и её зависимость от высоты подъема зонда над поверхностью образца.

На основе нормированных кривых зависимости сигнала зонда от высоты подъема рассчитано число вложений доменной структуры в каждой точке, рассчитано среднестатистическое число вложений в области МСМ изображения, построена его зависимость от расстояния зонд-образец. Анализ данной зависимости демонстрирует основные закономерности усложнения полей рассеяния доменной структуры при приближении к поверхности образца.

С 330 Растровая электронная и сканирующая зондовая микроскопия аморфного сплава $\text{Fe}_{73}(\text{SiBNb})_{27}$ до и после его магнитоимпульсной обработки

*М.А. Степович², Т.П. Каминская¹, П.А. Поляков¹, М.Н. Шипко³, А.А. Вирюс⁴,
В.В. Попов¹, А.В. Стулов⁵, Е.С. Савченко⁶*

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

² *Калужский государственный университет им. К. Э. Циолковского*

³ *Ивановский государственный энергетический университет им. В. И. Ленина*

⁴ *Институт экспериментальной минералогии РАН*

⁵ *ООО «Научно-производственный комплекс «Автоприбор»*

⁶ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»*

Методами растровой электронной и сканирующей зондовой микроскопии [1] изучено влияние магнитоимпульсной обработки (МИО) на доменную структуру фольги из аморфного сплава $\text{Fe}_{73}(\text{SiBNb})_{27}$ без добавок и с добавкой 1% меди. Фольга получена методом сверхбыстрого охлаждения при распылении расплава на быстро вращающемся медном барабане. Обнаружено, что в результате воздействия импульсами слабого магнитного поля на свободной (не прилегающей к барабану) поверхности фольги возникает доменная структура. Характер доменной структуры и магнитные свойства фольги зависят от параметров МИО – см. рис. 1.

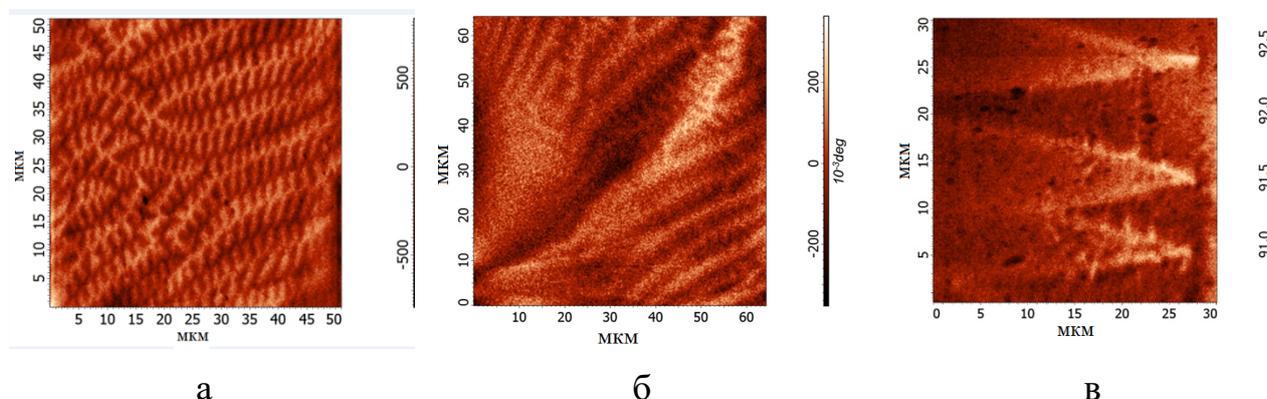


Рис. 1. Различные участки свободной поверхности ленточного аморфного сплава $\text{Fe}_{73}(\text{SiBNb})_{27}$ с добавкой 1% Cu, полученные методом магнито-силовой микроскопии в полуконтактном режиме при комнатной температуре, после МИО: а – 10 импульсами, б – 30 импульсами; в – 40 импульсами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Правительства Калужской области № 23-21-10069, <https://rscf.ru/project/23-21-10069/>, <https://rscf.ru/en/project/23-21-10069/>.

1. Т. П. Каминская, М. Н. Шипко, М. А. Степович и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 87, 10 1511-1516 (2023). DOI: 10.31857/S0367676523702642, EDN: VFVEWY.

С 331 Исследование метастабильного фазово-структурного состояния магнитномягких пленок FeTiB, полученных магнетронным осаждением

В.А. Теджетов, Е.Н.Шефтель, Е.В. Харин, Г.Ш. Усманова

Институт металлургии и материаловедения им.А.А.Байкова РАН (ИМЕТ РАН)

В работе представлены результаты исследований метастабильного фазового состояния, формирующегося в плёнках Fe-Ti₅B₁₉ и Fe-Ti₁₆B₂₇ при магнетронном осаждении, и его эволюции при последующем отжиге, используя традиционные структурные методы (рентгеновская и электронная дифракция, просвечивающая электронная микроскопия) и экспериментальные и аналитические методы измерения статических магнитных свойств и магнитной структуры, соответственно [1].

Обнаружено, что пленки в исходном состоянии характеризуются смешанной структурой (нанокристаллическая + гетерогенная аморфная). Последующий отжиг приводит к частичной кристаллизации аморфной фазы и формированию нанокристаллических фаз: твердого раствора $\alpha\text{Fe}(\text{Ti})$ и бориды со стехиометрией Fe_nB . Установлено, что содержание Ti в пленках определяет размер зерна фазы $\alpha\text{Fe}(\text{Ti})$, в то время как содержание B, который локализуется в зернограничной области, определяет соотношение объемных долей аморфной и нанокристаллической фазы.

Пленки Fe-Ti₁₆B₂₇, в отличие от пленок Fe-Ti₅B₁₉, являются суперпарамагнетиками в исходном и отожженном при 500°C (в течение 1 и 5ч) состоянии, что обусловлено высокой объемной долей парамагнитной аморфной фазы. Пленки Fe-Ti₁₆B₂₇, подвергнутые длительному (9ч) отжигу при 500°C становятся ферромагнетиками, вследствие кристаллизации аморфной фазы, увеличения количества нанокристаллитов ферромагнитной фазы $\alpha\text{Fe}(\text{Ti})$ и реализации обменного взаимодействия между ними.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ проекта 23-23-00434).

1. E.N. Sheftel, V.A. Tedzhetov et al., Coatings 14, 475. (2024)

С 332 Структура аморфного сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$ в зависимости от условий закалки

В.В. Ткачев, А.М. Фролов, К.Е. Пинчук, Г.С. Крайнова, В.С. Плотников

Дальневосточный федеральный университет (ДФУ), Владивосток,

С использованием методов сканирующей и высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии (ВРПЭМ) с последующим применением методики спектрального анализа для аморфного сплава $\text{Co}_{58}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_5\text{Si}_{11}\text{B}_{16}$, полученного быстрой закалкой из расплава, подтверждено наличие иерархии структурных неоднородностей пространственных размеров от 0,09 до 21,8 нм. При использовании метода антиплоской деформации обнаружено наличие как многомасштабных структурных неоднородностей в диапазоне от ~10 нм до ~10 мкм (рис. 1), так и наличие иерархичной ячеистой структуры. Этот результат может быть использован для управления параметрами ячеистой структуры аморфных сплавов, контролируемые условиями технологии и последующей термической обработкой.

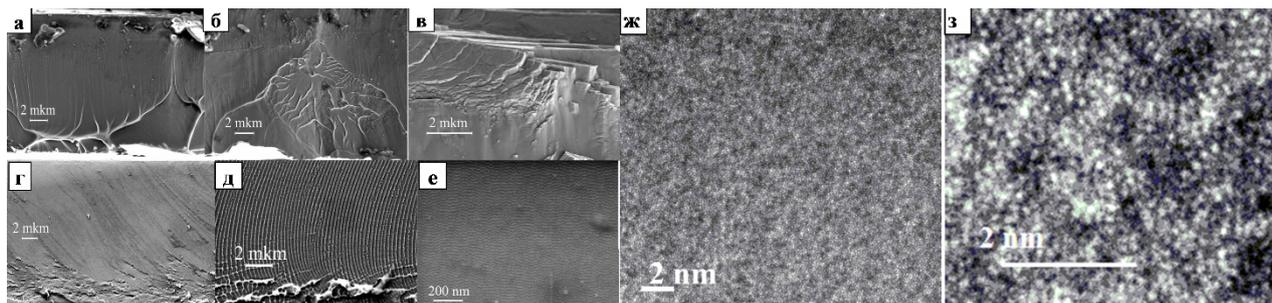


Рис.1 Электронно-микроскопические изображения структурных неоднородностей различных масштабов: а) характерный венообразный узор; б) венообразный узор сложной формы в) столбчатая структура, г) кораллоподобный узор, д) полосовая структура, е) сеточная структура, ж) общий вид в ВРПЭМ, з) тонкая структура, наблюдаемая в ВРПЭМ.

С 333 Исследование дислокационной структуры низкоуглеродистых высокопрочных сталей методами рентгеновской дифракции и электронной микроскопии

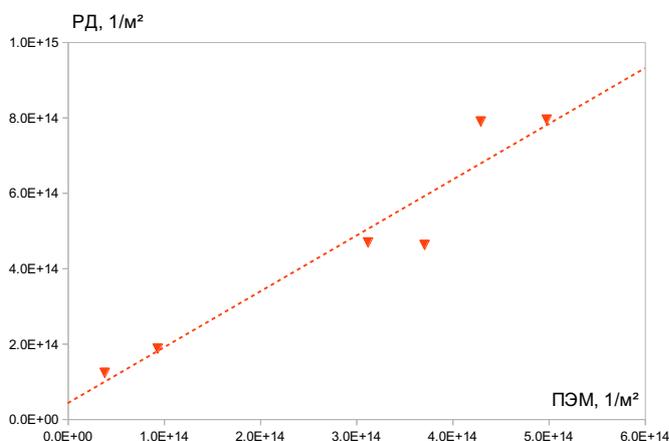
М.Л. Федосеев, А.А. Зисман, С.Н. Петров, М.С. Михайлов, Н.Ф. Дроздова, А.О. Строганова

*НИЦ «Курчатовский институт»
«Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов
«Прометей» имени И. В. Горынина*

Плотность дислокаций оказывает существенное влияние на прочностные свойства металла и является важным параметром микроструктуры, позволяющим прогнозировать поведение металла под воздействием эксплуатационных нагрузок. Экспериментальное определение плотности дислокаций может быть проведено с использованием различных методов, включая непосредственную визуализацию с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и контраста каналирования электронов в растровом электронном микроскопе или дифракционных методов: дифракция обратно отражённых электронов или рентгеновская дифракция (РД).

Данное исследование проведено для установления корреляции между значениями плотности дислокаций, полученных локальным (ПЭМ) и интегральным (РД) методами, с характерными им преимуществами и недостатками.

Исследование проведено на образцах толстолистового проката низкоуглеродистой ферритной стали и поковок среднеуглеродистой мартенситной стали. Плотность дислокаций определена на основе данных РД: размеров ОКР (областей когерентного рассеяния, D) и микроискажений кристаллической решетки (ϵ). Плотность дислокаций с помощью ПЭМ определяется методом секущих: подсчет количества видимых дислокаций, пересекающих поверхность известной площади.



По результатам исследования получены значения плотности дислокаций в широких пределах от 10^{13} до 10^{15} $1/m^2$. Связь данных ПЭМ и РД описывается линейным законом соответствия с коэффициентом детерминации ~ 0.9 . При этом значения, получаемые с использованием РД до 2 раз больше результатов ПЭМ.

Рисунок — Связь плотности дислокаций полученной методами РД и ПЭМ.

С 334 Исследование влияния параметров матричного синтеза на соотношение элементов в FeCoCu НП

*Д.Р. Хайретдинова^{1,2}, И.М. Долуденко², Д.А. Улыбышев¹, Д.Л. Загорский²,
В.М. Каневский²*

¹ НИТУ МИСИС

² Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова ККиФ НИЦ «Курчатовский институт»

Металлические ферромагнитные нанопроволоки (НП) могут быть перспективны в качестве материалов как для практического применения, например, в качестве компонентов металл-полимерных композитов, так и для фундаментального изучения. Получение НП из элементов железной подгруппы (Fe, Ni, Co, Cu) методом матричного синтеза представляет интерес ввиду простоты их получения, а также в виду того, что данные элементы могут образовывать практически непрерывный ряд твердых растворов. При получении таких НП методом матричного синтеза существует возможность контроля их элементного и фазового состава, что, в свою очередь, дает возможность контроля их физических свойств.

В данной работе методом матричного синтеза в порах полимерных трековых мембран из ПЭТФ (ОИЯИ, г. Дубна) были получены FeCoCu НП с диаметром 100 и 30 нм. Синтез проводился в гальваностатическом режиме, при ряде напряжений осаждения 1–2 В. Далее НП были исследованы методами РЭМ и ЭДС для подтверждения их морфологии и элементного состава.

Результаты РЭМ показали схожесть морфологии НП для обоих диаметров. Рост НП достаточно равномерен, во всех случаях различим фронт заполнения матрицы, при этом длина НП сильно зависит от напряжения осаждения, что объясняется различиями в скоростях процесса.

Результаты ЭДС показали, что элементный состав НП нелинейно зависит от напряжения осаждения, однако в случае НП с диаметром 30 нм нелинейность менее ярко выражена, что может быть связано с особенностями электрохимического осаждения в ограниченном объеме пор. Для обоих диаметров НП наблюдается увеличение вклада эффекта аномального соосаждения железа по сравнению с аналогичными НП из бинарных сплавов FeCo.

Таким образом, получение НП из трехкомпонентных сплавов FeCoCu методом матричного синтеза позволяет получать массивы наночастиц с заданным составом и свойствами. Такие массивы НП могут быть перспективны в качестве компонентов металл-полимерных композитов с контролируруемыми физическими свойствами, что делает их интересными для использования в элементах магнитных или тензодатчиков.

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

С 335 Структура надмолекулярных кластеров креатинкиназы в межмембранном пространстве митохондрий

Ю.М. Чесноков¹, С.В. Нестеров¹, Р.Г. Василев¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Для обеспечения значительной части клеточных функций, в том числе для функционирования процессов в ядре кардиомиоцитов, необходим транспорт фосфатных форм, отличных от АТФ. Основной молекулой переносчиком фосфата от митохондрий в другие части кардиомиоцитов является креатин. Креатинкиназа является ферментом, который осуществляет реакцию превращения креатина в креатинфосфат за счет превращения АТФ в АДФ.

В работе с помощью криоэлектронной томографии исследована структура митохондрий сердца крыс и препаратов митохондриальных мембран. Тонкие срезы витрифицированных кардиомиоцитов подготавливались в криогенном электронно-ионном микроскопе Versa 3D с помощью ионов Ga⁺ и исследовались в криогенном просвечивающем электронном микроскопе Titan Krios.

Обнаружено, что между внутренней и внешней мембраной существуют псевдокристаллические кластеры, образованные плотно упакованными белками. С помощью субтомографического усреднения получена структура этих кластеров с разрешением 25 Å и показано, что они образованы сотнями плотно стыкованных октамеров митохондриальных креатинкиназ (мКК). В интактных митохондриях октамеры мКК образуют один параллельный мембране слой, в котором октамеры плотно стыкованы с внешней и внутренней мембраной, а также между собой. На фрагментах мембран, в которых отсутствует сжатие межмембранного пространства, надмолекулярные кластеры мКК организованы иначе – образуют два слоя, в которых меньше контактов с мембраной, но больше белок-белковых контактов. Кроме того, двуслойные кластеры обычно лишены кривизны и больше по размерам, что указывает на их повышенную жесткость и возможную роль в стабилизации мембраны при ее повреждениях.

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

Секция 4

Аппаратно-методические аспекты синхротронных и нейтронных экспериментов

С 402 Детектор высокого разрешения для визуализации рентгеновского излучения

А.Л. Астафьев¹, М.А. Воеводина¹, А.А. Баранников, Д.А. Зверев¹, А.А. Снигирев¹

¹ МНИЦ Когерентная рентгеновская оптика, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта

Непрямой метод визуализации с использованием цифровых камер и кристаллов сцинтилляторов является наиболее распространённым подходом к получению рентгеновских изображений на станциях синхротронного излучения. Принцип действия таких детекторов основан на поглощении рентгеновского излучения сцинтиллятором и дальнейшем переизлучении фотонов в области видимого спектра. Далее, видимый свет через оптическую систему передается и фокусируется на сенсор цифровой камеры, который преобразует оптическое излучение в цифровой сигнал.

В докладе представлен компактный 2-D рентгеновский детектор с 20 Мп монохромным CMOS сенсором, со скоростью съемки до 19 кадров в секунду при разрешении 5496x3672 пикселей. Сцинтиллятор на основе LuAG:Ce толщиной 20 μm обладает: хорошей чувствительностью, высоким коэффициентом световыхода, малым временем послесвечения и длиной волны эмиссии 535 нм, что хорошо согласуется со спектральной чувствительностью сенсора камеры, что позволило добиться высокого разрешения. Поле видимости детектора 4.7x3.2 мм, эффективный размер пикселя 0.8 μm при физическом размере 2.4 μm .

Тестирование по проверке эффективности детектора был проведен с использованием лабораторного источника Excillum MetalJet D2 с жидким GaIn анодом. В качестве объектов тестирования использовались металлическая сетка с периодом 25.4 μm и структура Siemens Star. Дополнительно, были получены рентгеновские изображения биологических объектов (оса и многоножка).

В результате измерений установлено, что рентгеновский детектор обладает высокой чувствительностью, пространственным разрешением $< 3 \mu\text{m}$, малыми линейными искажениями ($\leq 1 \%$). Такие параметры обеспечивают получение качественных и детализированных рентгеновских изображений, и позволяют использовать детектор в рентгеновском имиджинге, топографии, микроскопии и высокоразрешающей дифрактометрии, а также, для интроскопии на станции СИ, для диагностики пучка, приборов, и юстировки образцов.

1. A. Koch, C. Raven, P. Spanne, A. Snigirev, J.Opt.Soc.Am.A., 1998, p. 1940 – 1951.

С 404 Полимерные преломляющие линзы для источников синхротронного излучения

А.А. Баранников¹, И.И. Лятун¹, Д.А. Зверев¹, В.А. Юнкин², А.А. Снигирев¹

¹ *Балтийский федеральный университет им. И. Канта, г. Калининград*

² *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка*

Высокая универсальность преломляющей рентгеновской оптики во многом обеспечивается разнообразием материалов, которые могут быть использованы для изготовления. Особый интерес представляет полимерная оптика благодаря низкой стоимости производства, низкого поглощения рентгеновского излучения, а также более высокой однородности полимеров по сравнению с бериллием и алюминием.

Существующие технологии микроструктурирования полимерных материалов практически не ограничены в геометрической форме изготавливаемых оптических элементов. Это позволяет создавать одномерные линзы для двумерной фокусировки жесткого рентгеновского излучения, установленные крест-накрест на едином основании (подложке) [1]. Применение аддитивных технологий на основе двухфотонной полимеризации позволило впервые изготовить двумерные рентгеновские линзы с радиусом кривизны – 5 мкм [2]. Уменьшение радиуса кривизны открывает новые возможности в создании компактных рентгенооптических систем субмикронного разрешения [3]. Однако не до конца решенной задачей является устойчивость полимерных материалов радиационному воздействию ионизирующего излучения, которое может негативно влиять на геометрические параметры оптических элементов.

В работе представлены результаты исследования оптических характеристик полимерных составных преломляющих рентгеновских линз, а также их стойкости при воздействии ионизирующего рентгеновского излучения высокой плотности.

1. Snigirev A.A. et al. Focusing properties of x-ray polymer refractive lenses from SU-8 resist layer // *Crystals, Multilayers, Other Synchrotron Opt.* 2003. Vol. 5195. P. 21.

2. Petrov A.K. et al. Polymer X-ray refractive nano-lenses fabricated by additive technology // *Opt. Express.* 2017. Vol. 25, № 13. P. 14173.

3. Barannikov A. et al. Optical performance and radiation stability of polymer X-ray refractive nano-lenses // *J. Synchrotron Rad.* 2019. Vol. 26, № 3. P. 714–719.

С 405 Лабораторный комплекс «SynchrotronLike» для подготовки экспериментов на источниках 4-го поколения

А.А. Баранников, Д.А. Зверев, И.И. Лятун, И.Б. Панормов, А.А. Снигирев

Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта, Калининград

Современные источники синхротронного излучения предоставляют исключительные возможности в исследовании окружающего мира. Однако их использование сопровождается рядом трудностей, связанных с высокой конкуренцией за «экспериментальное время». В данном контексте особое значение приобретает возможность и качество подготовки, проводимой до начала синхротронного эксперимента. В настоящей работе представлен лабораторный комплекс «SynchrotronLike», разработанный для тестирования рентгеновской оптики и подготовки к синхротронным исследованиям [1]. Комплекс позволяет экономить время и ресурсы, затрачиваемые на проведение экспериментов на источниках синхротронного излучения.

Лабораторное оборудование, входящее в состав комплекса «SynchrotronLike», обеспечивает высокую универсальность установки, что позволяет решать широкий спектр задач, не требующих высокого временного и энергетического разрешения. Сюда входят такие методы, как фазовоконтрастная проекционная микроскопия и томография, микроскопия с использованием преломляющих линз, малоугловая рентгеновская дифракция, а также рентгеновская топография с высоким пространственным разрешением. Кроме того, комплекс активно используется для тестирования оптики, изготавливаемой для новых российских синхротронов 4-го поколения и комптоновских рентгеновских источников, а именно преломляющих рентгеновских линз, трансфокаторов и алмазной оптики.

Основным элементом комплекса является микрофокусный рентгеновский источник Excillum MetalJet с жидким GaIn анодом (энергия характеристической линии излучения – 9.25 кэВ). Юстировка оптической схемы производится с помощью двух моторизованных систем позиционирования оптических элементов, ориентированных на различные экспериментальные методы и расположенных напротив двух каналов вывода излучения источника. Регистрация данных производится с помощью детекторного блока, включающего в себя энергодисперсионный детектор и три рентгеновские камеры с разной чувствительностью и пространственным разрешением в диапазоне от 1 мкм до 100 мкм.

1. Barannikov A. et al. Laboratory complex for the tests of the X-ray optics and coherence-related techniques //EUV and X-ray Optics, Sources, and Instrumentation. – SPIE, 2021. – Т. 11776. – С. 117760D.

С 406 Об отказоустойчивых системах управления

*А.В. Беклемишева¹, П.Ю. Макавеев¹, Е.И. Уксусов¹, С.С. Фанченко¹,
П.А. Александров¹*

¹ НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

Актуальной проблемой на сегодняшний день является обеспечение отказоустойчивости в системах управления, работающих в условиях воздействия высокоэнергетических частиц, например, космического излучения, состоящего главным образом из протонов, имеющих энергию до 10^{20} Мэв. [1]

Таких частиц довольно мало, но они в результате взаимодействия с веществом продуцируют нейтроны, часть из которых в результате упругих столкновений с атомами кремния (это основная составляющая современной микросхемы) дают первично выбитые атомы (ПВА) достаточной энергии для генерации электронно-дырочных пар в полупроводнике, и уже они, воздействуя на работающий транзистер, могут дать сбой в работе всего устройства. Сразу ясно, что теоретический расчёт здесь сильно затруднён из-за сложности описанных выше процессов и поэтому нужны эксперименты с реальным облучением и измерением количества сбоев.

Система управления – это сложное устройство, состоящее из множества микросхем различного назначения, поэтому для уменьшения номенклатуры полезно использовать программируемые логические интегральные схемы (ПЛИС), особенно имея ввиду малое количество используемых систем управления.

Для облучения микросхем был выбран Pu-Be источник нейтронов [2], который дает частицы со средней энергией больше, чем энергия нейтронов от реакции деления, и тем более, чем энергия от реактора. Это связано с тем, что просто по кинематике получается, что получаемые ПВА имеют энергию, достаточную для рождения электронно-дырочных пар, которые приводят к сбою. Этот процесс имеет порог приблизительно 4 Мэв по энергии нейтронов.

Был создан стенд для изучения количества сбоев во время облучения. Для повышения отказоустойчивости было предложено использовать два различных метода резервирования: троирование и троирование с временным сдвигом. Были запрограммированы с резервированием [3] на микросхеме Cyclone II Device EP2C8F256 иностранного производства и проводится работа по программированию на ПЛИС 5578ТСО24 производства КТУ «Электроника» г.Воронеж.

1. Голяков А.Д. Исследование отказоустойчивости оптико-электронной навигационной системы автономного космического аппарата. Труды МАИ. Выпуск № 117, 2021.

2. Петюкевич М.С. Оптимизация состава и процессов изготовления радиационно-защитного металломатричного композиционного материала с применением плазменного и ультразвукового воздействия. Диссертация: Томск, 2018.

3. Наваби З. Проектирование встраиваемых систем на ПЛИС. 2022

С 407 Одноракурсная безлинзовая визуализация трёхмерных объектов

А.С. Бусаров¹, А.В. Виноградов¹, Н.Л. Попов¹, И.А. Артюков¹

¹ *Физический институт им.П.Н. Лебедева Российской академии наук*

Рассматривается задача отыскания пространственного распределения комплексной диэлектрической проницаемости объекта произвольной формы. Построен алгоритм решения этой задачи путём обработки фазовых дифракционных картин, полученных при последовательном облучении объекта гауссовыми пучками.

Формально речь идёт о коэффициентной обратной задаче для трёхмерного параболического волнового уравнения или эквивалентной ей обратной задаче квантовой теории рассеяния для частицы, движущейся в двумерном потенциале, зависящем от времени. Для решения последней используется разложение волновой функции системы по функциям гауссовых пучков, распространяющихся в свободном пространстве.

Главными достоинствами подхода являются прямое определение коэффициента преломления наряду с поглощением, а также отказ от вращения или движения образца и источника излучения. Его дальнейшее развитие может привести к появлению качественно нового неразрушающего метода исследования и контроля материалов и образцов.

1. I. A. Artyukov, A. S. Busarov, et al., «An Approach to Direct 3D Imaging with Coherent Light», Journal of Russian Laser Research, С. 1-8. (2024).

С 408 Применение методов машинного обучения для определения структурных характеристик монометаллических атомных нанокластеров Pt по данным XANES спектроскопии

*И.А. Викленко¹, В.В. Срабионян¹, В.А. Дурыманов¹, Я. Н. Гладченко-Джавелекис¹,
Л.А. Авакян¹, Л.А. Бугаев¹*

¹ ЮФУ

Одним из наиболее эффективных неразрушающих методов определения локальной атомной структуры является спектроскопия рентгеновского поглощения, которая позволяет получать информацию о радиальном и угловом распределении атомов относительно поглощающего атома в конденсированных средах, в частности, в составе наночастиц НЧ, которые имеют широкую область для применения. Полученная информация для монометаллических НЧ позволяет определять размер и форму, а для многокомпонентных НЧ – также восстанавливать распределение компонент в составе НЧ. Для получения спектров рентгеновского поглощения в околопороговой энергетической области XANES требуется намного меньше времени и ресурсов, чем для получения рентгеновских спектров большой энергетической протяженности EXAFS. Однако интерпретация XANES спектров достаточно сложна, и для получения вышеупомянутой информации о структуре НЧ необходимо учесть различия в окружении атомов внутри НЧ и ближе к поверхности. В настоящей работе предлагается использовать методы машинного обучения для получения информации о локальной атомной структуре металлических наночастиц Pt по данным спектроскопии XANES, в частности, для получения основных характеристик радиальной функции распределения атомов, которые чувствительны к размеру и форме монометаллических наночастиц (НЧ).

Предложенные уникальные методы и подходы к генерации синтетических данных, а также алгоритмы их разделения на обучающую и тестовую выборку, позволили добиться от модели машинного обучения высокой обобщающей способности при анализе синтетических спектров рентгеновского поглощения, что указывает на надежность предложенных методов и подходов, и, в перспективе, может позволить выполнять анализ широкого класса спектров, включая экспериментальные.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 23-21-00526 <https://rscf.ru/project/23-21-00526/>) в Южном федеральном университете. Выражаю особую благодарность Прядченко В.В. кандидату физ.-мат. наук за значимые замечания и важнейшие советы при проведении исследования.

С 409 Применение методов рентгеновской и нейтронной томографии для изучения керамических объектов культурного наследия

*П. В. Гурьева¹, Е. С. Коваленко¹, М. М. Мурашев¹, К. М. Подурец¹,
Д. В. Журавлев^{1,2}, Т. А. Ильина³, Э. А. Грешников¹, Е. Ю. Терещенко¹,
Е. Б. Яцишина¹*

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²ГИМ, Москва, Россия

³ГМИИ им. А.С. Пушкина, Москва

Неразрушающий характер и возможность варьировать пространственное разрешение от единиц до сотен мкм, а также подбирать тип проникающего излучения (рентгеновское излучение, тепловые нейтроны) делают методы томографии важным инструментом в исследовании изделий из керамики. Томография позволяет получать информацию о деталях конструкции, орнаменте, областях реставрации, содержимом целых сосудов и их объеме, компонентах керамического теста, сохранности и, в некоторых случаях, о технологии производства (гончарный круг, ручная лепка) [1-5]. Тонкие поверхностные слои покрытий [2] и мелкие детали орнамента [3] зачастую удобнее выявлять с помощью рентгеновской томографии, тогда как нейтронная позволяет исследовать керамические изделия, содержащие крупные металлические детали. Примером такого объекта является античная терракотовая голова, найденная в Керченском проливе. С помощью нейтронной томографии помимо способа изготовления этого предмета скульптурной лепкой выявлены детали металлического крепления головы к утерянному основанию [1].

Работа выполнена с использованием оборудования уникальной научной установки «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8».

1. М.В. Ковальчук и др., Кристаллография. Т. 65. № 5. С. 832-838 (2020).
2. Д.В. Журавлев и др., Российские нанотехнологии. Т. 18. № 5. С. 612-635 (2023).
3. Д.В. Журавлев и др., Мат. конф. «АРХОНТ. Античные Реликвии Херсонеса: Открытия, Находки, Теории». С. 61-65 (2023).
4. Т.А. Ильина и др., Сборник тезисов VI Всероссийской научной конференции «Практическая микротомография». С. 30 (2023).
5. П.В. Гурьева и др., Археологические вести. № 41. С. 180-188 (2023).

С 440 Рентгеновский аксикон для источников 4-го поколения

Д.А. Зверев, А.А. Баранников, А.А. Снугирев

Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта, Калининград

Современные источники рентгеновского излучения, такие как синхротроны четвертого поколения и лазеры на свободных электронах (XFEL), способны генерировать когерентное излучение высокой яркости, особенно в жестком рентгеновском диапазоне энергий. Наличие таких пучков способствует разработке рентгеновской оптики нового поколения, оптические свойства которой выходят далеко за рамки простых функций коллимации и фокусировки. Эта оптика позволяет формировать амплитуду и фазу волнового фронта пучка практически с полной свободой, используя самые выдающиеся свойства синхротронного излучения: яркость, монохроматичность и когерентность.

Одной из наиболее ярких демонстраций такой оптики формирования пучка является специальный класс преломляющих оптических элементов, называемых аксиконами. Аксиконы имеют осевую симметрию и способны преобразовывать точечный источник в узкий осевой отрезок. Ранее нами впервые был продемонстрирован рентгеновский параболический преломляющий аксикон в качестве нового типа элемента, формирующего рентгеновские пучки [1]. При когерентном рентгеновском освещении параболический аксикон генерирует пучок Бесселя, распространяющийся вдоль оптической оси в ближнем поле, и кольцевой пучок в дальнем поле.

Такие возможности формирования пучка могут значительно упростить некоторые существующие экспериментальные схемы или даже привести к совершенно новым оптическим решениям для рентгеновских методов, основанных на современных источниках излучения. Оптические преобразования, создаваемые аксиконом, могут быть использованы в приложениях, требующих специального освещения, а также протяженных сфокусированных пучков, например, в методах дифракции, визуализации или диагностики рентгеновского источника [2, 3]. Ранее нами была предложена оптическая схема метода фазово-контрастной микроскопии на основе рентгеновского параболического преломляющего аксикона [4]. Благодаря уникальным оптическим свойствам аксикона новый подход оказался более эффективным для визуализации слабопоглощающих образцов по сравнению с традиционным методом микроскопии.

1. D. Zverev, et al., *Optics Express* 25, 28469-28477 (2017).
2. S. Nazanin, et al., *Optics Express* 31, 2977-2988 (2023).
3. D. Zverev, et al., *SPIE, Advances in X-Ray/EUV Optics and Components XVI* 11837, 1183702 (2021).
4. D. Zverev, et al., *Microscopy and Microanalysis* 24, 300-301 (2018).

С 410 Возможности конфокальной микроскопии для исследования объемных характеристик полупроводниковых материалов

В.П. Калинушкин, О.В. Уваров, С.А. Миронов, В.А. Юрьев

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

Двухфотонная конфокальная микроскопия (ДФКМ) широко используется для исследования различных биологических объектов. Однако возможности ее применения для изучения полупроводниковых материалов известны намного меньше. В данной работе будут рассмотрены на примере широкого класса полупроводниковых материалов перспективы использования ДФКМ для исследования пространственного распределения их люминесцентных характеристик. Базой для этих исследований являются следующие достоинства двухфотонной конфокальной микроскопии :

- возможность с помощью двухфотонного поглощения мощного лазерного излучения генерировать в микрообъеме образца носители тока и осуществлять контролируемое перемещение области возбуждения в нем с малым шагом по всем трем координатам;
- регистрация и снятие спектров люминесценции с малых объемов с возможностью сканирования области наблюдения по плоскости и глубине образца с совмещением с областью возбуждения носителей;

В данной работе использовались конфокальный микроскоп фирмы Carl Zeiss LSM 710 NLO. Эта техника позволила регистрировать трехмерные картины распределения люминесценции на глубину до 2 мм с пространственным разрешением 1-2 мкм. В работе на примере ряда полупроводников группы А2В6 (в первую очередь ZnSe) и перовскитов описываются возможности ДФКМ для исследования распределения различных точечных дефектов в объеме кристаллов и их взаимодействия со структурными дефектами, при межзонной генерации носителей с помощью порядка двухфотонного возбуждения. На примере кристаллов синтетического алмаза и ZnS показаны аналогичные возможности ДФКМ при возбуждении примесей с помощью двухфотонного поглощения. В докладе так же на примере кристаллов CdZnSSe демонстрируются возможности использования ДФКМ для исследования исторических экспонатов.

С 411 Компьютерная программа для расчета поля магнитного ондулятора

Н.С. Клочков¹, Н.В. Смоляков¹

¹ *НИИ "Курчатовский институт"*

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 – расчет плоского ондулятора на постоянных магнитах стандартной конфигурации. Нами была написана компьютерная программа для достаточно простой, наиболее часто встречающейся геометрии ондулятора на постоянных магнитах. Она рассчитывает распределения магнитного поля ондулятора заданной геометрии. Эта программа будет очень полезна при конструировании ондуляторов для установки «СИЛА». Она использует некоторые математические свойства Фурье-преобразования магнитного поля, создаваемого магнетиком в форме параллелепипеда.

Входные параметры для расчета поля задаются посредством текстового файла. На выходе генерируется файл с картой магнитного поля ондулятора, а также рисуется график поля.

Пример файла с входными характеристиками:

```
12.00000 mm - Gap (full) of the undulator
27.00000 mm - Period length of the undulator
4.000000 - Number of blocks per 360-deg rotation
14.00000 - Height of the magnetic blocks
1.000000 - Block Packing factor, 0 < BP <= 1
1.200000 T - Block Residual field
.0000000 mm - Z-coordinate of the field maximum
-28.00000 mm - Minimum longitudinal (Z) coordinate
28.00000 mm - Maximum longitudinal (Z) coordinate
561.0000 - Number of the longitudinal (Z) points
.0000000 mm - Minimum vertical (Y) coordinate
.0000000 mm - Maximum vertical (Y) coordinate
1.000000 - Number of the vertical (Y) points
70.00000 - Number of harmonics in the field >= 1
```

С 412 Совместный анализ трехмерных массивов данных нейтронной и синхротронной томографии

Е.С. Коваленко, К.М. Подурец, М.М. Мурашев, А.А. Пойда, Е.Б. Яцишина

НИЦ «Курчатовский институт»

При исследовании внутреннего строения объектов методом компьютерной томографии в случаях, когда объект состоит из нескольких разнородных частей, может возникнуть задача томографии с применением различных типов проникающего излучения (например, синхротронного излучения и тепловых нейтронов), имеющих разную природу взаимодействия с веществом. Такой подход оказывается полезным при изучении объектов, составленных из веществ, сильно различающихся по ослаблению разных типов проникающего излучения, что часто характерно для геологических, палеонтологических и объектов культурного наследия.

В работе рассмотрен метод совмещения трехмерных массивов данных томографической реконструкции, полученных в различных экспериментальных условиях. Метод основан на возможности определения координат четырех опорных точек, расположенных внутри или на поверхности объекта исследования без применения искусственных контрастных меток. Приводятся примеры совмещения результатов нейтронных и синхротронных томографических экспериментов, выполненных при исследовании объектов культурного наследия.

Работа выполнена с использованием оборудования уникальных научных установок «Нейтронный исследовательский комплекс на базе реактора ИР-8» и «Курчатовский специализированный источник синхротронного излучения («КИСИ-Курчатов»)).

С 413 Станция пробных экспериментов, студенческих и отладочных работ «ПРОСТОР» для источника синхротронного излучения четвертого поколения «СИЛА»

Н.А. Колышкин^{1,2}, Е.В. Храмов^{1,3}, А.А. Калоян¹, А.А. Гогин¹, И.А. Лихачёв¹

¹*НИЦ «Курчатовский институт», Москва*

²*МФТИ (ГУ), Москва*

³*РТУ МИРЭА, Москва*

Экспериментальные установки класса «мегасайенс» предъявляют высокие требования к подготовке персонала. Молодым сотрудникам, студентам и аспирантам требуется обучение в условиях реального эксперимента с пучком синхротронного излучения (СИ). В условиях высокой загрузки экспериментальных станций со сложными оптическими схемами, требующими много времени для перенастройки с одного эксперимента на другой, становится актуальным создание отдельной учебной станции, на которой будут выполняться измерения, входящие в состав студенческих лабораторных и квалификационных работ.

Идеи, заложенные в основу станции «ПРОСТОР» - простота, универсальность и модульность конструкции. В качестве источника излучения будет использован поворотный магнит. Оптическая схема будет включать в себя типовой двухкристалльный монохроматор с диапазоном энергий пучка 4.5 – 35 КэВ, излучение с выходной щели которого будет напрямую подаваться на большой оптический стол, предназначенный для размещения модульных экспериментальных стендов, реализующих методы:

- рентгеновской дифракции
- рентгеновской томографии
- рентгеноабсорбционной спектроскопии

Предполагается, что в ходе лабораторных работ студенты будут самостоятельно собирать и настраивать стенды, и на практике ознакомятся с физическими принципами, лежащими в основе каждого из методов.

Также на оптическом столе могут размещаться образцы или прототипы оборудования в случаях, когда для проверки работоспособности необходим интенсивный рентгеновский пучок с непрерывным спектром. Станция может быть использована как испытательный полигон для оборудования, закупаемого и создаваемого НИЦ КИ – рентгеновских оптических элементов, вакуумных систем и детекторов, а также для экспериментальных стендов, создаваемых пользователями для работы на других станциях, например, ячеек для исследования образцов при повышенных температурах и давлениях.

Третья задача, которую может решать станция – эксперименты с единичными пилотными образцами, целесообразность исследования которых на основных станциях синхротрона невозможно обосновать без предварительных измерений с использованием СИ. Предполагается, что доступ

на станцию пользователям будет открыт в обход основной системы заявок, в том числе - с возможностью оплаты из средств молодежных грантов.

Работа ведётся в рамках СЧ НИОКР «СИЛА-ЭС».

С 414 Двухкристальный монохроматор на основе изгибных адаптивных элементов рентгеновской оптики для проведения синхротронных исследований с временным разрешением

В.А. Коржов¹, А.И. Проценко¹, Я.А. Элиович¹, А.В. Таргонский¹, А.Е. Благов¹

¹НИИЦ «Курчатовский институт»

Рентгеновские методы исследования с временным разрешением позволяют изучать динамические процессы и неравновесные состояния вещества. В зависимости от требуемого временного масштаба быстродействие инструмента достигается по-разному. Для относительно медленных процессов, в масштабе до 10-2 с оно достижимо за счёт быстрой перестройки параметров рентгеновского пучка. Один из способов такой перестройки основан на применении пьезоэлектрических изгибных элементов адаптивной рентгеновской оптики (АЭРО), позволяющих непрерывно, быстро и прецизионно изменять пространственно-спектральные характеристики рентгеновского пучка непосредственно в процессе его проведения измерения. АЭРО показали свою высокую эффективность при реализации методик быстрой рентгеновской спектроскопии поглощения в однокристалльной схеме монохроматизации синхротронного излучения.

С целью дальнейшего развития концепции двухкристального монохроматора на основе АЭРО и устранения недостатков, присущих однокристалльной схеме монохроматизации, был разработан прототип двухкристального монохроматора на основе синхронизированных изгибных АЭРО. Данный прототип установлен на станции «ПРО» синхротронного источника «КИСИ-Курчатов» для дальнейшей реализации методик быстрой рентгеновской дифрактометрии и спектроскопии поглощения с временным разрешением до 10-2 с.

Продемонстрированы результаты калибровки и синхронизации входящих в состав монохроматора АЭРО, получена оценка его функциональных характеристик – диапазонов угловой и спектральной перестройки, смещения пучка и стабильности его работы.

1. А. И. Проценко, А. Е. Благов и др., УФН. 191, 1 (2021).
2. А. И. Проценко, Я. А. Элиович и др., УФН. 193, 12 (2023).

С 415 Применение компактного трансфокатора для рентгеновских источников нового поколения

*А.С. Коротков, А.С. Нарикович, Д.А. Зверев, И.И. Лятун, А.А. Баранников,
И.Б. Панормов, А.А. Снигирев*

Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград

Опыт эксплуатации источников третьего поколения показал, что достижение передовых результатов обусловлено развитием технологической и инструментальной базы синхротронных станций. Одним из наиболее ярких примеров такого внедрения новых научно-технологических решений является преломляющая рентгеновская оптика [1], ставшая неотъемлемым базовым инструментарием экспериментальных установок, благодаря простоте в настройке оптической схемы и способности выдерживать высокие тепловые нагрузки [2]. Их широкое распространение обусловлено в том числе благодаря созданию трансфокаторов – оптических объективов, способных изменять положение фокуса в зависимости от количества преломляющих линз на пути синхротронного излучения. Последним словом в данном направлении является компактный трансфокатор (КТ), позволяющий управлять оптическими элементами независимо друг от друга [3]. Данная особенность открывает возможность использования преломляющей оптики в экспериментах с тонкой регулировкой энергии и фокусного расстояния.

В работе представлены результаты тестирования КТ в экспериментах по получению микропучка в режиме фокусировки, малоугловой рентгеновской дифракции и микроскопии с подстройкой резкости, осуществляемой за счёт ввода и вывода отдельных линз из пучка. Плавная *in-situ* настройка фокусного расстояния позволяет использовать КТ в XANES-EXAFS спектроскопии, применяемой для структурного анализа вещества: удерживать положение фокуса при изменении энергии, изменять форму и размер пучка за счёт выполнения дефокусировки. В физике высоких давлений, использование изменение фокусного расстояния позволит исследовать локальные изменения в структуре кристаллической решётки путём сканирования по всему объёму крупных образцов.

На данный момент, компактный трансфокатор готовится к установке на станции 1-1 “Микрофокус” синхротронного источника “СКИФ” (г. Новосибирск), на которой реализуются методы рентгеновской спектроскопии и микроскопии.

1. A. A. Snigirev, I. I. Snigireva, B. Lengeler, V. G. Kohn. *Nature*. 384, 49. (1996)
2. A. A. Snigirev, B. Filseth, et al. *High Heat Flux and Synchrotron Radiation Beamlines*. 3151, 164–170. (1997)
3. A. S. Narikovich, M. Polikarpov, et al. *J. Sync. Rad. IUCr*. 26, 1208-1212. (2019)

С 416 Высокоразрешающая порошковая дифракция на станции Белок/РСА синхротрона «КИСИ-Курчатов»

Е.С. Куликова, Р.Д. Светогоров

НИЦ «Курчатовский институт»

Современные достижения метода порошковой дифракции на синхротронных источниках излучения обусловлены как характеристиками самого излучения, так и современными возможностями детекторных систем. Повышенная яркость и интенсивность, в отличие от лабораторных источников, ускоряют процесс сбора данных и дают возможность исследовать слабо рассеивающие образцы.

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 о 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. Помимо съемки при комнатной температуре у объектов исследований можно изучать фазовые переходы, как при нагревании, так и при охлаждении.

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.

С 417 Создание структурированных катодов с покрытием В₄С для детекторов тепловых нейтронов

*А.К. Курилкин¹, В.И. Боднарчук^{1,2,3}, М.Р. Гафуров⁴, А.Г. Колесников^{1,5},
А.С. Оводов¹*

¹ *Лаборатория Нейтронной Физики им. И.М. Франка, Объединенный Институт Ядерных Исследований*

² *Государственный Университет «Дубна»*

³ *Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»*

⁴ *Институт Физики, Казанский Федеральный Университет*

⁵ *Инжиниринговый Центр, Государственный Университет «Дубна»*

В данной работе рассматривается возможность создания структурированных катодов с покрытием $^{10}\text{В}_4\text{С}$ для детекторов тепловых нейтронов. Катоды изготавливаются из Al фольги толщиной 50 мкм и имеют поверхность Λ -образной формы. Перспективность использования структурированных катодов оценена по расчетам теоретической эффективности однослойного детектора тепловых нейтронов в зависимости от высоты Λ -образной формы, угла при её вершине, расстоянии между соседними вершинами, а также длины волны нейтрона и толщины напыления $^{10}\text{В}_4\text{С}$. В качестве инструмента для численного моделирования методом Монте-Карло использовался программный пакет Geant4.

С 418 Возможности дифракционной станции Белок/РСА на источнике синхротронного излучения КИСИ-КУРЧАТОВ. Яркие результаты 2023/2024 года

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

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Исследования в области структурной химии и биологии являются одним из начальных этапов огромного количества новых научных разработок и исследований в современном мире. Строение вещества помогает подтвердить синтез, 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 НИЦ «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 до сложных макромолекулярных комплексов (параметры ячейки 100-200 ангстрем).

В докладе будут освещены текущие экспериментальные возможности станции сейчас и после апгрейда магнитной системы курчатовского источника синхротронного излучения, а также показаны яркие результаты, полученные за последние годы.

1. V.A. Lazarenko, P.V. Dorovatovski, V.V. Zahavichan, A.S. Burlov, Y.V. Koshchienka, V.G. Vlasenko, V.N. Khrustalev, Crystals. 2017. V. 7. P. 325-1-19

2. Svetogorov R.D, Dorovatovskii PV, Lazarenku VA. Belok/XSA diffraction beamline for studying crystalline samples at Kurchatov Synchrotron Radiation Source // Crystal Research and Technology. – 2020. – Т. 55. – №5. – С. 1900184.

С 419 Проект станции фотоэлектронной спектроскопии в жестком рентгеновском диапазоне для комплекса «СИЛА»

А.М. Лебедев, В.Г. Назин, Р.Г Чумаков, В.И. Сергеенко

НИЦ «Курчатовский институт»

Представлен проект экспериментальной станции фотоэлектронной спектроскопии с применением жесткого рентгеновского излучения (НАХРЕС – HArd X-ray PhotoElectron Spectroscopy) на источнике синхротронного излучения «СИЛА» [1]. Станция предназначена для спектроскопических исследований электронной структуры твердого тела с использованием возбуждающего излучения в диапазоне 2-15 кэВ. В отличие от классической фотоэлектронной спектроскопии, применение жесткого излучения имеет преимущества: возможность исследования свойств материалов в объемной фазе; нечувствительность к поверхностным адсорбентам; определение элементного состава и химического состояния по глубине; неразрушающий контроль интерфейсов (границ раздела) тонкоплёночных и многослойных структур [2].

Станция будет расположена на канале с ондуляторным источником излучения. Монохроматизация возбуждающего излучения будет обеспечена двухкристальным монохроматором в сочетании с пост-монохроматором с разрешающей способностью по энергии порядка 10^5 . Предполагаемые к реализации методики исследований включают в себя фотоэлектронную спектроскопию, расширенную возможностями по угловому и спиновому разрешению, спектроскопию поглощения.

Метод НАХРЕС, требующий ярких источников излучения, может дать важную информацию не только по фундаментальным научным задачам, но и по прикладным вопросам, связанными с технологиями электроники, энергетики, биосовместимых материалов.

1. М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, А.А. Гарматина и др. Лазерно-Синхротронный Комплекс НИЦ «Курчатовский Институт» // Кристаллография. – 2022. – Т. 67, № 5. – С. 771–784. DOI: 10.31857/S0023476122050083

2. С. Kalha, N.K. Fernando, P. Bhatt, et. al. J. Phys.: Condens. Matter 33 (2021) 233001 Topical Review. DOI 10.1088/1361-648X/abeacd

С 420 Нейтронные малоугловые спектрометры на импульсном источнике ИН-06 ИЯИ РАН

*В.С. Литвин^{1,2}, Д.А. Бучный¹, Д.Н. Трунов¹, С. Н. Аксенов¹, В.Н. Марин¹,
А.В. Чураков³, В.И. Боднарчук^{3,4}, Р.А. Садыков¹, А.В. Белушкин³*

¹Институт ядерных исследований РАН

²Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН

³Объединенный институт ядерных исследований

⁴Государственный университет "Дубна"

На импульсном источнике нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН работают нейтронный рефлектометр-малоугловой спектрометр «Горизонт» и многофункциональный нейтронный спектрометр «МНС».

Методом МУРН на установке «Горизонт» исследована структура немагнитных жаропрочных сплавов на основе Ni, и Ti. Данные сплавы представляют интерес как материал для изготовления нейтронографических устройств для исследований в магнитных полях, в том числе нейтронными методами. Измерение спектров МУРН на образцах сплавов необходимо для выбора оптимального материала для изготовления камер высокого давления. Исследована структура сплава 40ХНЮ (Ni — осн., 38-41% Cr, 3,3-3,8% Al), а также сплавов TiZr (60% Ti, 40% Zr) — нулевая матрица, 38ХНВЮ (Ni — осн., 36-39% Cr, 5% W, 3,0-3,8% Al), и ВТ-8(Ti — осн., 6-7% Al, 2,8-3,8% Mo). Измерения проводились в щелевой геометрии.

Многофункциональный нейтронный спектрометр «МНС» имеет в своем составе времяпролетный дифрактометр высокого разрешения [1]. Также ведется дооснащение установки кольцевыми детекторами на основе многослойных сцинтилляционных счетчиков разработки ИЯИ РАН [2]. Эти счетчики позволяют создавать кольцевые детекторы без слепых зон. Кроме того, данная установка оснащена двухкоординатным детектором нейтронов — многопроволочной пропорциональной камерой для малоуглового рассеяния. Также данный детектор позволяет применить «программную» временную фокусировку. Благодаря такому подходу можно получить дифрактограммы с большого телесного угла без потери разрешения, как это делается в дифрактометрах с временной фокусировкой. Аналогичный подход, но в обратном пространстве, был предложен для сжатия данных в [3].

1. Кузнецов С.П., Литвин В.С., Марин В.Н., и др., Поверхность, 5, 29 (2018).
2. Патент на полезную модель, RU №177857, Кольцевой детектор тепловых нейтронов, авторы: Марин Виктор Николаевич, Садыков Равиль Асхатович, Литвин Василий Сергеевич, Аксенов Сергей Николаевич, Трунов Дмитрий Николаевич. Патентообладатель — ИЯИ РАН.
3. Балагуров А.М., Островной А.И., Шибаев В.Д. Регистрация нейтронограмм.

С 427 Аппаратура для внешнего воздействия на образец: камеры высокого давления, магниты и криостаты

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

ИЯИ РАН, Москва

Нейтроннографические исследования конденсированных сред наиболее информативны при использовании различных аппаратурных средств внешнего воздействия на исследуемые образцы.

В нейтронных центрах коллективного пользования существуют подразделения, ответственные за данные устройства (sample environment). Желательна при этом автоматизация таких устройств и их синхронизация с измерениями. Также для установок с многодетекторными системами регистрации необходимы программы сжатия и обработки данных [1]. Т.к. нейтроннографические исследования требуют объемов образцов порядка 1 см^3 , возникают соответствующие требования к устройствам для создания условий на образце. Так камеры системы поршень-цилиндр имеют объем до $0,3 \text{ см}^3$ для дифракции и до $1,6 \text{ см}^3$ для неупругого рассеяния [2]. Криостаты для нейтроннографических исследований требуют большой диаметр шахты, особенно для измерений при высоких давлениях и низких температурах одновременно [3]. Также представляет интерес исследования в магнитных полях, особенно при низких температурах и высоких давлениях. Поля могут достигаться с помощью электромагнитов [4], импульсных магнитов [5] или сборок постоянных магнитов.

В ИЯИ РАН для нейтроннографических установок были изготовлены криостаты замкнутого цикла, позволяющие достигать температур 4К и 10К при мощности 0,5 Вт при любой ориентации образца относительно пучка, и, благодаря внутреннему диаметру до 70 мм, позволяющие проводить измерения с камерами системы поршень-цилиндр при давлениях до 10 кбар. Также имеется устройство на основе постоянных магнитов, позволяющее достигать полей до 1,2 Тл и устройство для измерений при высоких давлениях в криостатах шахтного типа.

1. Балагуров А.М., Островной А.И., Шибяев В.Д. “Регистрация нейтронограмм в координатах пространства обратных векторов” Препринт ОИЯИ № Р10-86-313, Дубна, 1986.
2. R A Sadykov, Th Strassle, A Podlesnyak, et al., Journal of Physics: Conf. Series 941 , 012082(2017) doi :10.1088/1742-6596/941/1/012082
3. Черников А.Н.; Буздавин А.П.; Журавлев В.В. и др. //Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010 – №. 11 – С. 29-34.
4. Р.А.Садыков. Нейтроннография магнитной спирали монокристалла гексаферрита $\text{BaCo}_2\text{Tl}_2\text{Fe}_8\text{O}_{19}$ типа М в сильном магнитном поле. Тезисы-ФСНИ 2023.
5. <https://www.ill.eu/users/support-labs-infrastructure/sample-environment/equipment/high-magnetic-field/horizontal-field-magnets/cryomagnet-211ilpmf08>

С 421 Двумерная высокоразрешающая рентгеновская микрооптика

И.И. Лятун, А.С. Коротков, С.А. Шевырталов, С.С. Лятун, А.А. Снигирев

*Международный научно-исследовательский центр
“Когерентная рентгеновская оптика для установок Мегасайенс”,
Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта*

В работе показана возможность изготовления компактных рентгеновских микролинз из любых кристаллических и аморфных материалов (бор, алмаз, оксид кремния) с использованием метода ионно-лучевой литографии на базе FIB-SEM систем. Метод позволяет изготавливать линзы с предельным радиусом кривизны 1-3 мкм и выполнять их сборку в микрообъективы [1]. Новое поколение микрооптики является перспективным направлением развития методов высокоразрешающей когерентной рентгеновской визуализации и микроскопии на современных дифракционно-ограниченных синхротронных источниках для широкого круга фундаментальных и прикладных исследований.

Работа была выполнена благодаря финансовой поддержке гранта Российского научного фонда No 23-22-00422, <https://rscf.ru/project/23-22-00422/>.

1. Medvedskaya P. et al. //Optics Express. – 2020. – Т. 28. – №. 4. – С. 4773-4785.

С 422 Бериллиевая преломляющая оптика для новых источников синхротронного излучения

*И. И. Лятух, И.Б. Панормов, А.А. Баранников, А.С. Коротков, Д.А. Зверев,
А. А. Снигирев*

*МНИЦ “Когерентная рентгеновская оптика для установок Мегасайенс”,
Балтийский Федеральный Университет имени Иммануила Канта, Калининград*

Современные источники синхротронного излучения обладают высокой степенью пространственной когерентности и высокой яркостью. Эффективным подходом управления пучками жёсткого рентгеновского излучения является использование преломляющей рентгеновской оптики при проектировании научно-исследовательских станций на синхротронных источниках и при реализации передовых методов исследования.

В МНИЦ “РО” БФУ им. И. Канта разработана и развивается технология изготовления преломляющей оптики из различных материалов для применения в широком диапазоне энергий – >2 кэВ и создания эффективных оптических решений. Наиболее востребованной оптикой для большинства приложений является бериллиевая оптика, обладающая минимальным поглощением излучения.

В ближайшее время планируется ввод в эксплуатацию источника синхротронного излучения 4+ поколения с энергией 3 ГэВ - ЦКП “СКИФ” и 6 научно-исследовательских станций первой очереди. Станции 1-1 «Микрофокус», 1-2 и «Структурная диагностика» будут оснащены комплектами бериллиевых линз. Фокусировка излучения с высоким пространственным разрешением будет выполнена с использованием короткофокусных линз с радиусом кривизны $R = 50$ мкм с минимизированным поглощением. Задачи транспорта рентгеновского излучения от виглеров с высокой тепловой и радиационной нагрузкой будут выполнены с помощью специальной оптики с рабочей апертурой более 1 мм по вертикали и более 10 мм по горизонтали.

В работе представлены результаты исследования, тестирования и оценок оптических характеристик бериллиевой оптики для современных источников синхротронного излучения.

С 423 Рентгеновские трансфокаторы - многоцелевые оптические устройства на основе составных преломляющих линз

*А.С. Нарикович, И.И. Лятун, Д.А. Зверев, А.С. Коротков, А.А. Баранников,
И.Б. Панормов, А.А. Снигирев*

Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград

Источники синхротронного излучения (СИ) четвертого поколения открывают новые возможности для научных исследований в широком спектре дисциплин благодаря передовым свойствам генерируемого излучения и развитию приборной базы, способной использовать их уникальные характеристики. Опыт применения источников третьего поколения показал, что одним из успешных примеров внедрения новых научно-технологических решений стали составные преломляющие линзы (СПЛ) [1] и устройства на их основе — трансфокаторы [2]. Эти устройства используются не только для фокусировки, но и для подготовки, транспорта и формирования пучков СИ в широком диапазоне энергий, сохраняя «in-line» геометрию распространения излучения.

В работе представлены рентгеновские трансфокаторы, разработанные в Международном исследовательском центре «Когерентная рентгеновская оптика для установок Мегасайенс» БФУ им. И. Канта. Масштабируемая конструкция устройств обеспечивает универсальность их применения и возможность создания индивидуальных конфигураций в зависимости от экспериментальных требований, а также совместимость со всеми существующими типами двумерных и одномерных преломляющих линз [3]. Основные варианты механической конструкции рентгеновских трансфокаторов включают системы с дискретным переключением линз, обеспечивающие линейную зависимость перемещения фокуса, и системы с бинарным переключением линз, что также предоставляет возможности для точной настройки параметров фокусировки и коллимации. Трансфокаторы совместимы с высоким вакуумом и тепловыми нагрузками, легко сочетаются с другими оптическими элементами, что позволяет оптимизировать задачи управления пучками СИ для высокоразрешающего имиджинга, спектроскопии, когерентной дифракции и томографии микро- и нано-объектов.

1. Snigirev, Anatoly, et al, Nature 384.6604 (1996): 49-51.
2. Vaughan, Gavin BM, et al., Journal of synchrotron radiation 18.2 (2011): 125-133.
3. Narikovich, A. S., et al., Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques 17.6 (2023): 1258-1266.

С 424 Станция «БиоМУР» для исследований структуры слабоупорядоченных систем методом малоуглового рентгеновского рассеяния

*Г.С. Петерс¹, П.В. Конарев¹, В.В. Волков¹, В.Р. Самыгина¹, М.О. Ершова²,
А.А. Велигжанин¹*

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

² *Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича*

Станция «БиоМУР» для исследований вещества методом малоуглового рентгеновского рассеяния установлена на Курчатовском источнике синхротронного излучения на поворотном магните. На станции используется треугольный монохроматор из монокристалла Si (111) с апертурой 10x4 мм и рентгеновское зеркало полного внешнего отражения длиной 1000 мм. Длина волны на станции 0.1445 нм, минимальный размер сфокусированного на детекторе пучка 480x260 мкм, поток фотонов на образце 1.86×10^{10} фот/с. Для уменьшения фонового рассеяния работают нерассеивающие щели и вакуумные окна из 40-мкм слюды. Имеющиеся держатели образцов позволяют одновременно размещать до 5 жидких образцов с возможностью термостатирования в диапазоне от -30 до +90 градусов и до 20 образцов произвольной формы с возможностью точного позиционирования на пучке. Доступно проведение экспериментов в микрофлюидной ячейке, что позволяет исследовать динамику процессов в жидкостях.

В качестве примеров исследований на станции приведены результаты исследования структуры и олигомерного состава растворов аптамеров, используемых в качестве иммобилизованных на поверхности молекулярных зондов для детектирования опухолевых антигенов при диагностике онкологических заболеваний [1] – в частности, для аптамера, специфически связывающегося с белком CA125 (являющегося биомаркером опухолевых заболеваний) определено, что при комнатной температуре он находится в растворе в виде мономера и имеет вытянутую структуру с размером вдоль длинной оси 10.4 нм. Исследована олигомеризация альбумина под действием ионов хрома и никеля, которые входят в состав множества сплавов, химикатов и пигментов и могут являться причиной аллергических контактных дерматитов [2]. С помощью МУРР установлено, что в присутствии хрома происходит образование октамеров вытянутой формы, а в присутствие никеля преобладают димеры, а октамеры образуются только при высокой концентрации ионов этого металла.

Исследование олигомеризации альбумина под действием ионов металлов выполнено в рамках госзадания НИЦ «Курчатовский Институт».

1. Ershova M. O., Taldaev A., Konarev P. V., Peters G. S., et al., *Biomolecules* 13 (2023): 1776
2. Buters J., Biedermann T. // *J. Invest. Dermatol.* 2017. V.137. P.274.

С 425 Интерпретируемое машинное обучение и мультиэлементные библиотеки экспериментальных спектров для анализа XAS спектров одноцентровых катализаторов

Б.О. Проценко¹, Ю. Какучи², С.А. Гуда^{1,3}, А.В. Солдатов¹, О.В. Сафонова⁴,
К.К. Конперет², А.А. Гуда¹

¹ Международным исследовательский институт интеллектуальных материалов
Южного федерального университета

² Химический факультет ETH Zürich, Цюрих, CH-8093 Швейцария

³ Институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича
Южного федерального университета

⁴ Институт Поля Шеррера, 5232 Филлиген, Швейцария

Рентгеновская спектроскопия поглощения (XAS), являясь мощным методом исследования локальной атомной структуры и химического состояния активных центров катализаторов в режимах *in situ* и *operando*, тем не менее, для своей интерпретации требует решения сложной обратной задачи. Применение алгоритмов машинного обучения (ML) для обработки XAS-спектров, демонстрирующее большой потенциал в извлечении количественной информации о локальной атомной и электронной структуре металлических центров катализаторов [1], страдает от отсутствия библиотек спектров-эталонов и устоявшихся инструментов анализа данных. В данной методической работе мы представляем экспериментальную библиотеку исчерпывающе охарактеризованных кристаллических и молекулярных соединений Cr и V в различных локальных окружениях и электронных состояниях, а также новые подходы к применению интерпретируемого машинного обучения для расшифровки спектров XAS катализаторов в ходе реакции на примере нанесённых катализаторов на основе ванадия (VO_x/TiO_2) в процессе окислительного дегидрирования этанола.

Оба набора данных и разработанные инструменты для машинного обучения на данных XAS, включая предобработку спектров рентгеновского поглощения, имплементированы в виде программ с исходным кодом и предлагаются сообществу в виде интерактивного Jupyter ноутбука и веб-приложения.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства Науки и Высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2021-1363.

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.

С 426 Применение нейросетевой модели для оптимизации геометрии кристаллических структур

С.С. Савин^{1, 2}, А.Л. Тригуб¹

¹ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»*

² *МГТУ им. Н.Э. Баумана*

В данной работе при помощи нейросетевой модели CHGNet проводилась оптимизация серии суперячеек кристаллических структур мышьяк-содержащих, органических соединений, карбонатов и дефектных структур с замещенными атомами. По результатам оптимизации получены структурные параметры указанных соединений и их межатомные расстояния, проведено сравнение с результатами, полученными другими методами, рассчитано относительное среднеквадратичное отклонение от экспериментальных данных. Для большинства соединений относительная ошибка в определении параметров решетки составляет менее 0.02.

Помимо оптимизации геометрии проведен расчет спектров EXAFS соединения $FeAsS$ при помощи сочетания нейросетевой модели CHGNet [1] и FEFF85L [2], где с помощью CHGNet производился расчет молекулярной динамики. Определены оптимальные параметры МД-моделирования и расчета тонкой структуры $FeAsS$ с точки зрения большей точности и меньшей времязатратности вычислений.

Модель CHGNet характеризуется низкой точностью при оптимизации карбидов. МД-моделирование с шагом 2.4 фс и 12500 итерациями производится с достаточной степенью точности при описании первой координационной оболочки результирующего спектра XAFS соединений с малым числом атомов.

1. B. Deng, P. Zhong et al., Nature Machine Intelligence. - 2023. - №5. – P. 1031–1041.
2. A.L. Ankudinov, B. Ravel, et al., Phys. Rev. - 1998. - №58-12. - P. 7565-7576

С 401 Исследование поверхности методами рентгеновской рефлектометрии и фазового контраста на примерах графена и сапфира

Б.С. Роцин¹, Т.С. Аргунова², В.Г. Кон¹, А.Д. Нуждин¹, С.П. Лебедев²

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва

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

В статье представлены результаты решения двух задач: определение наношероховатости эпитаксиального графена и измерение высоты микро–ступенек на ростовой поверхности сапфира, объединенные общей целью получения однородных пленок графена на больших площадях подложек карбида кремния или сапфира. Для изучения поверхностей с разными свойствами применяются разные подходы: рентгеновская рефлектометрия и метод фазово-контрастного изображения в синхротронном излучении. Исходя из возможностей методов, установлены среднестатистические и локальные параметры рельефа двух видов. Шероховатость террасно–ступенчатой наноструктуры на поверхности графена определена в зависимости от ориентации террас [1]. Для измерения высоты ступеньки порядка одного микрона на вицинальной грани сапфира использован метод фазового контраста, и такое разрешение данным методом было получено впервые [2]. Значение высоты ступеньки, измеренной рентгеновским методом, подтверждены данными атомно-силовой микроскопии.

1. B. S. Roschin, T. S. Argunova *et al.*, *Materials* 15, Art. No 7669 (2022).
2. T. S. Argunova, V. G. Kohn *et al.*, *Phys. Lett. A*, 525, 129901 (2024).

С 439 Применение методики малоуглового рентгеновского рассеяния в изучении быстропротекающих процессов

*И.А. Рубцов¹, К.А. Тен², Я.В. Зубавичус¹, Э.Р. Прууэл², А.О. Кашкаров²,
Б.П. Толочко³*

¹ *Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" Федеральный исследовательский центр "Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук" (ЦКП "СКИФ")*

² *Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИГиЛ СО РАН)*

² *Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН)*

Эксперименты по малоугловому рентгеновскому рассеянию (МУРР) с высоким временным разрешением для изучения быстропротекающих процессов (например, при детонации взрывчатых веществ) совместно проводятся ИГиЛ СО РАН и ИЯФ СО РАН начиная с 2000х годов. Одной из основных целей этих экспериментов является восстановление динамики конденсации углерода путем анализа распределений МУРР за фронтом детонации, измеренных в режиме реального времени.

Данная работа посвящена совершенствованию методики малоуглового рентгеновского рассеяния с высоким временным разрешением в рамках развития подходов к использованию высокоэнергетических пучков для реализации на станциях ЦКП «СКИФ». В работе разобраны примеры применения данной методики в исследовании быстропротекающих процессов и приведены концептуальные решения, которые будут применены на Станции «Быстропротекающие процессы» ЦКП «СКИФ». Использование нового уникального оборудования позволит существенно увеличить качество получаемых экспериментальных данных и продвинуется вперед при изучении процесса детонации взрывчатых веществ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН.

С 428 Алгоритм восстановления флуоресцентных спектров, полученных в условиях высокой загрузки детектора

А. И. Сафонов¹, К. В. Николаев¹, С. Н. Якунин¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

Метод стоячих рентгеновских волн (СРВ) при нормальном падении первичного пучка с регистрацией флуоресцентного излучения в направлении линий Косселя предполагает сбор данных под скользящими углами. При таком подходе пространственное распределение интенсивности флуоресценции определяется её интерференцией в исследуемой структуре. Это открывает возможность развития бессканирующего подхода к методу СРВ путём покадровой регистрации вторичного излучения. Различия в форме кривых выхода флуоресценции для каждой характеристической линии повышают информативность и чувствительность метода к особенностям структуры.

Для постановки экспериментов бессканирующим методом СРВ необходимы усовершенствование и оптимизация процесса сбора и обработки данных позиционно-чувствительных энергодисперсионных детекторов для повышения эффективности счёта и точности измерений, а также сокращения длительности проведения экспериментов. При увеличении регистрируемого потока фотонов в спектре появляются несуществующие энергетические линии – пики наложений. Это явление возникает, когда два или более фотонов регистрируются как одно событие. Обработка наложений и их «разложение» на исходные реальные энергетические линии позволяет значительно увеличить загрузку детектора без потери соотношения сигнал/шум.

В представленной работе развита модель образования наложений рентгеновских фотонов в полупроводниковых энергодисперсионных детекторах, в основе которой лежит модифицированное распределение Пуассона, учитывающее количество участвующих в событиях фотонов.

Предложен алгоритм восстановления флуоресцентных спектров, основанный на принципе сохранения, сгенерированного в процессе экспозиции заряда и теореме о свёртке, позволяющий устранить искажения в количестве отсчетов в каналах детектора и на порядок уменьшить длительность экспозиции для набора данных.

Тестирование алгоритма осуществлялось на сгенерированных данных и на реальном флуоресцентном сигнале слоистых систем W-Ti-W. Показаны результаты восстановления данных спектрально-селективных исследований в бессканирующем режиме в геометрии «нормальное падение – скользящий выход флуоресценции».

С 429 Расчет параметров первого рентгеновского зеркала каналов вывода синхротронного излучения – геометрия, тепловые и вибрационные нагрузки

А.А. Сенкевич, Р.Г. Чумаков

НИЦ «Курчатовский институт»

Рентгеновские зеркала скользящих углов падения широко применяются для фокусировки и коллимации пучков синхротронного излучения (СИ). Однако, высокая мощность падающего излучения приводит к неизбежным тепловым нагрузкам и, как следствие, термическим деформациям зеркала, что негативно сказывается на параметрах отраженного пучка. Уменьшить угловые и линейные сдвиги рабочей поверхности возможно за счет оптимизации габаритов зеркала и системы водяного охлаждения, а также путем изменения прямоугольного профиля зеркала, снижая тем самым поперечные температурные градиенты [1]. Помимо этого, на интенсивность теплоотвода влияет скорость течения жидкости в трубках охлаждения, при значительном росте которой могут возникнуть вибрации достаточно больших амплитуд.

В настоящей работе представлены результаты расчета первого зеркала канала вывода СИ, включающий в себя определение оптимальных геометрических параметров рабочей поверхности и профиля зеркала, расчет теплонагруженного и деформируемого состояния, а также оценку вибрационных нагрузок, оказываемых на рабочую поверхность системой водяного охлаждения. Учет термических и вибрационных искажений на отражающие свойства первого рентгеновского зеркала становится особо актуальным при применении рентгеновской оптики на синхротронах четвертого поколения и лазеров на свободных электронах, обладающих рекордными значениями плотностями мощности излучения. Таким образом, проводимые расчеты является важным этапом реализации Федеральной научно-технической программы развития синхротронный и нейтронных исследований, и исследовательской инфраструктуры [2].

1. Zhang L. et al. Thermal distortion minimization by geometry optimization for water-cooled white beam mirror or multilayer optics //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2013. – Т. 425. – №. 5. – С. 052029.

2. Постановление Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287 "Об утверждении Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы"

С 430 Экспериментальный стенд для методических работ с поляризованными нейтронами 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

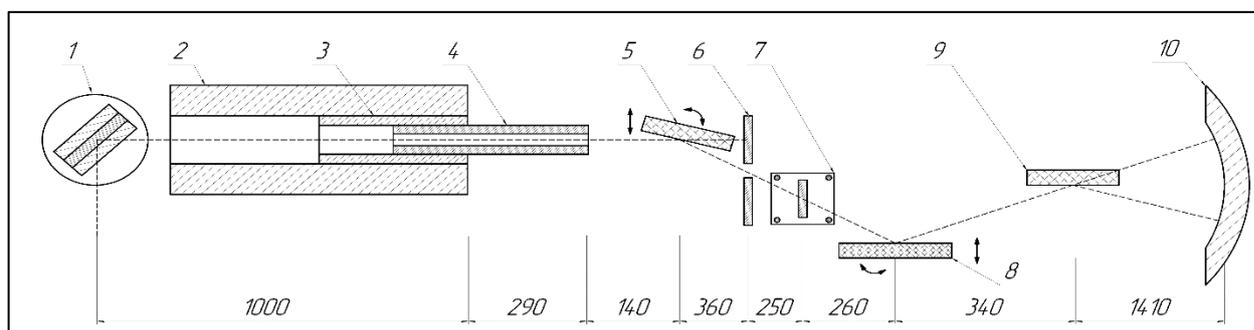
⁴Государственный университет «Дубна», Дубна

⁵Казанский федеральный университет, Казань

На реакторе ИР-8 был создан экспериментальный стенд для работ с поляризованными нейтронами. Для создания стенда была разработана схема поляризации и анализа поляризации монохроматического пучка нейтронов (Рисунок 1), которая включает в себя два суперзеркала: поляризатор и анализатор, спин-флиппера Мезея, регулирующую щель и одномерный позиционно-чувствительный детектор.

Для характеристики и определения параметров экспериментального стенда были проведены тестовые эксперименты: измерена толщина слоя никеля на тонкой немагнитной плёнке Ni/Si, а также в двух режимах измерен критический угол отражения нейтронов для магнитного образца — поляризующего суперзеркала Fe/Si. Полученные на стенде результаты подтверждают принципиальную возможность реализации на ИР-8 новых методов исследования конденсированных сред: рефлектометрии поляризованных нейтронов, радиографии с поляризованными нейтронами.

Рисунок 1. Оптическая схема стенда: 1 – монохроматор, 2 – канал биологической защиты; 3 – коллиматор ГЭК-5; 4 – вставка в коллиматор; 5 – суперзеркало поляризатор; 6 – регулируемая щель; 7 – спин-флиппер; 8 – узел образца; 9 – суперзеркало анализатор; 10 – одномерный ПЧД.



С 432 Расчет спектральных характеристик монохроматора с плоскими дифракционными решетками на диапазон энергий от вакуумного ультрафиолета до мягкого рентгена

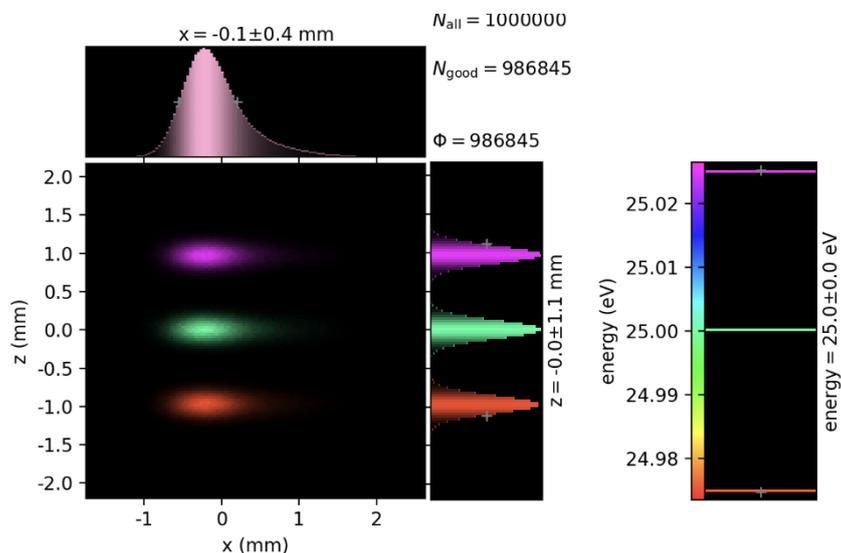
Е. Е. Сурикова^{1,2}, Р.Г. Чумаков¹, И.А. Субботин¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт»

² МГТУ им. Н.Э. Баумана

Монохроматор — это устройство, предназначенное для выделения определенной энергии излучения, что применяется в различных методах анализа для изучения электронных, магнитных, оптических и структурных свойств материалов. Прогресс в области разработки монохроматоров способствует улучшению качества данных, получаемых при использовании этих методов, и расширению возможностей исследования в различных областях науки и технологии.

В работе рассматривается монохроматор с плоскими дифракционными решетками (PGM) на диапазон энергий фотонов от 5 до 1000 эВ. На основе математических зависимостей для дифракционных решеток и зеркал [1,2] была создана математическая модель монохроматора, учитывающая его геометрические параметры. Разработанная модель была использована для трассировки лучей в программном пакете XRT [3] с учетом схемы канала вывода излучения синхротрона КИСИ-Курчатов. В результате были получены спектральные характеристики, представленные на рисунке.



Проведенные расчеты и созданная модель будут использованы для проектирования монохроматора с плоскими дифракционными решетками.

1. Petersen H. The plane grating and elliptical mirror: a new optical configuration for monochromators // Optics Communications. – 1982. – Т. 40. – №. 6. – С. 402-406.

2. Sjoblom P., Todorescua 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. – C. 60-75.

С 433 Дифракционные исследования функциональных и конструкционных материалов на станции «Прецизионная дифрактометрия II» накопителя ВЭПП-3

М.С. Сыртанов¹, Д.В. Сиделев¹, В.Н. Кудияров¹, Е.Б. Кашкаров¹

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет*

Для существенного сокращения сроков разработки новых конструкционных и функциональных материалов необходима комплексная информация о структурно-фазовом состоянии материала, включая *in situ* данные в эксплуатационных условиях. Во многих случаях указанные материалы эксплуатируются в экстремальных условиях, таких как агрессивные среды (кислород, водород, газовые смеси и т.д.), пониженное или повышенное давление, высокие или криогенные температуры и т.д. Данные об изменениях структурно-фазового состояния материалов при повышенных температурах и давлениях имеют огромное практическое значение, так как на их основе появляется возможность прогнозирования физико-механических, химических и других свойств. Такие данные могут быть получены на источниках синхротронного излучения с помощью метода дифрактометрии с временным разрешением [1, 2].

В настоящей работе будут представлены результаты дифракционных исследований широкого класса конструкционных материалов, проведенных сотрудниками отделения экспериментальной физики и лаборатории перспективных материалов и обеспечения безопасности водородных энергосистем Томского политехнического университета. В докладе будут представлены данные, полученные на станции «Прецизионная дифрактометрия II» накопителя ВЭПП-3 института ядерной физики им. Будкера. Показаны особенности станции, основные реакционных камеры, в которых проводились исследования, а также условия проведения экспериментов с временным разрешением. Представлены результаты структурной стабильности ламинированных композитов на основе Nb/Ti₃Al(Si)C₂-TiC, особенности изменения фазового состава при десорбции водорода из гидрида магния, эффект подавления взаимной диффузии Cr и Zr барьерными подслоями Mo и Ta при нагреве до 1250 °C.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного задания в рамках научного проекта № FSWW-2024-0001.

1. G.M. Bilgin, Z. Esen, et al., Mater. Sci. Eng. A. 700 (2017).
2. C.C. Shen, T.P. Perng, Acta Mater. 55, 3 (2007).

С 434 Создание и развитие тестовой зоны для исследований с пучками электронов на базе линейного ускорителя ЛИНАК-200 в ЛЯП ОИЯИ

*А.Н. Трифонов¹, Э.С. Абдельшакур¹, А.Е. Бруква¹, М.И. Госткин¹,
П.П. Журавлев¹, В.В. Кобец¹, В.Г. Кручонок¹, М.А. Ноздрин¹, О.Л. Сероштанов¹,
С.В. Слесарев¹, А.А. Уланкин¹*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Подготовка экспериментов на будущих ускорителях требует создания новых типов детекторов, способных справляться с большими загрузками и обеспечивать требуемую точность и надежность регистрации частиц. Разработка новых детекторов также важна для прикладных исследований, опирающихся на использование источников синхротронного излучения и интенсивных рентгеновских установок. В частности, создание в Российской Федерации новых источников СИ и сверхмощных лазеров обуславливают создание экспериментальных станций на основе детекторов с высоким пространственным и энергетическим разрешением. Возможность тестирования прототипов детекторов на тестовых пучках играет ключевую роль для достижения прогресса в создании новых типов электромагнитных калориметров и координатных детекторов для будущих экспериментов MPD и SPD на коллайдере NICA в ОИЯИ, фотонных детекторов изображений, радиационно-стойких детекторов и дозиметрических приборов.

Линейный ускоритель ЛИНАК-200 в лаборатории ядерных проблем имени В.П. Дзелепова ОИЯИ – это установка, построенная для получения тестовых пучков электронов для проведения НИОКР в области детекторов элементарных частиц, изучения передовых методов диагностики электронных пучков и проведения прикладных исследований. Основу установки составляет реконструированный ускоритель МЕА, применявшийся в НИКНЕФ. Ключевые подсистемы ускорителя были спроектированы заново или глубоко модернизированы.

В докладе представлен проект создания тестовой зоны для исследований на пучках электронов с энергией в диапазоне 5–200 МэВ и максимальным импульсным током до 80 мА на базе ускорителя ЛИНАК-200.

С 435 Современное состояние и перспективы нейтронного активационного анализа на реакторе ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ

М.В. Фронтасьева

Сектор нейтронного активационного анализа и прикладных исследований, Отделение ядерной физики, Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Кратко изложена история развития нейтронного активационного анализа в Лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований. Созданная по инициативе академика И.М. Франка в 1960-х годах небольшая группа в настоящее время превратилась в большой международный коллектив, участвующий в проектах в рамках программ, координируемых и поддерживаемых МАГАТЭ, Российским научным фондом, (РНФ), а также грантами Полномочных представителей стран-участниц ОИЯИ. Описана модернизация пневматической системы, оснащенной тремя автоматическими устройствами смены образцов, и созданная база данных НАА для автоматизации измерения и обработки гамма-спектров наведенной активности радионуклидов. Обобщен опыт работы в области наук о жизни и материаловедения. Приведены примеры проектов, связанных с мониторингом атмосферных выпадений тяжелых металлов и радионуклидов, выполненных в рамках Программы ООН по дальнему трансграничному переносу воздушных загрязнений в Европе (UNECE ICP Vegetation), проекта по оценке состояния окружающей среды в Египте на основе анализа почв и донных отложений бассейна реки Нил, а также проекта по мониторингу микроэлементов в водной экосистеме в Западном Кейпе, ЮАР («Mussel Watch Program»), и др. В сочетании с микроскопией изучается синтез наночастиц различных металлов с помощью биотехнологий. Наши исследования по применению НАА для решения проблемы очистки промышленных сточных вод были отмечены Золотыми медалями Европейского союза в 2013 и 2015 и 2023 годах. Новые направления исследований - изучение природных лекарственных растений и поиск космической пыли в природных планшетах (арктических и антарктических мхах, кернах сибирских торфяников и т.д.) - отражают общественный и научный интерес к этим темам. Будущее расширение исследований сектора связано с радиоэкологическими исследованиями с использованием прецизионной гамма-спектрометрии и низкофоновой лаборатории для проведения измерений естественной и антропогенной радиоактивности. Указывается перспектива создания Центра коллективного пользования на планируемом к вводу в эксплуатацию в 2035-2036 годах Дубненском источнике нейтронов четвертого поколения (ДНС-4).

1. M.V. Frontasyeva. Neutron activation analysis for the Life Sciences. A review. "Physics of Particles and Nuclei", 2011, Vol. 42, No. 2, p. 332-378

<http://www.springerlink.com/content/f836723234434m27/>

2. S.S. Pavlov, A.Yu. Dmitriev, M.V. Frontasyeva. Automation system for neutron activation analysis at the reactor IBR-2, Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear

Research, Dubna, Russia. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 2016, Vol. 309, No. 1, pp. 27-38. <http://link.springer.com/article/10.1007/s10967-016-4864-8>

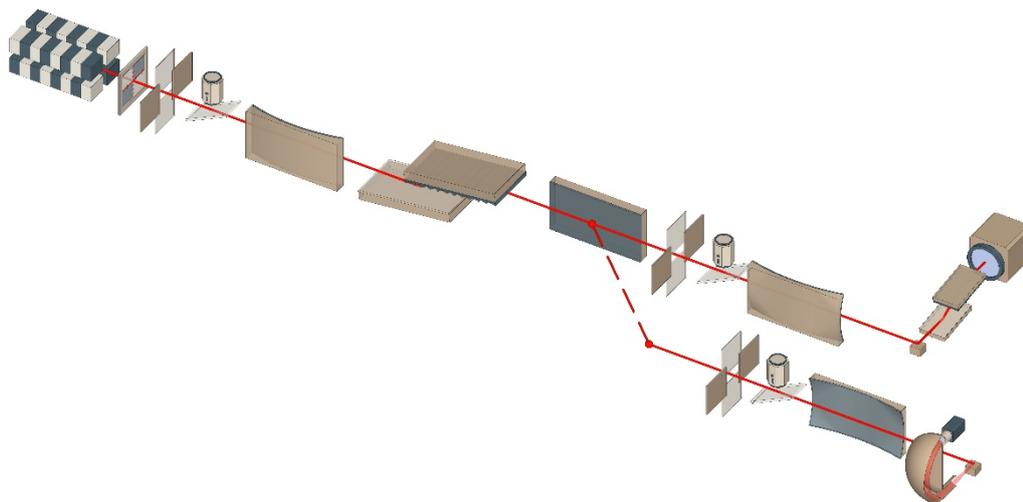
3. M. V. Frontasyeva, E. Steinnes and H. Harmens. Monitoring long-term and large-scale deposition of air pollutants based on moss analysis. Chapter in a book “Biomonitoring of Air Pollution Using Mosses and Lichens: Passive and Active Approach – State of the Art and Perspectives”, Edts. M. Aničić Urošević, G. Vuković, M. Tomašević, Nova Science Publishers, New-York, USA, 2016.

С 436 Возможности спектроскопии в мягком рентгеновском диапазоне на строящейся установке «СИЛА» г. Протвино

Р.Г. Чумаков

НИЦ «Курчатовский институт»

В настоящий момент в рамках реализации Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры [1] осуществляется разработка и строительство сети передовых синхротронных исследовательских установок. Ведущей установкой всей программы будет комплекс «СИЛА», объединяющий в себе источник синхротронного излучения четвертого поколения с энергией электронов 6 ГэВ и лазер на свободных электронах. Использование современных ускорительных технологий при создании ускорителя позволит значительно уменьшить горизонтальный эмиттанс пучка электронов до $72 \text{ пм}^{\circ}\text{рад}$ [2], что приведет к достижению рекордных значений яркости и когерентности излучения на экспериментальных станциях.



Уникальные параметры установки «СИЛА» открывают новые возможности для реализации экспериментальных методик, ранее недоступных на отечественных источниках синхротронного излучения. Для спектроскопии в области мягкого рентгеновского диапазона появляются технические возможности для реализации методов с временным и спиновым разрешением, а также спектроскопии неупругого рассеяния фотонов.

1. Постановление Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287 "Об утверждении Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы".

2. Гавриш Ю. Н., Филатов О. Г., Зуев Ю. В., Благов А. Е., Пресняков М. Ю., Таргонский А. В., Самарин А. В., Ковальчук М. В., Дюбков В. С., Юрин И. А., Индюшный Е. Н. Ускорительно-накопительный комплекс мегаустановки СИЛА, Письма в ЭЧАЯ. 2024. Т. 21, № 3(254). С. 257–265

С 437 Оценка *a priori* функционирования многоканальных коллиматоров, используемых в методах рентгеновской и гамма диагностики

Я.Л. Шабельникова¹, С.И. Зайцев¹, И.С. Зайцев

¹ Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН

В части методов исследования внутренней структуры объектов с помощью проникающего излучения локальность диагностики достигается за счет использования специального прибора – коллиматора, помещаемого перед окном детектора, в результате чего регистрируются только лучи, испущенные из определенных областей пространства и/или под определенными углами. Так в конфокальной схеме рентгеновского флуоресцентного анализа, реализуемой на синхротронных источниках, для обеспечения локальности регистрации используют конфокальные коллиматоры, состоящие из большого числа узких (несколько микрон) и длинных каналов, направленных в одну точку. Такие приборы могут быть изготовлены методами литографии [1] из кремния [1,2] или германия [3]. Аналогичным образом в медицинском методе радионуклидной диагностики коллиматоры используют в составе портативного прибора, называемого гамма-зондом. В основном это цилиндрические и конические одноканальные коллиматоры, хотя функциональные преимущества конфокальных (фокусирующих) многоцелевых коллиматоров были с очевидностью показаны [4], а также упоминалось, что для ряда задач предпочтительным может быть использование коллиматоров составной конструкции с параллельными каналами в центре и конфокальными на периферии.

Однако изготовление коллиматора в виде массива строго ориентированных узких и длинных каналов представляет собой технологически сложную и подчас дорогостоящую задачу. Поэтому важно иметь возможность *a priori*, до изготовления прибора прогнозировать его работу, оценивать функциональные характеристики (угловое и пространственное разрешение, чувствительность, долю фонового излучения), а также производить подбор наилучшей с точки зрения поставленной задачи конфигурации, для чего оптимально привлекать методы моделирования. В докладе будет обсуждаться создание программного обеспечения для симуляции функционирования коллиматоров различного типа и оценки их рабочих характеристик.

1. M.V. Chukalina, A. Simionovici, et al., Spectr. Acta B. 62(6-7), 554 (2007)
2. A.R. Woll, et al. J. Phys.: Conf. Ser. 493, 012028 (2014)
3. S. Choudhury, I. Coulthard, et al., J. Anal. At. Spectrom., 32, 1629 (2017)
4. S.I. Zaitsev, O.V. Trofimov, et al. Instrum Exp Tech 63, 425 (2020)

С 438 Развитие методов анализа траекторий молекулярной динамики в программном пакете GROMACS

А.В. Швецов^{1,2,3}, С.В. Горелов^{1,2}, А.И. Титов¹, А.Л. Коневега^{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*НИЦ «Курчатовский Институт», Москва*

В настоящий момент времени помимо экспериментальных подходов к изучению структуры и функций биомакромолекул, существенную роль играют различные методы молекулярного моделирования и молекулярной динамики. Это обусловлено как совершенствованием теоретических методов, так и всё возрастающими возможностями вычислительной техники. В случае использования метода молекулярной динамики существенную роль играет не только сама процедура расчёта траекторий молекулярной динамики, но и последующий анализ полученных данных. Поэтому развитие различных методов анализа траекторий молекулярной динамики является важным аспектом, так как именно их анализ позволяет получить интересные, в том числе экспериментально проверяемые, параметры биомакромолекулярных систем.

Программный пакет GROMACS [1] является одним из самых популярных пакетов для расчётов и анализа молекулярной динамики биомакромолекул. Поэтому мы интегрировали разработанные нами методы анализа траекторий молекулярной динамики в него. Среди интегрированных или оптимизированных нами методов можно отметить:

- методы расчёта спектров МУРН и МУРР (gmx scattering) основанные на формуле Дебая [2];
- метод анализа динамики вторичной структуры на основе алгоритма DSSP (gmx dssp) [3];
- метод анализа сеток водородных связей основанный на геометрических и энергетических критериях (gmx hbond) [4];
- эффективные алгоритмы пространственного совмещения 3D структур биомакромолекул
- метод выделения жесткого с точки зрения динамики ядра биомакромолекулы
- метод расчёта сеток пространственной плотности для различных величин внутри периодического водного бокса

Данные алгоритмы были разработаны и реализованы в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №1023031500033-1-1.6.7;1.6.4;1.6.8. и тема № 2.8629.2017).

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 Lindah // *SoftwareX*. - 2015. - 1-2. - c. 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.
3. DSSP in GROMACS: Tool for Defining Secondary Structures of Proteins in Trajectories / *Gorelov S., Titov A., Tolicheva O., Konevega A., Shvetsov A.* // *Journal of Chemical Information and Modeling*. - 2024. - № 9. - C. 53593-3598.
4. Determination of Hydrogen Bonds in GROMACS: A New Implementation to Overcome Memory Limitation / *Gorelov S., Titov A., Tolicheva O., Konevega A., Shvetsov A.* // *Journal of Chemical Information and Modeling*. - 2024. - № 16. - C. 6241-6246.

