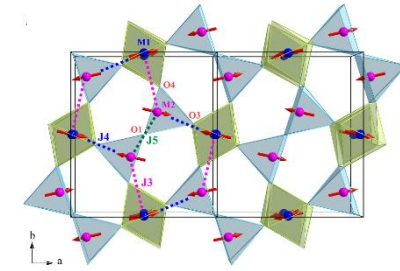


# **Тема 1142 – Исследования функциональных материалов и наносистем с использованием рассеяния нейтронов**

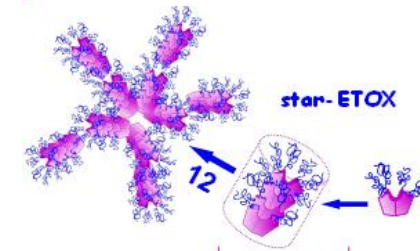
**Основные результаты 2021 г.**

# Основные направления научных исследований

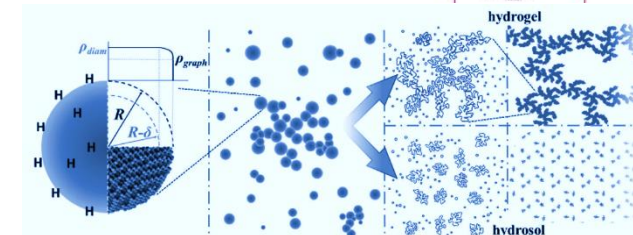
1. Физика конденсированного состояния и науки о материалах;



2. Физика наносистем и наноразмерных явлений;



3. Физика комплексных жидкостей и полимеров;



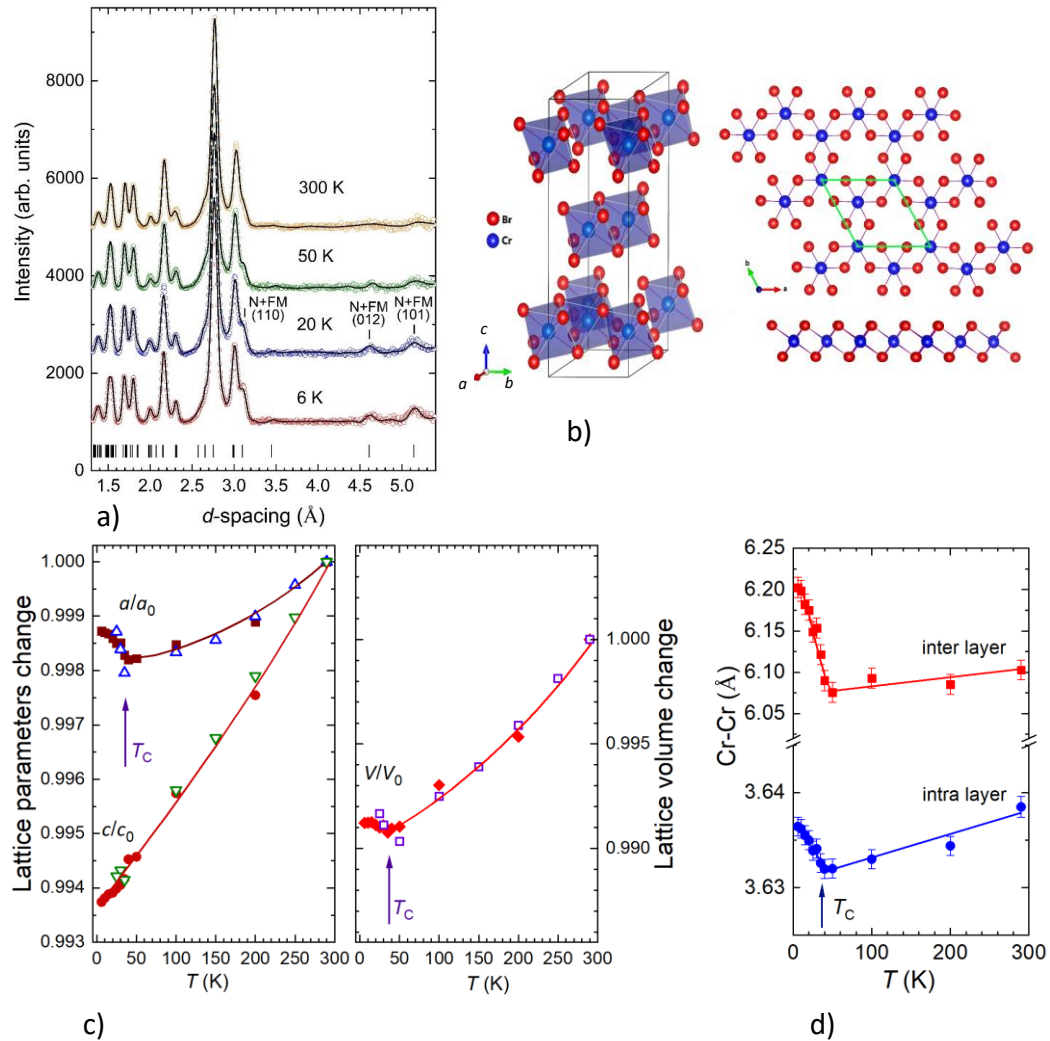
4. Биофизика и фармакология;



5. Прикладное материаловедение и инженерные науки.



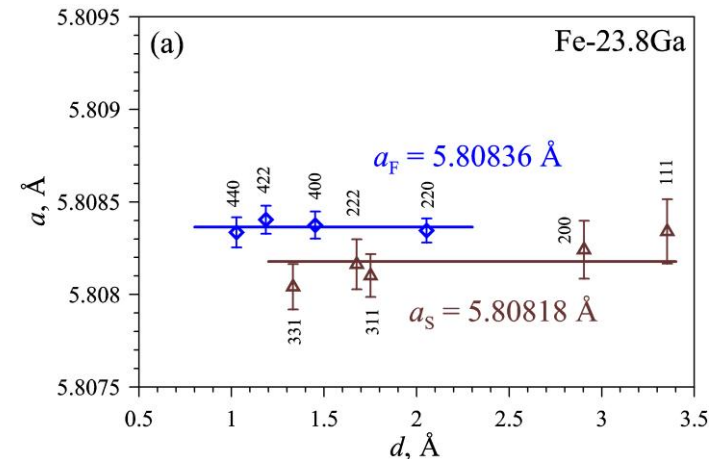
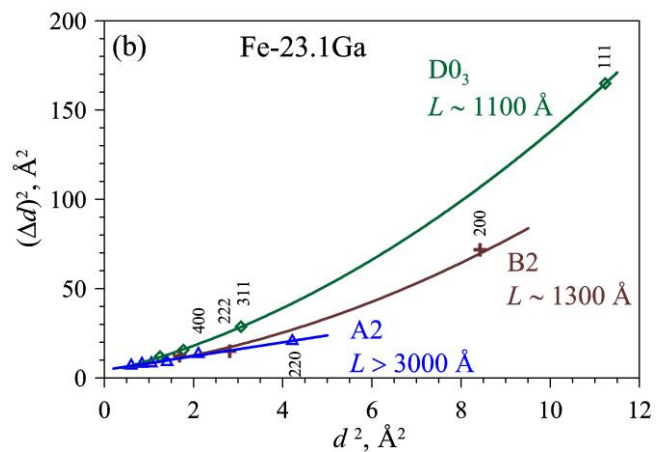
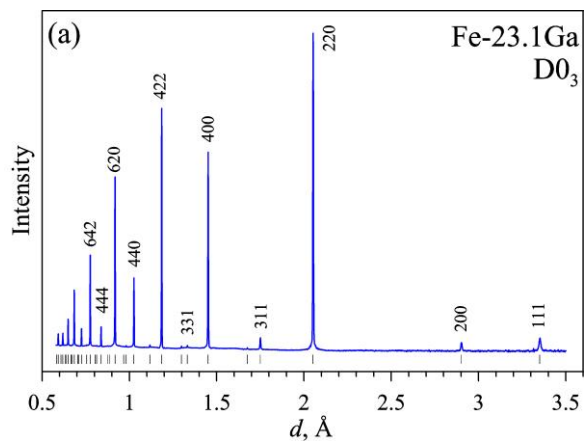
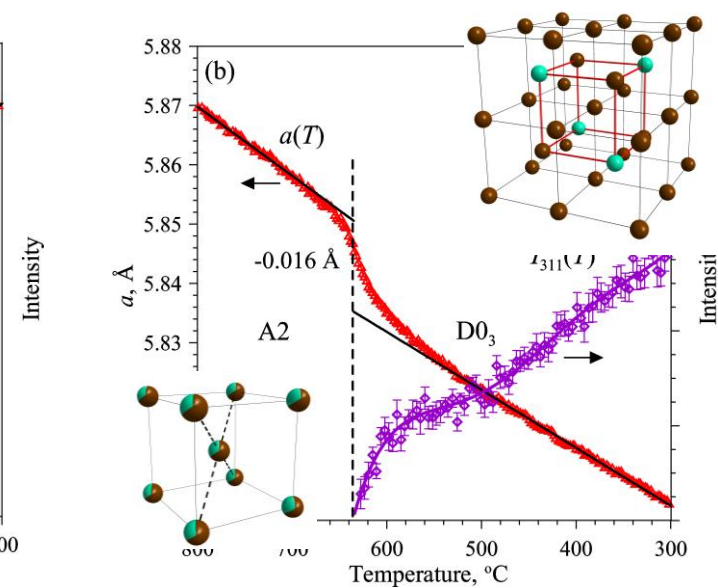
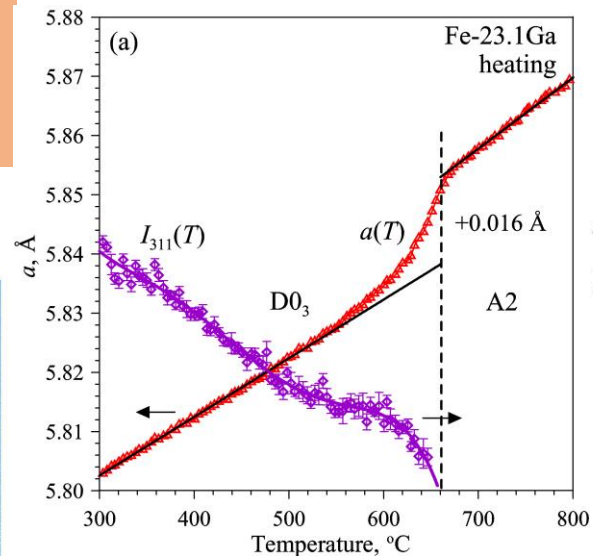
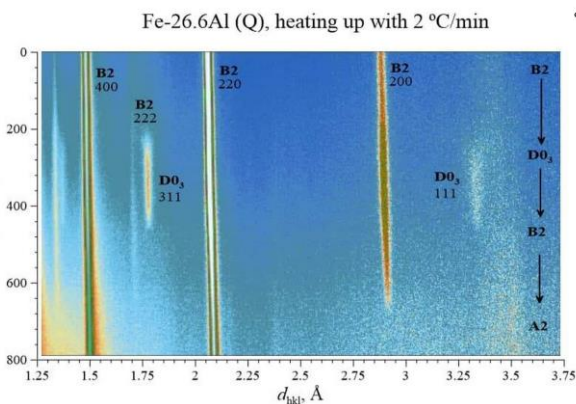
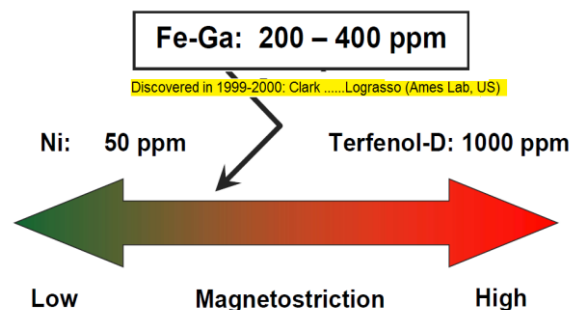
# Спин-индуцированное отрицательное тепловое расширение в ван-дер-ваальсовском ферромагнетике $\text{CrBr}_3$



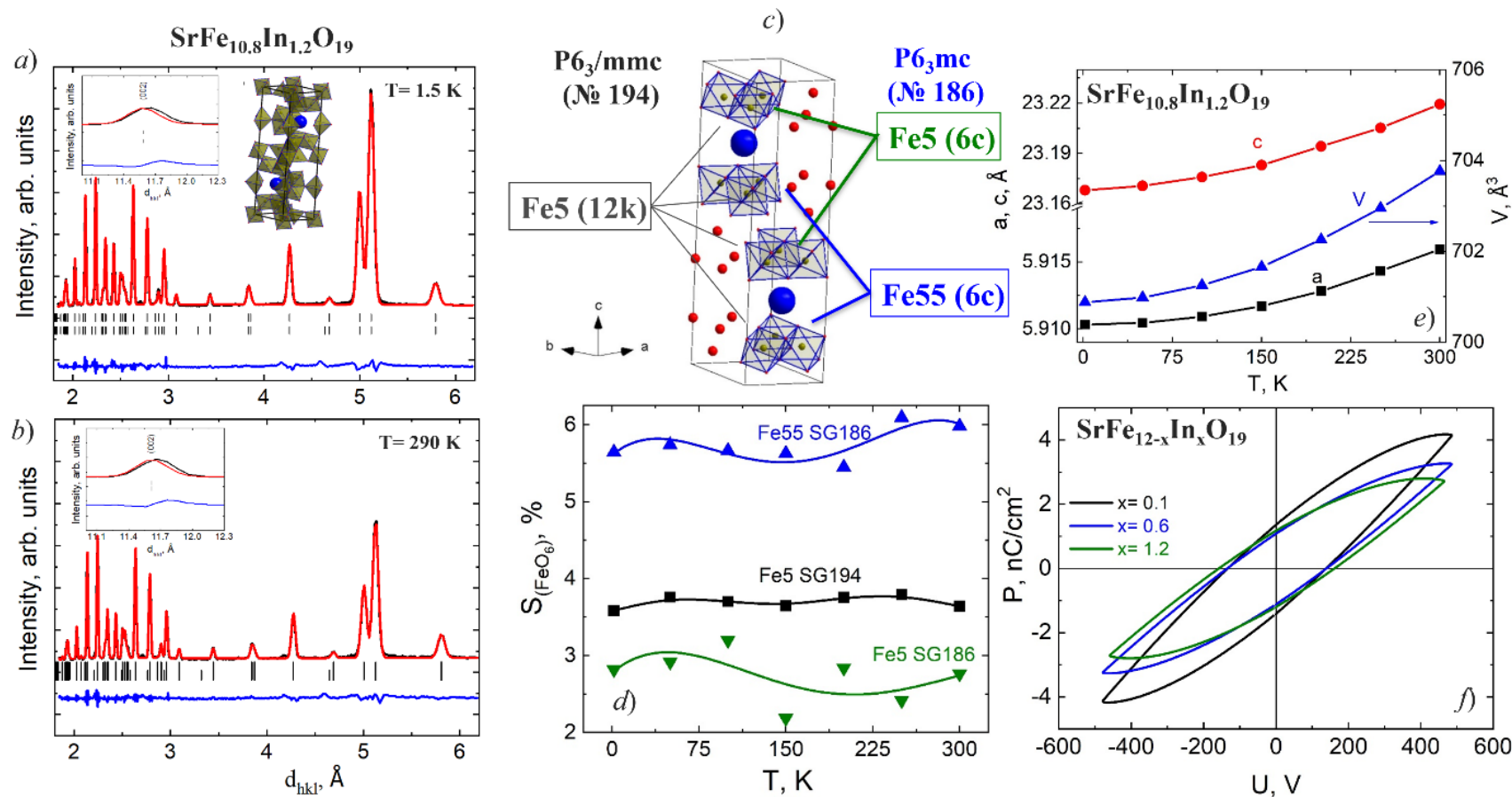
а) Нейтронные дифракционные спектры  $\text{CrBr}_3$ , измеренные при различных температурах и профили, рассчитанные по методу Ритвельда. б) Ромбоэдрическая кристаллическая структура  $\text{CrBr}_3$  симметрии  $R\bar{3}$ . в) Температурные зависимости параметров и объема элементарной ячейки кристаллической решетки  $\text{CrBr}_3$ , отнормированные на соответствующие значения при комнатной температуре. г) Температурные зависимости расстояний между магнитными ионами Cr внутри ван-дер-ваальсовских слоев (intra-layer) и между слоями (inter-layer).

# Исследование эффектов когерентного кластерного упорядочения в сплавах Fe-Ga, Fe-Al в зависимости от концентрации Ga(Al) и при фазовых переходах порядок-беспорядок при изменении температуры.

Neutron diffraction as instrument to plot phase diagrams of the alloys



# Комплексные исследования образцов стронциевых гексаферритов $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$ ( $x=0.1; 0.6$ и $1.2$ )

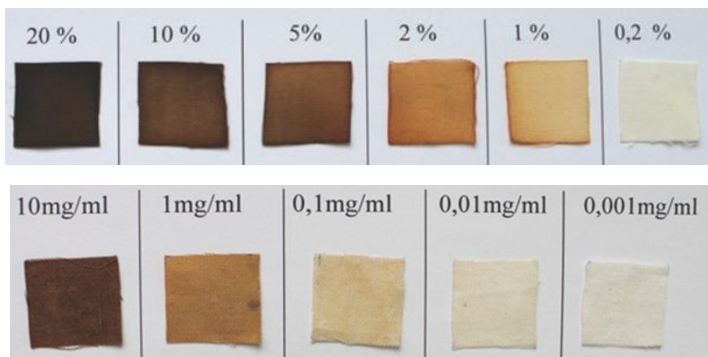


Нейтронogramмы поликристаллического образца  $\text{SrFe}_{10.8}\text{In}_{1.2}\text{O}_{19}$  измеренные на дифрактометре G 4-1 (LLB,  $\lambda=2.426$  Å) при  $T=1.5$  – (a) и  $290$  K – (b) и уточненные методом Ритвельда; схематическое изображение кислородных полиэдров – (c) и различная степень их искажения – (d) в случае centrosymmetric ( $P6_3/mmc$ ) и noncentrosymmetric ( $P6_3mc$ ) элементарной ячейки; температурная зависимость параметров элементарной ячейки образца  $\text{SrFe}_{10.8}\text{In}_{1.2}\text{O}_{19}$  – (e); полевая зависимость электрической поляризации – (f) образцов  $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$  ( $x=0.1; 0.6$  и  $1.2$ ) измеренная при комнатной температуре.

# 'Magnetic' textiles for bio-catalysis

ISB CAS – IEP SAS - KNU - FLNP JINR

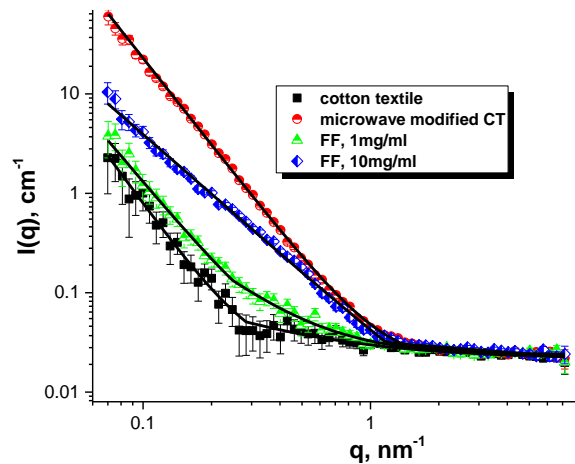
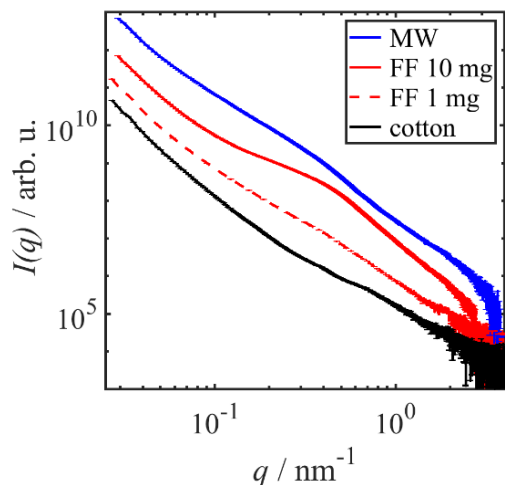
Precipitation with Microwaves (MW)  
Ferrofluid synthesis with textile (FF)



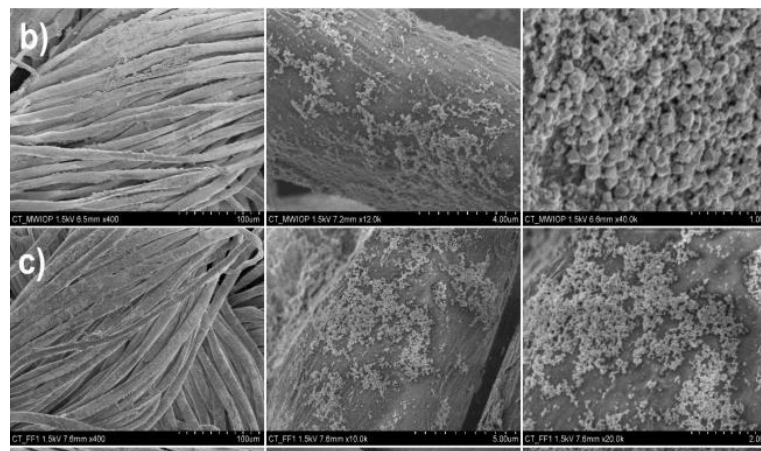
MW

FF

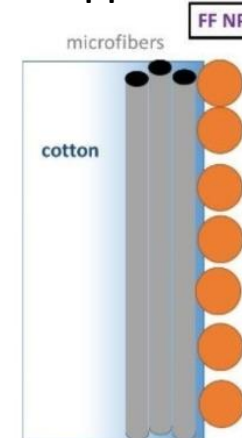
SAXS/SANS



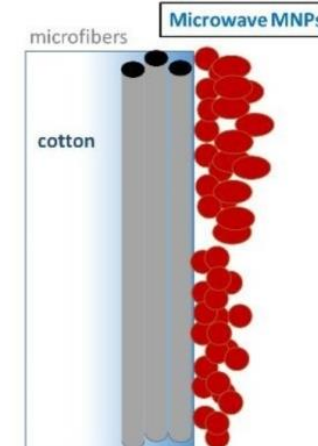
SEM



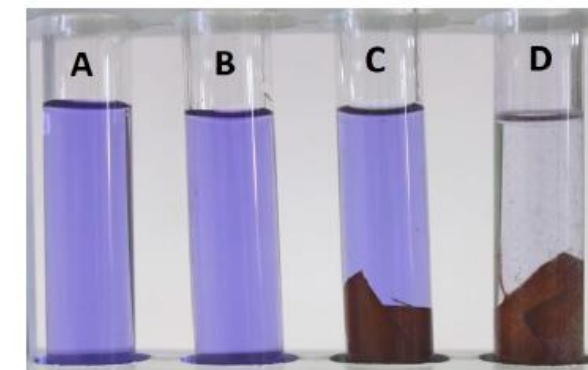
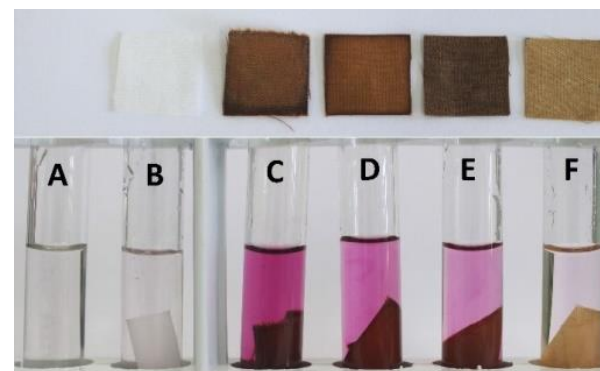
FF



MW



Bio-catalytic activity



Safarik, I., Prochazkova, J., Schroer, M.A., Garamus V.M., Kopcansky P., Timko M., Rajnak M., Karpets M., Ivankov O.I., Avdeev M.V., Petrenko V.I., Bulavin, L., Pospiskova, K., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 13 (2021) 23627

# Impact of cholesterol / melatonin on structure of model lipid membranes

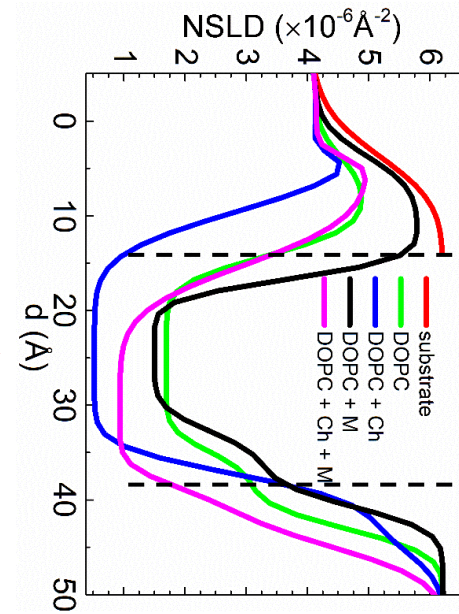
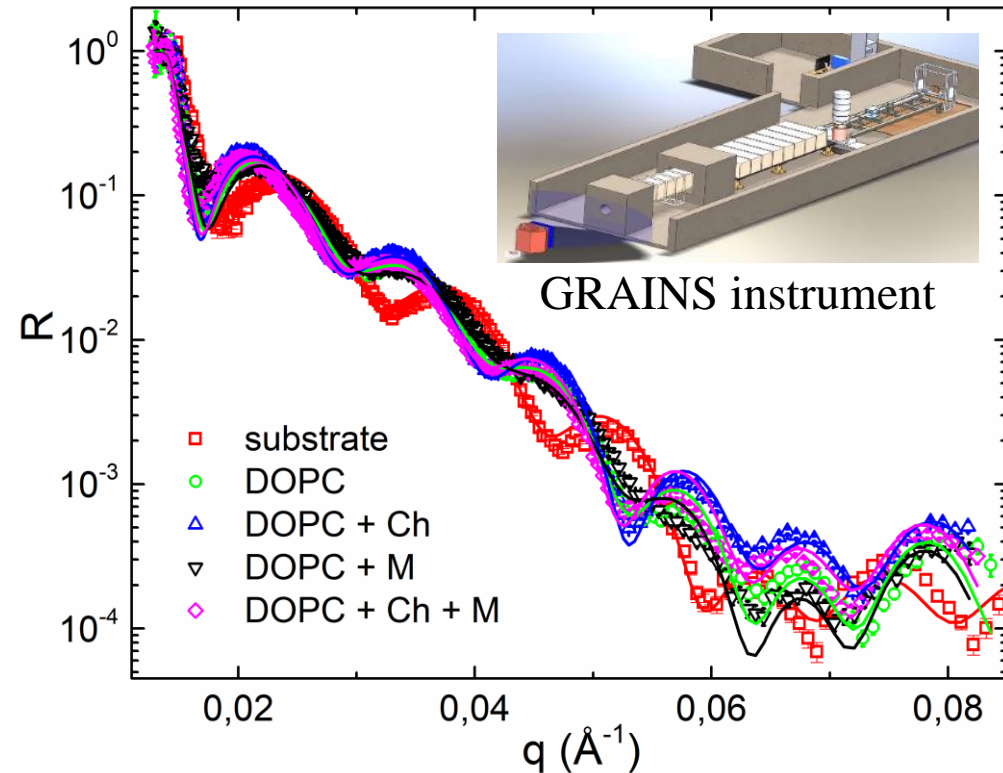


FLNP JINR – LRB JINR – DSU – TSNUK – Šafárik Univ – Comenius Univ

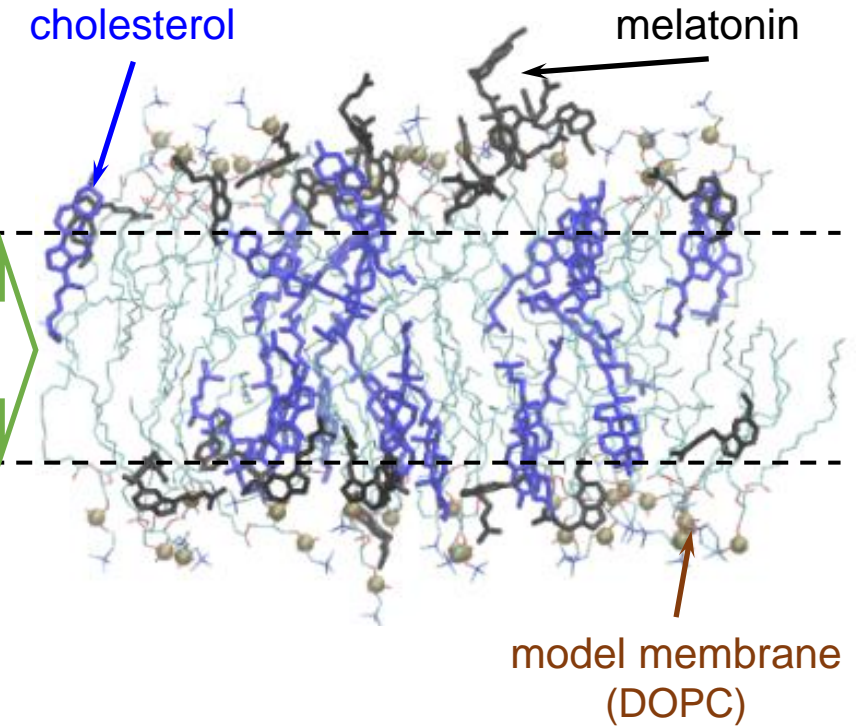


Changes in cholesterol and melatonin concentrations affect **development of degenerative diseases**

## Neutron reflectometry @ IBR-2



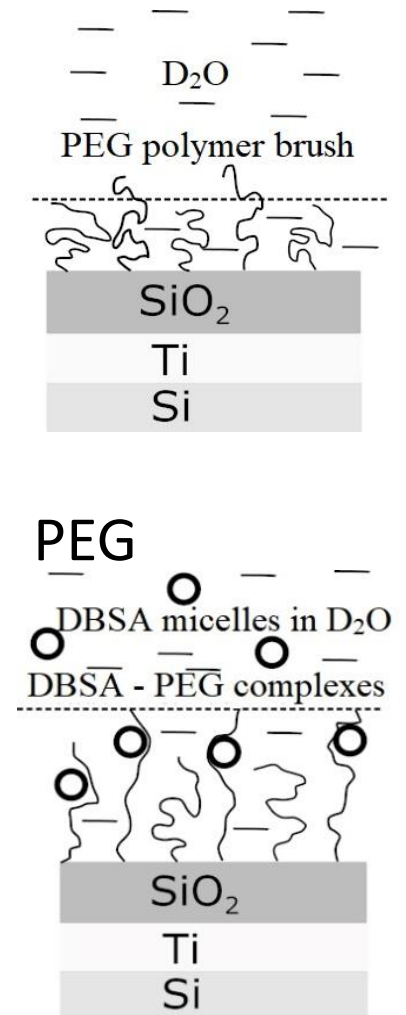
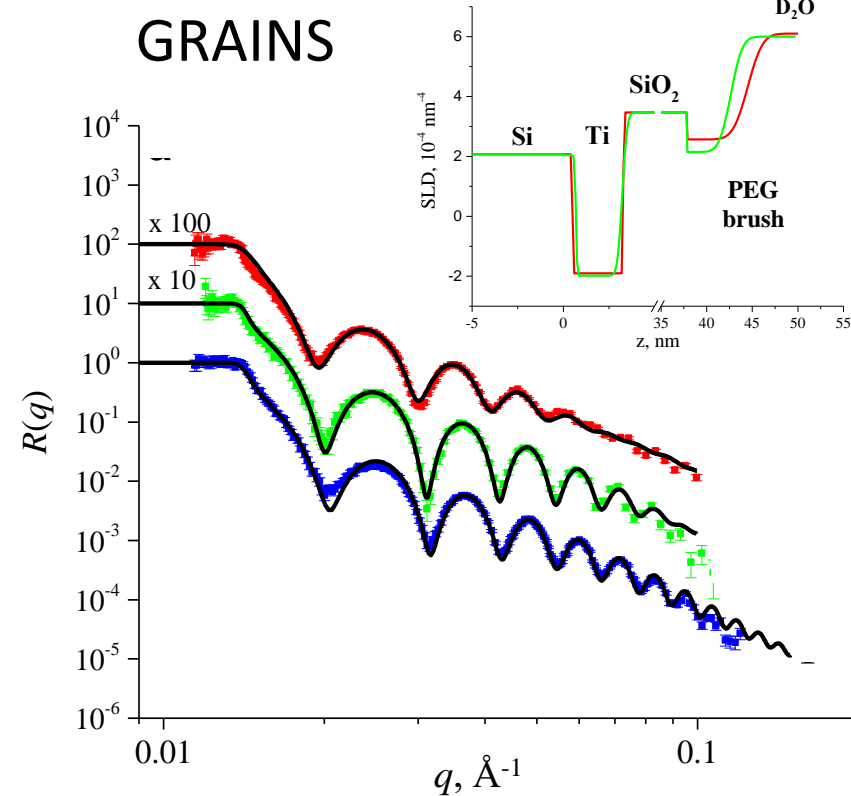
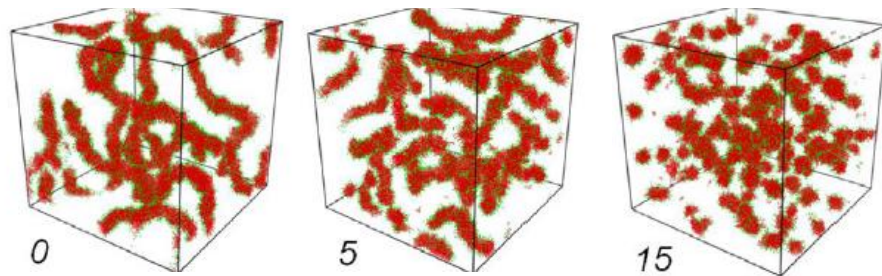
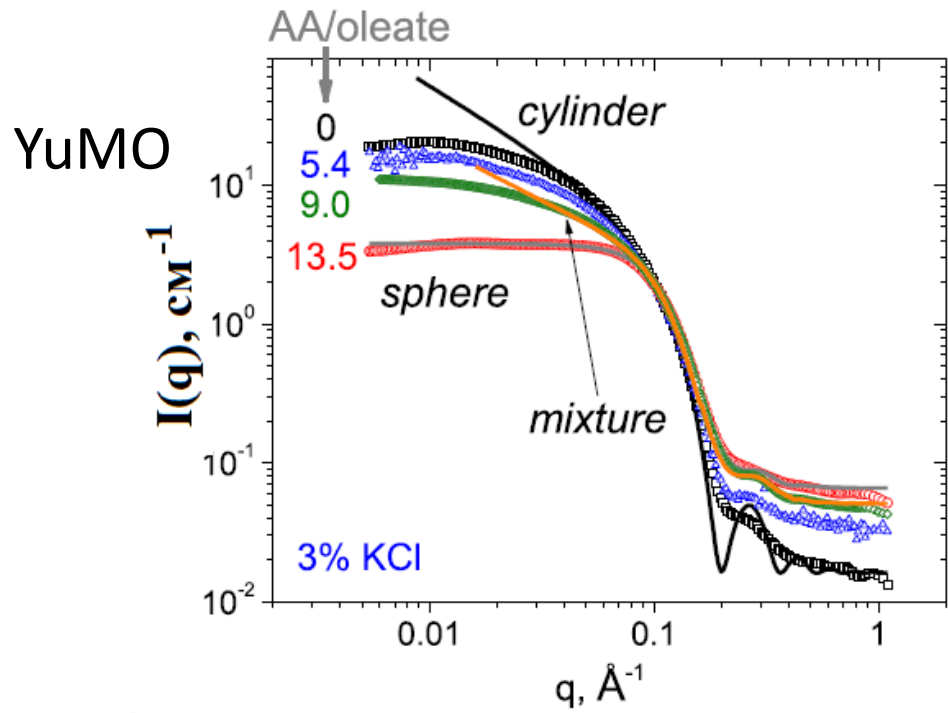
## Molecular dynamics (FLNP, LRB)



Cholesterol and melatonin found to **accumulate in different membrane regions**, affecting the entire structure of membrane (and its properties).

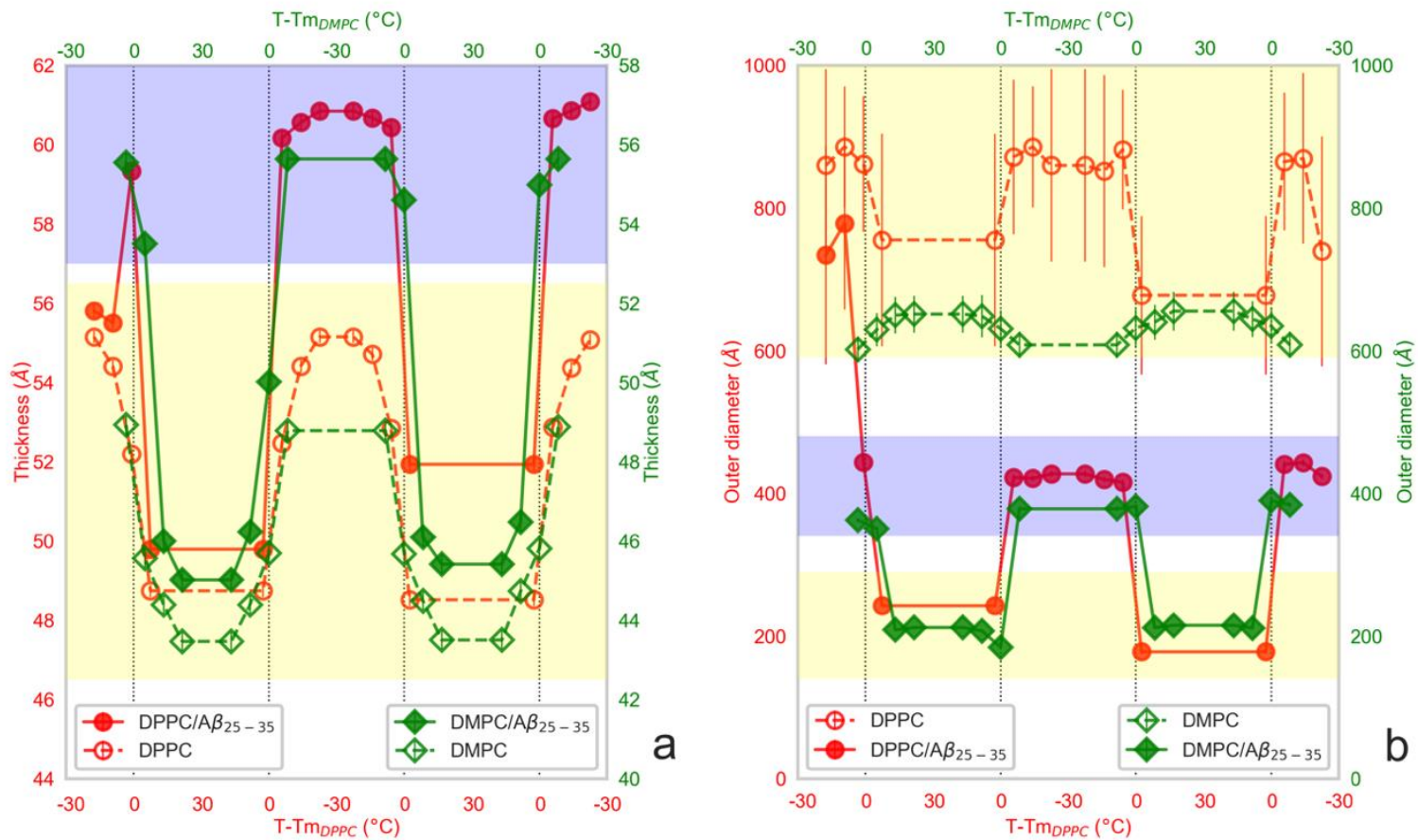
# Studies of surfactant micelle solutions in bulk and interfaces

Fac. Phys. MSU - Phys. Dpt. KNU - FLNP JINR



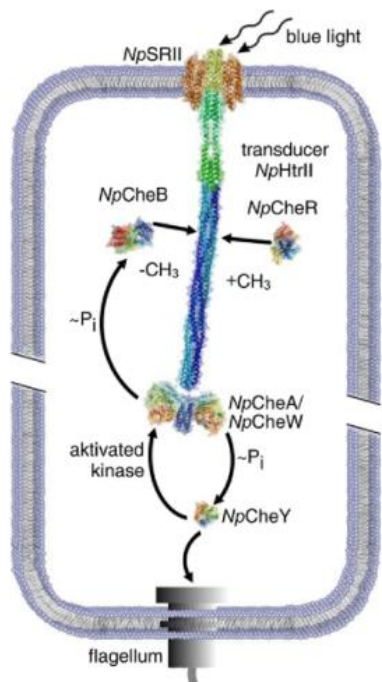


# Структурные изменения в модельных липидных мембранах при встраивании амилоид-бета пептида

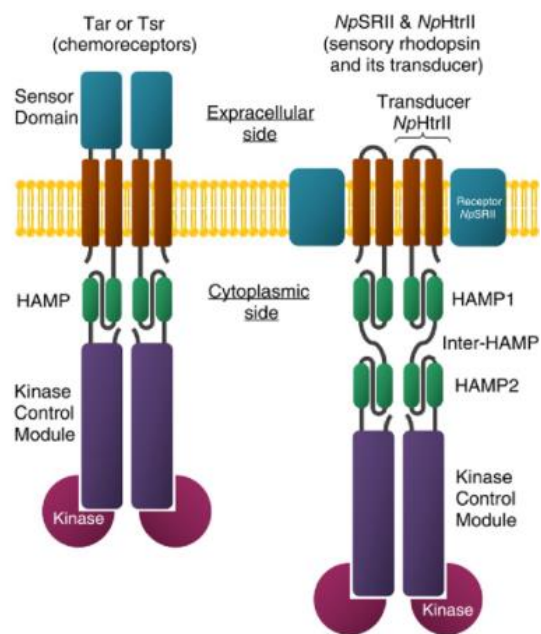


Изменение толщины модельной мембраны (a) и размеров агрегатов (b) в зависимости от сдвига температуры относительно главного фазового перехода для ДМФХ(зеленые ромбы) и ДПФХ (красные круги) с добавлением и без добавления амилоид-бета пептида.

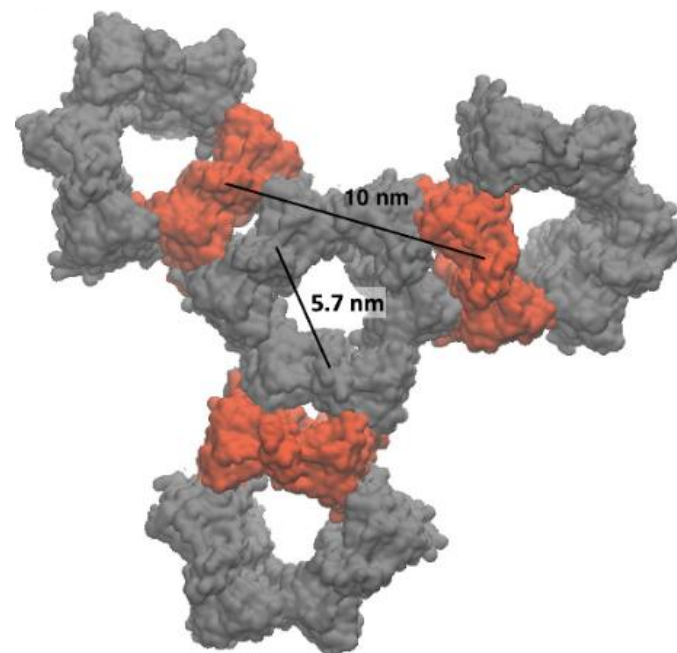
## Структура полноразмерного фоторецепторного комплекса сенсорного родопсина с родственным трансдюсером из экстремофильной археи *Natronomonas pharaonis*



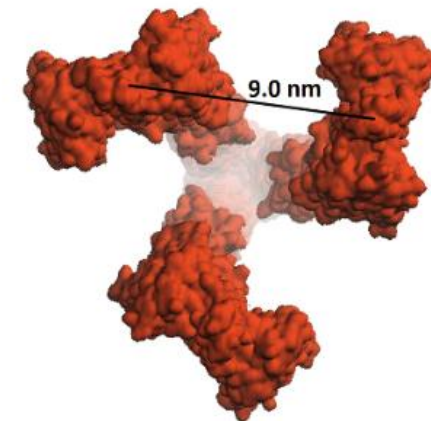
a)



b)



c)



d)

Схема сигнального каскада (a) в случае двухкомпонентной системы отрицательного фототаксиса *Natronomonas pharaonis* и схема доменной архитектуры (b) димера хеморецепторов (Tar и Tsr в комплексе с киназами) из *E. coli* (слева) и димера фотосенсорного комплекса сенсорного родопсина II с его родственным трансдюсером *NpHtr11* из *N. pharaonis* (справа). Изображения трансмембранных доменов комплекса *NpSR11/NpHtr11*: фрагмент гексагональной упаковки «O»-образных тримеров димеров (c); изображение «tripod»-образного тримера димеров (d).

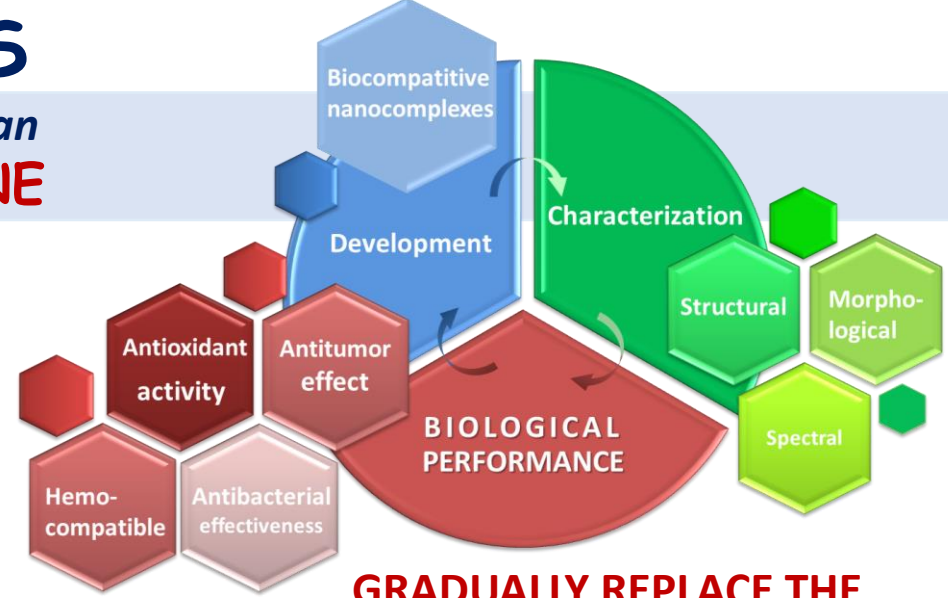
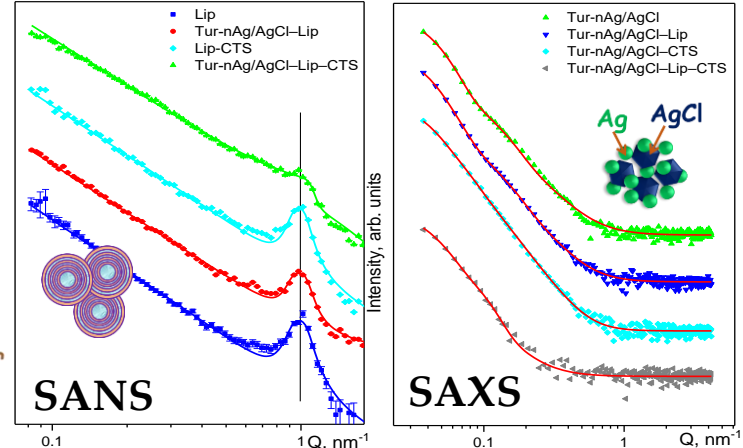
# BIOHYBRID NANOCOMPLEXES

based on phyto-generated Ag/AgCl NPs, biomimetic membranes and chitosan  
**AND THEIR POTENTIAL APPLICATION IN BIOMEDICINE**

## Formation of biohybrids

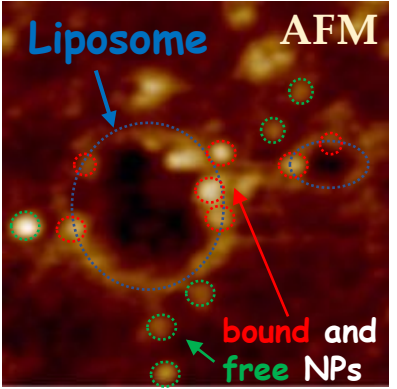


## Structure of biohybrid components



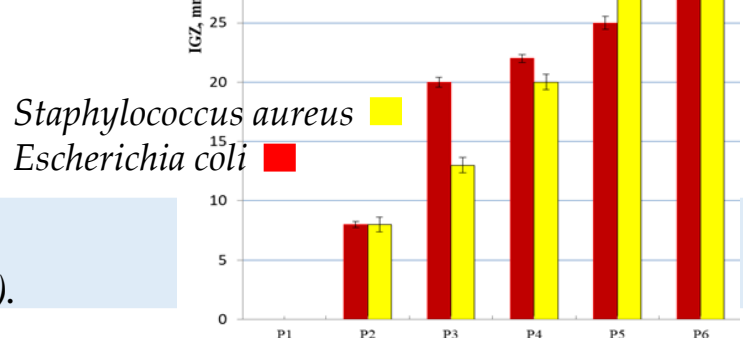
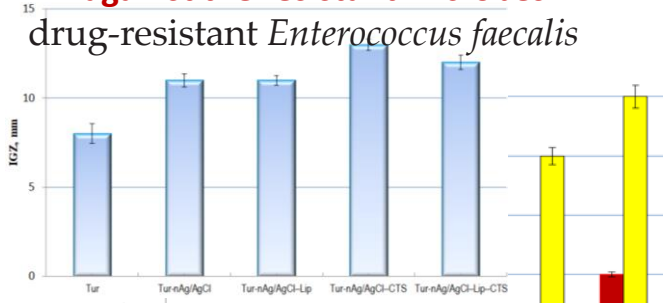
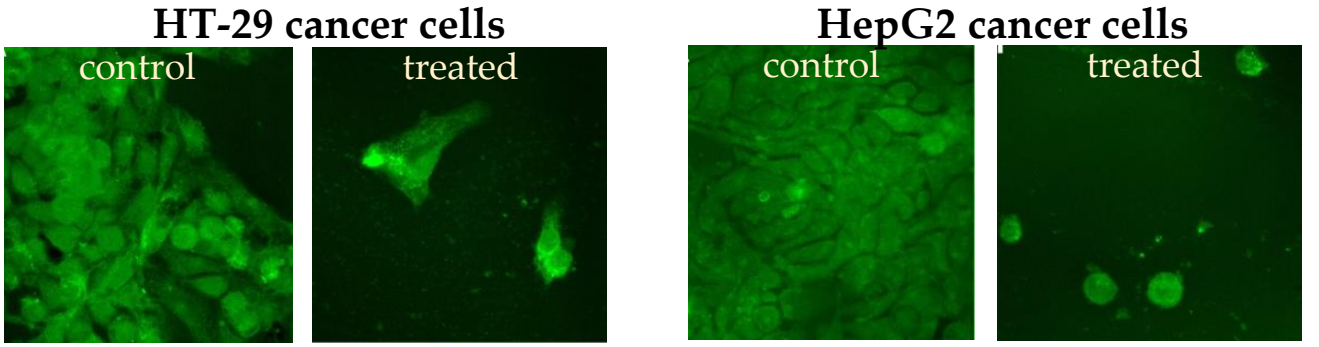
**GRADUALLY REPLACE THE OLD-GENERATION DRUGS that certainly have lost their "tooth" against the resistant microbes**

## Morphology of Ag/AgCl NPs-Lip-CTS



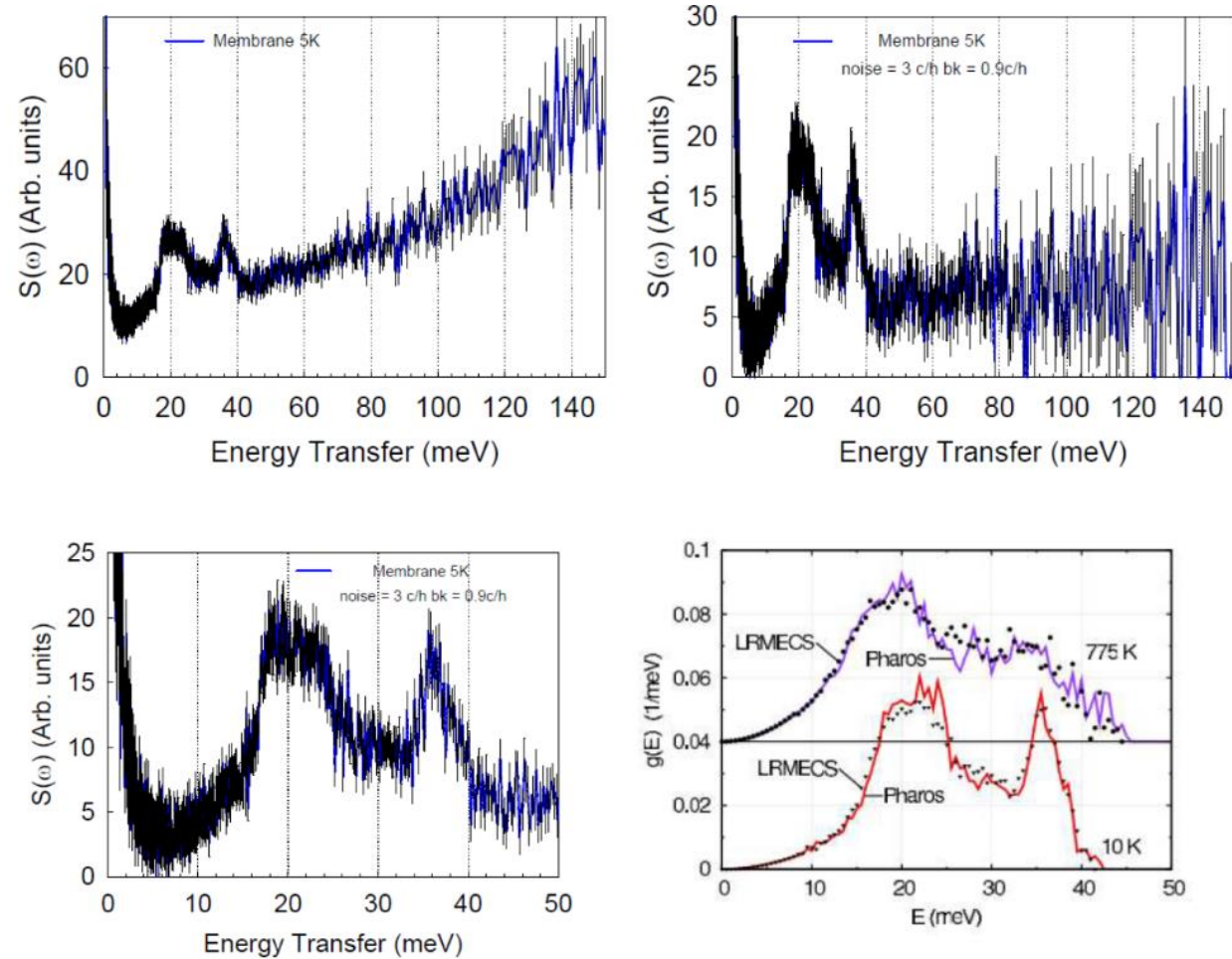
## ANTIPROLIFERATIVE ACTIVITY OF BIOHYBRID Ag/AgCl NPs-Lip-CTS

therapeutic index value of 1.30 for HT-29 cancer cells and 1.77 for HepG2 cancer cells



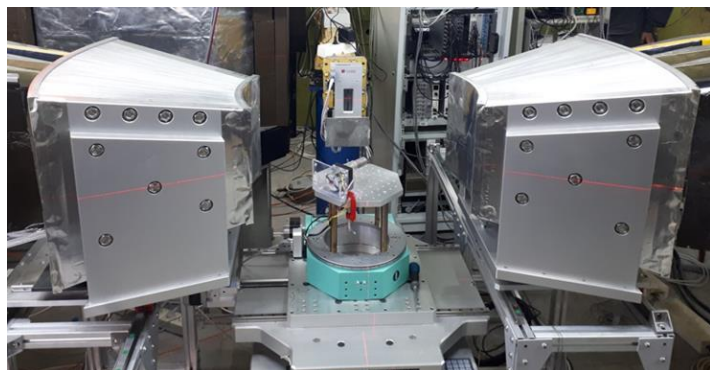
M.-E.Barbinta-Patrascu, Yu.Gorshkova; et al. *Materials* 14, 4726 (2021).  
 Yu. Gorshkova, M.-E.Barbinta-Patrascu; et al. *Nanomaterials*, 11, 1811 (2021).

## Динамика материалов в нанопористой мембране

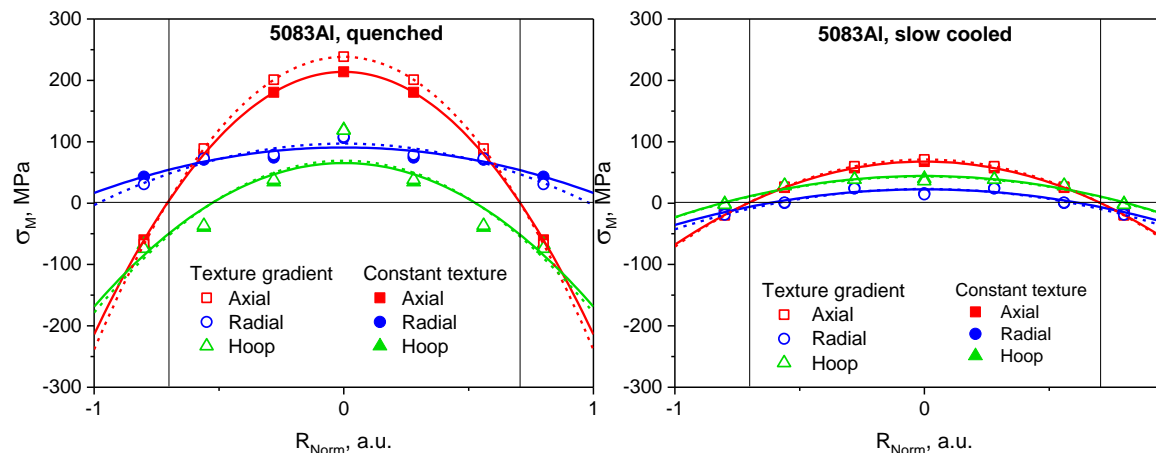


**Спектры неупругого рассеяния нейтронов на системе 8CFNB в нанопористой мембране.**

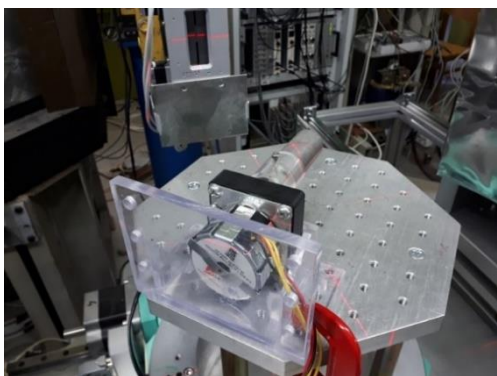
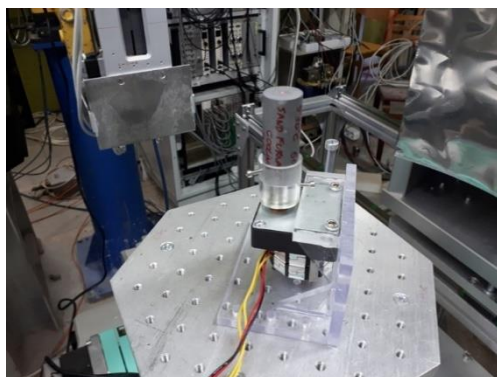
# FSD: Residual stress distributions in 2014Al and 5083Al aluminum alloy samples after heat treatment



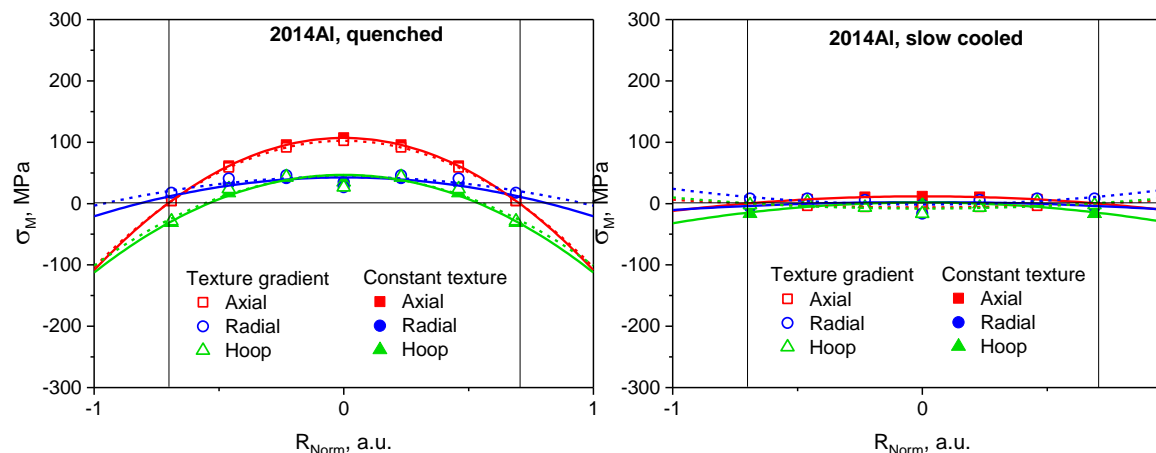
Experimental setup



Residual macrostress distribution in non-age-hardenable 5083Al alloy sample after quenching (left) and slow cooling (right)

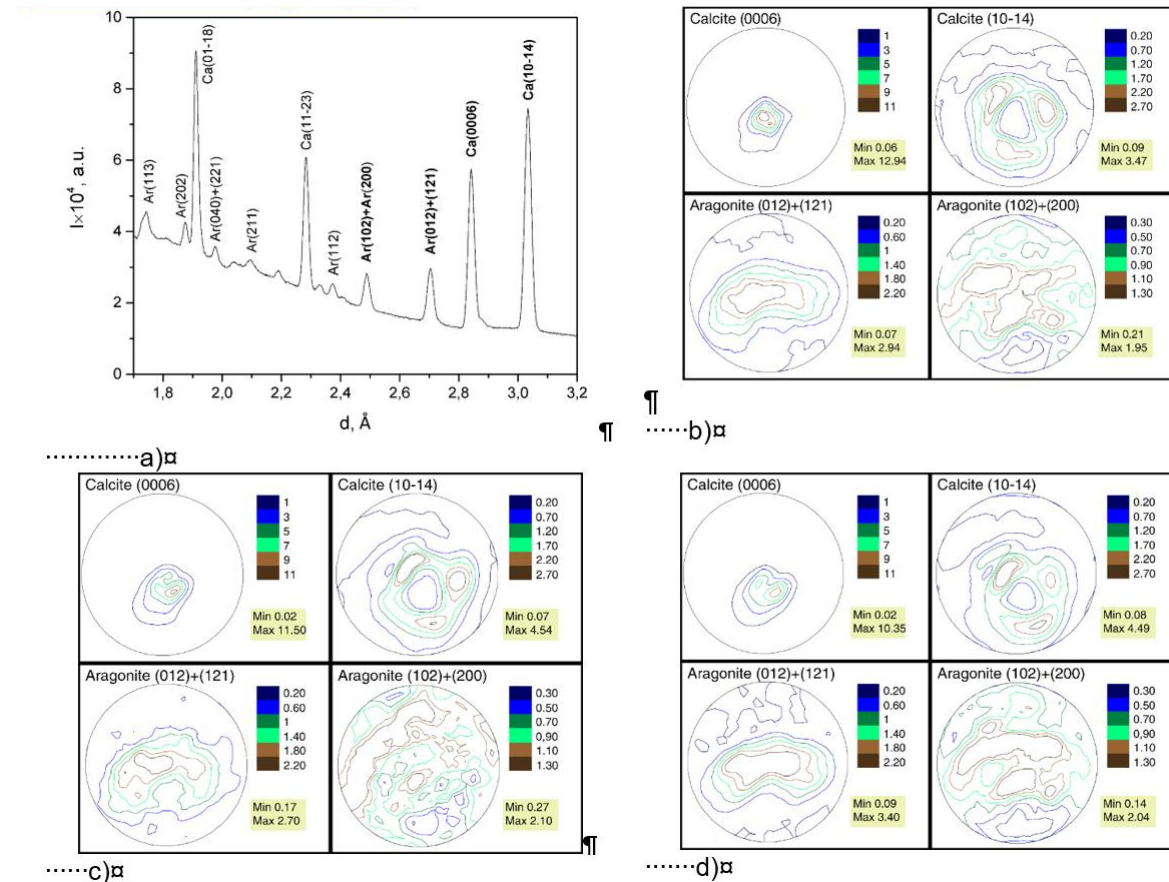


Horizontal and vertical configurations



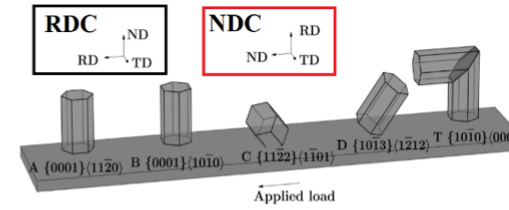
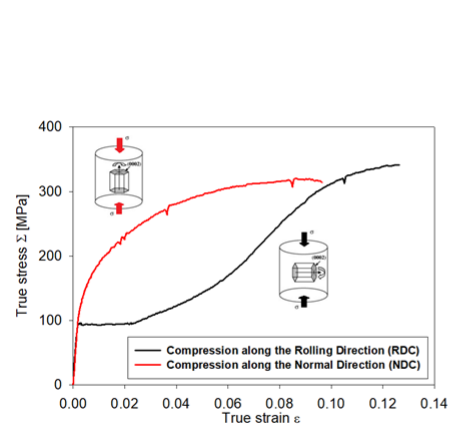
Residual macrostress distribution in age-hardenable 2014Al alloy sample after quenching (left) and slow cooling (right)

# Исследования взаимосвязи между элементным составом и кристаллографической текстурой раковин двустворчатых моллюсков вида *Mytilus galloprovincialis*, обитающих в районе залива Салдана (Южная Африка)



Суммарный нейтронный дифракционный спектр, зарегистрированный для образца из раковин моллюска *Mytilus galloprovincialis* со станции 2, яхт-клуб Лангебана. Полюсные фигуры кальцита и арагонита в раковинах *Mytilus galloprovincialis* со станции 1, залив Опасности (b), со станции 2, яхт-клуб Лангебана (c), со станции 3, Малая бухта (d).

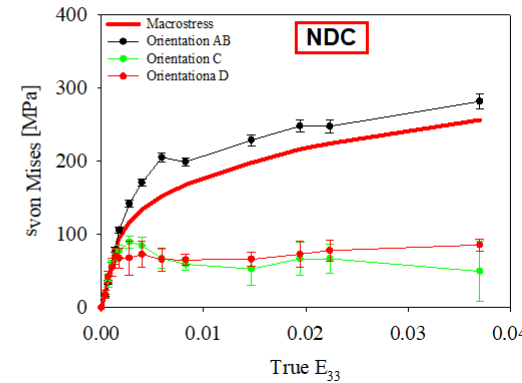
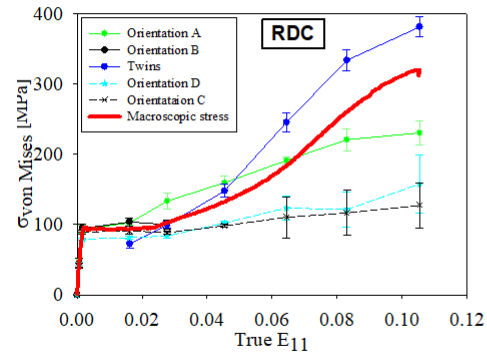
# Исследования стрессов в группах гранул в сильно текстурированном монофазном сплаве магния (AZ31)



$$\sigma(g, E) = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

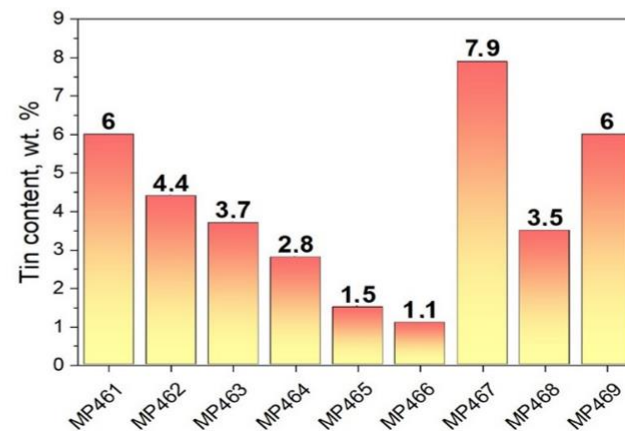
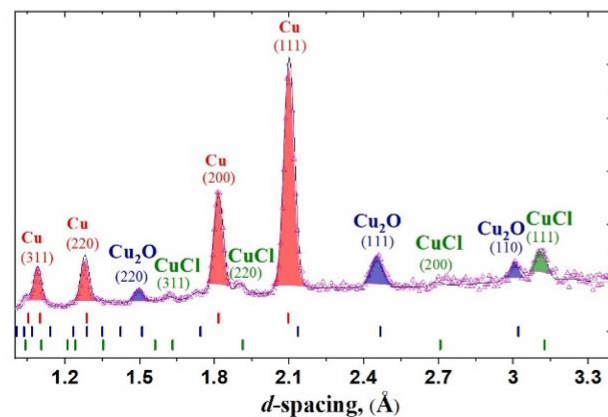
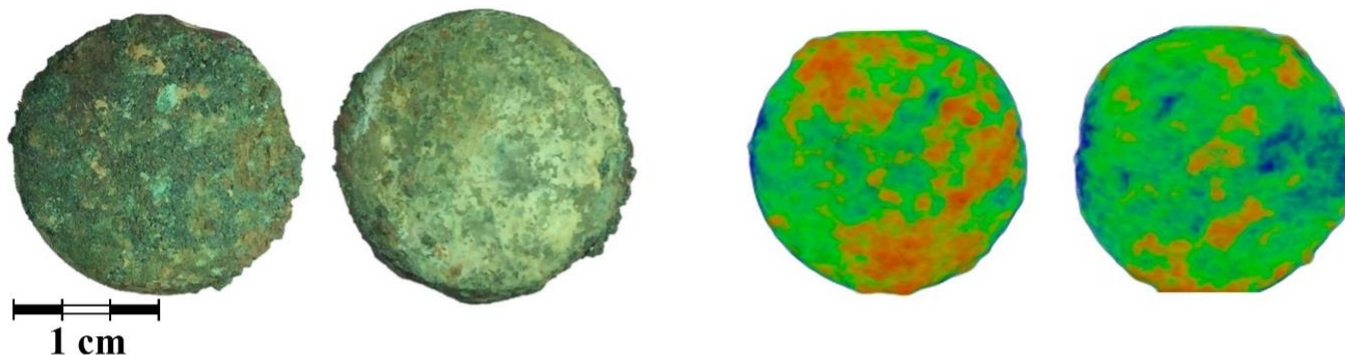
$g$ - ориентация гранул  
 $E$  макроскопические деформации

$$\sigma_{ij}(g) \rightarrow \sigma_{Von Mises}(g)$$



Измеренная эволюция напряжения Фон Мизеса (Von Mises) для ориентаций (A, B, C, D, T-твины) в магниевом сплаве AZ31 во время испытания на сжатие вдоль направления прокатки (RDC) и нормального направления (NDC). Деформации решетки были измерены в 17 различных направлениях вектора рассеяния. Такие измерения позволили определить тензор напряжений для различной ориентации гранул во время *in situ* измерений на сжатие .

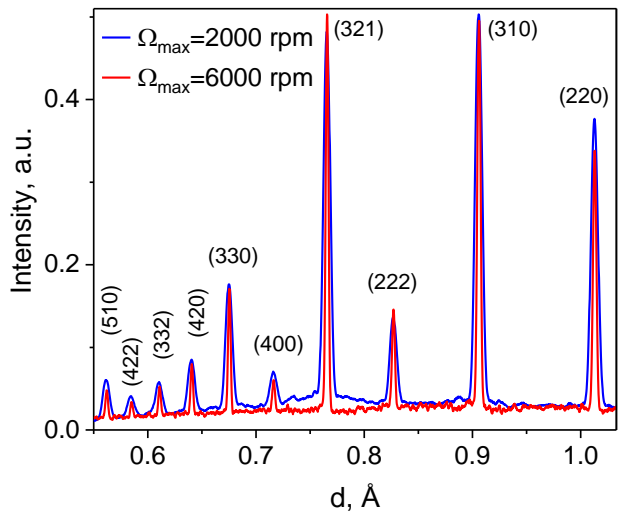
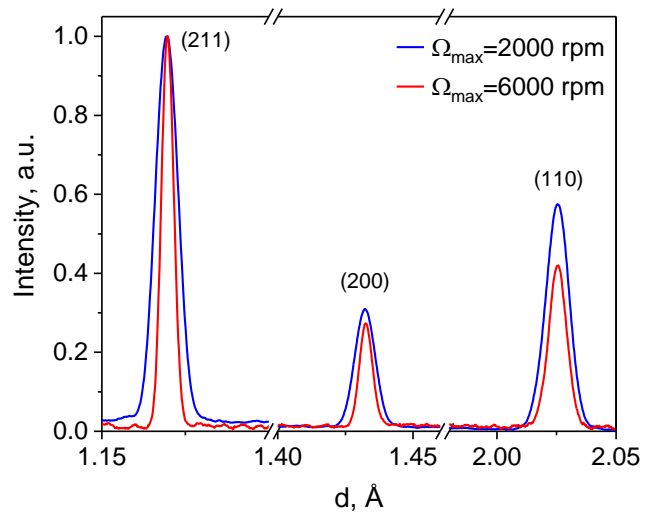
# Исследование состава и пространственного распределения фазовых компонентов древнегреческих культовых медных монет



Фотография (слева) и восстановленная из данных нейтронной томографии 3D модель (справа) одной из монет – оболы Харона. Выделены участки патины и коррозии в объеме исследуемой монеты. Представлены нейтронный дифракционный спектр монеты с идентификацией составляющих фазовых компонент, а также гистограмма относительного содержания олова в бронзовом сплаве исследуемых монет по данным нейтронной дифракции.

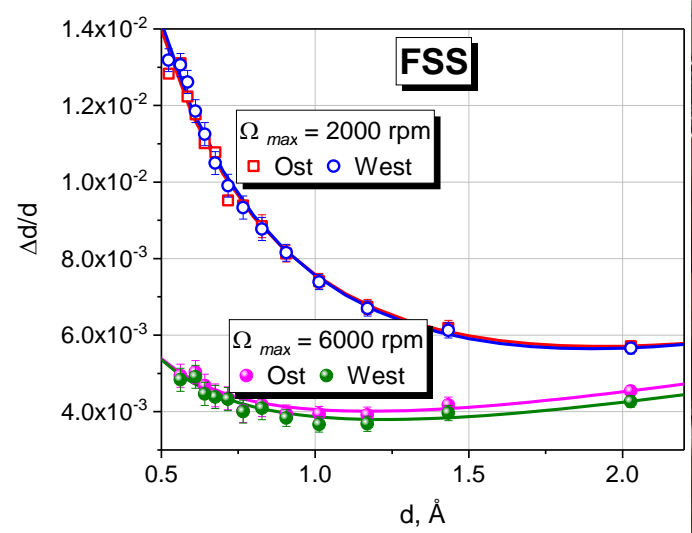
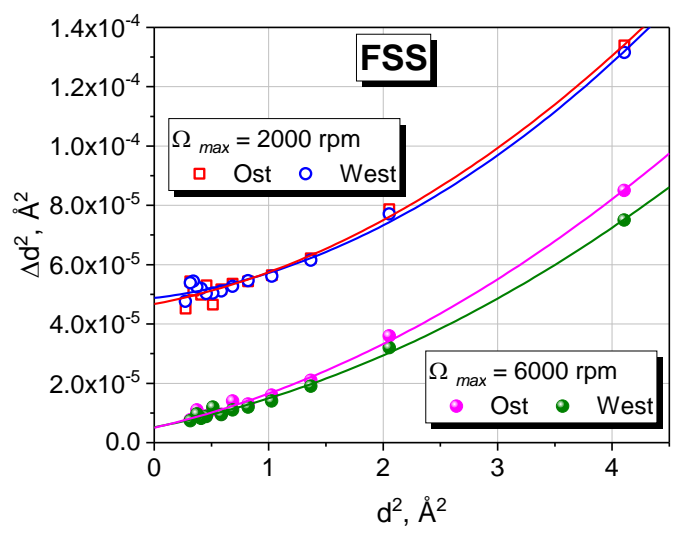


# FSS@beamline 13: new Fourier chopper



High-resolution RTOF spectra comparison

Old F-chopper:  $\Omega_{\max}=2000 \text{ rpm}$



Increase in resolution level



New F-chopper:  $\Omega_{\max}=6000 \text{ rpm}$

# Neutron Reflectometry with secondary radiation registration – Definition (Analysis) of Isotope spatial distribution

Yu.V. Nikitenko, V.D. Zhaketov, A.V. Petrenko, Yu.M. Gledenov, Yu.N. Kopach, A.N. Gundorin, V.L. Aksenov

## Basic relations

Neutron absorption coefficient  $M = 1 - R - T$

Neutron reflection coefficient  $R(k) = \int f_1[k, U(z) = \sum_i N_i (\alpha b_i - i \beta \sum_j \sigma_{ij})] dz,$

Neutron transmission coefficient  $T(k) = \int f_2(k, U(z)) dz,$

Secondary radiation intensity  $I_{sec} \sim M = \int J_z(z) N(z) \sigma dz / J_{z0}$

## Sensitivity

1) Channel of charged particles:  $\sigma_{min} = 0.025$  barn (for isotope layer thickness 5 nm)

$\sigma > 0.025$  barn ( 22 isotopes ):

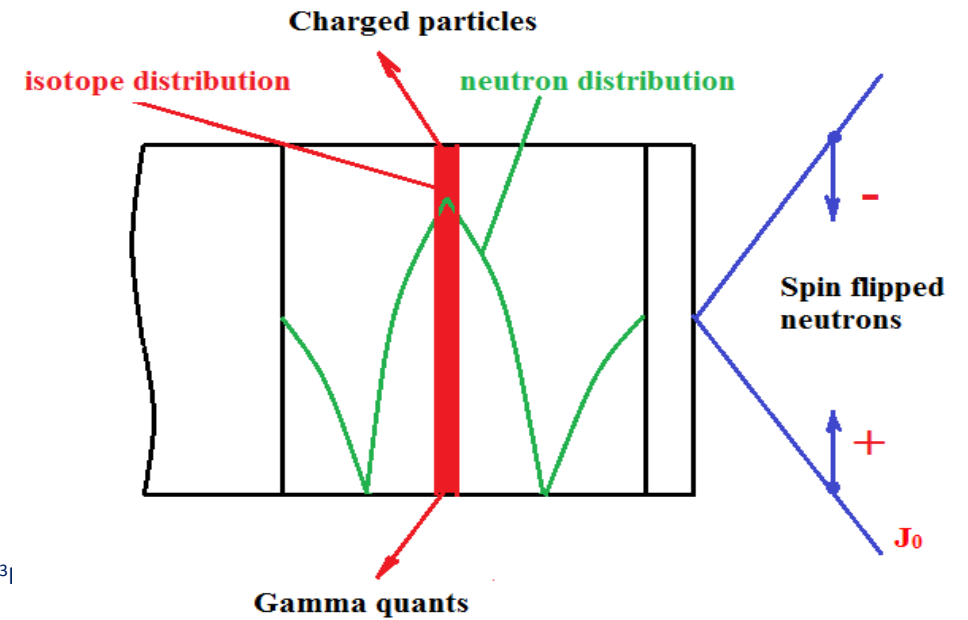
$^3\text{He}, ^6\text{Li}, ^7\text{Be}, ^{10}\text{B}, ^{14}\text{N}, ^{17}\text{O}, ^{21}\text{Ne}, ^{22}\text{Na}, ^{26}\text{Al}(1.18\text{K}), ^{33}\text{S}, ^{35}\text{Cl}, ^{36}\text{Cl}, ^{37}\text{Ar}, ^{40}\text{K}, ^{41}\text{Ca}, ^{59}\text{Ni}, ^{65}\text{Zn}(0.85\text{K}), ^{76}\text{Br}, ^{84}\text{Rb}, ^{109}\text{Cd}(0.52\text{K}), ^{203}\text{Tl}, ^{143}\text{I}$

2) Channel of gamma quanta:  $\sigma_{min} = 0.3$  barn (for isotope layer thickness 5 nm)

$\sigma > 0.3$  barn ( > 100 isotopes ):

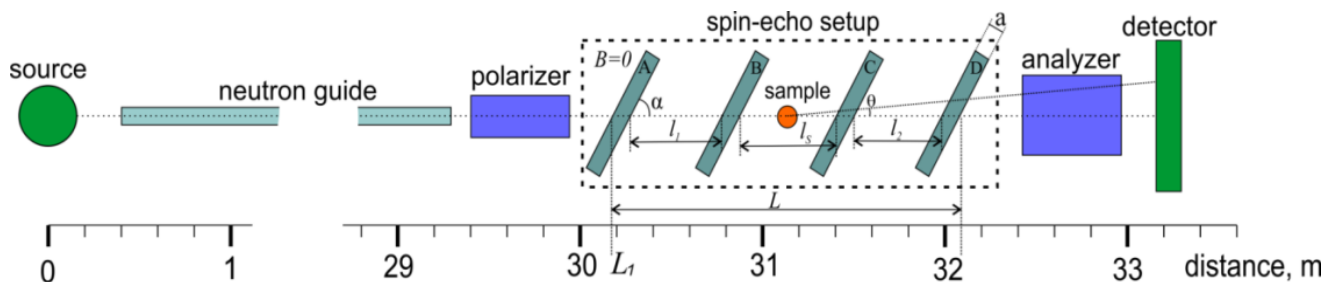
$\text{Cl}, ^{36}\text{Ar}, ^{39}\text{K}, ^{43}\text{Ca}, ^{45}\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}(5.4\text{K}), \text{Cr}, ^{53,55}\text{Mn}, \text{Fe}, ^{59}\text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, ^{67}\text{Zn}, ^{75}\text{As}, \text{Se}, \text{Br}, \text{Kr}, ^{87}\text{Sr}, \text{Mo}(0.915\text{K}), ^{99}\text{Tc}(7.8\text{K}), \text{Ru}, ^{103}\text{Rh}, \text{La}(4.9, 6.0\text{K}), \text{Pd}, \text{Nb}(9.25\text{K}), \text{Ag}, \text{Cd}(0.52\text{K}), \text{Dy}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{In}(3.41\text{K}), \text{Sn}(3.72\text{K}), \text{Re}(1.7\text{K}), \text{Ta}(4.47\text{K}), \text{Os}, ^{192,195}\text{Pt}, ^{197}\text{Au}, \text{Hg}, ^{226}\text{Ra}, ^{227}\text{Ac}, ^{228-230}\text{Th}(1.4\text{K}), ^{231}\text{Pa}(1.4\text{K}), \text{W}(1.5\text{K}), \text{Re}, \text{Os}(0.66\text{K}), ^{192,195}\text{Pt}, ^{197}\text{Au}, \text{Hg}(4.15, 3.95\text{K}), ^{203,204}\text{Tl}, ^{207}\text{Pb}(7.2\text{K}), ^{226}\text{Ra}, ^{227}\text{Ac}, ^{228-230}\text{Th}, ^{231}\text{Pa}, ^{231-235}\text{U}, ^{203,204}\text{Tl}(2.38\text{K}), ^{237}\text{Np}, ^{238-242}\text{Pu}, ^{241-243}\text{Am}, ^{243-245, 247}\text{Cm}, ^{249-252}\text{Cf}$

3) Channel of polarized neutrons : minimal perpendicular to plane magnetization is 1 Gs : Fe, Co, Ni, Gd, Dy, Tb, Ho, Er, Tm ( 9 elements )

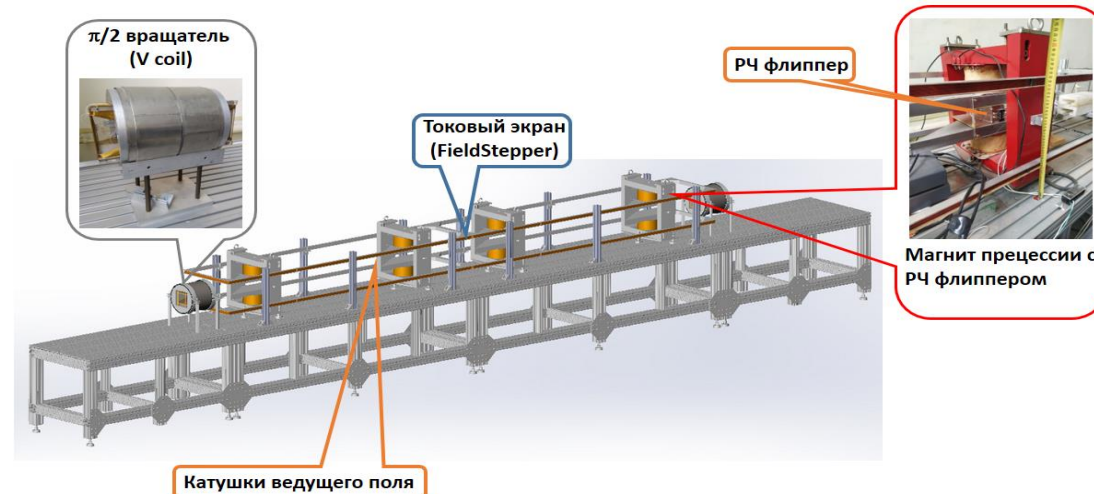


# Development of SESANS instruments at pulsed and steady-state neutron reactors

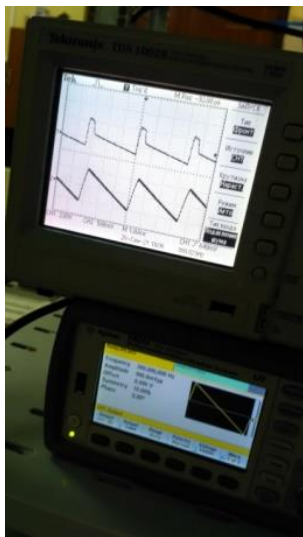
## SESANS option at REFLEX, IBR-2



## SESANS setup at PIK, NRC KI PNPI



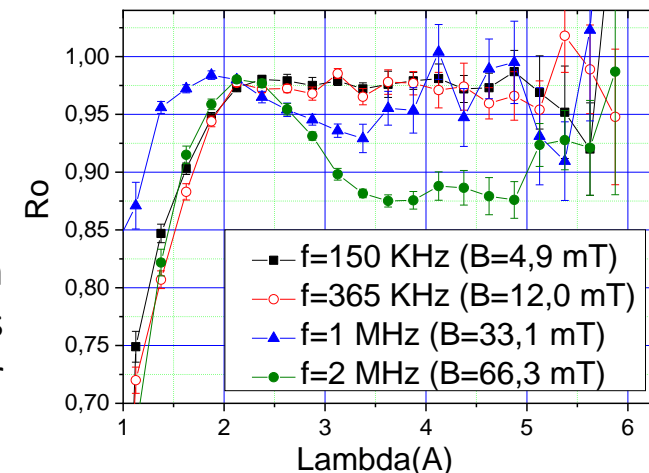
Upgraded power amplifier



Cooling unit RKV 2.5 for power electronics and spin rotators



Experimental wavelength dependences of efficiencies of RF spin-flipper



L.A. Axelrod, V. Kraan, D. Zhokhov, A. A. Sumbatyan, A. V. Nagorny, V.V. Tarnavich, Yu.O. Chetverikov, Proc. RNIKS-2021, J. Surf. Investigation (2021) submitted.

# Расходимость нейтронного микропучка из плоского волновода

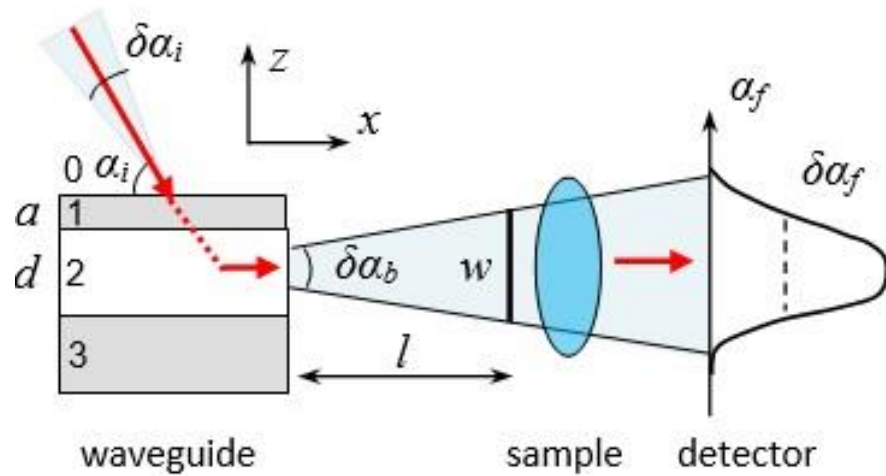


Fig. 1

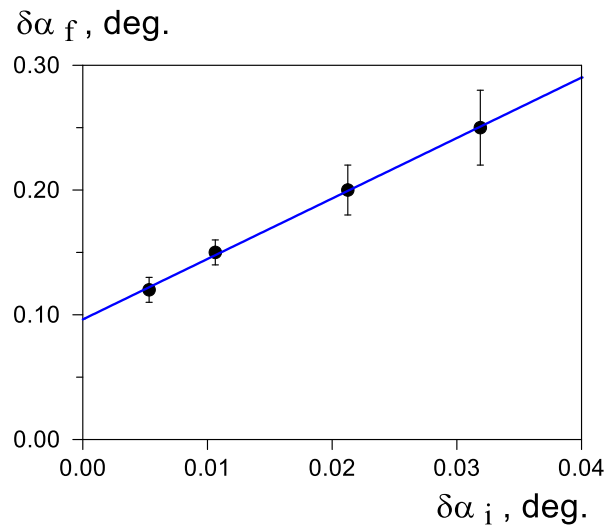


Fig. 3

$$\delta\alpha_f = 0.096 + 4.4 \cdot \delta\alpha_i$$

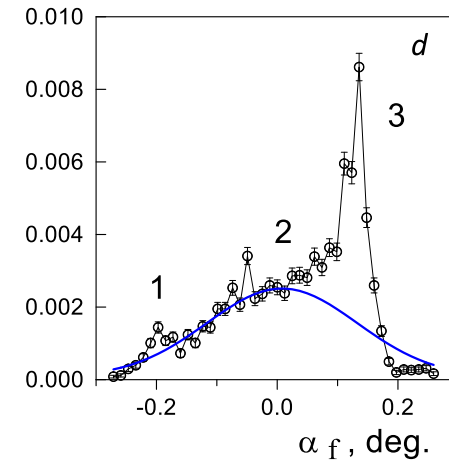
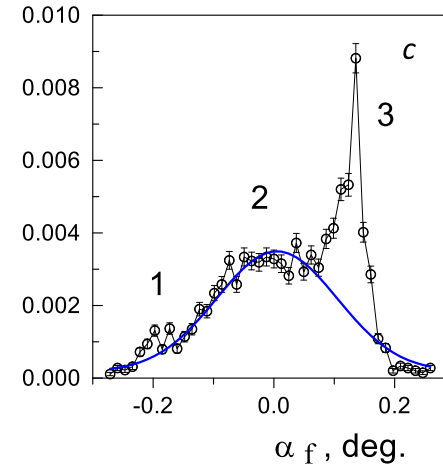
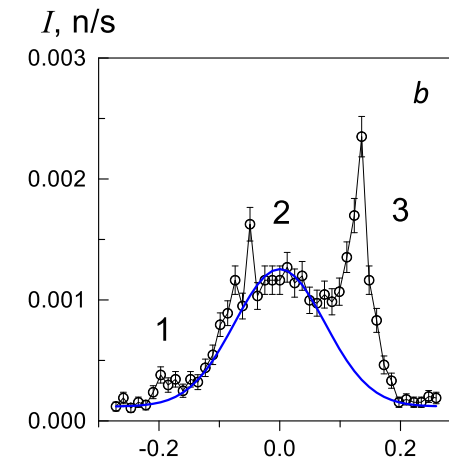
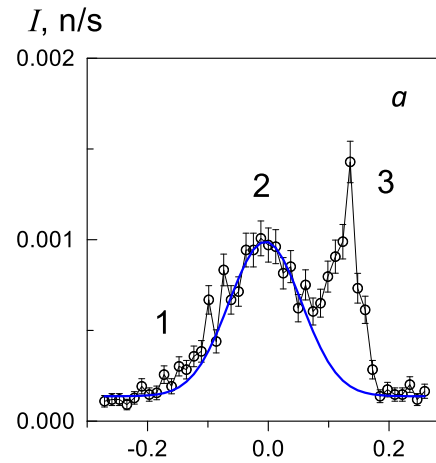


Fig. 2

**Публикации – 167**

**Конференции – 94**

**Заявки на патенты – 1**

**Премии ОИЯИ за 2020 г.**

**Вторая премия в области научно-технических прикладных исследований  
*«Надатомная структура планарных и развитых электрохимических границ раздела для литиевых накопителей энергии по данным нейтронного рассеяния».***

**Авторы: М. В. Авдеев, В. И. Петренко, И.В. Гапон, А. И. Иванов, Е. Е. Ушакова, Е. Н. Косячкин, Д. М. Иткис, Л. В. Яшина, А. А. Рулев, Т. К. Захарченко.**

## Бюджет – 2021

**План – 370 kUSD (материальные статьи)**

**Большая часть выделенных средств предназначалась для осуществления текущих платежей по ранее заключенным контрактам.**

**МНТС – план - 168 kUSD, по решению дирекции ЛНФ сумма уменьшена до 108 kUSD в рамках корректировки бюджета ЛНФ для финансирования контрактных работ по теме 1140 (новый источник нейтронов).**

**Исполнение по материальным статьям – 100 %, МНТС – 80 %.**

Thank You for Your Attention!