

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Организация исследований и методические результаты. По теме 1031 в 2002 г. исследования по физике конденсированных сред велись на реакторе ИБР-2 с использованием рассеяния нейтронов. Кроме того физики Отдела нейтронных исследований конденсированных сред ЛНФ, работающие в рамках темы 1031, проводили эксперименты в некоторых нейтронных лабораториях Европы по принятым предложениям. На ИБР-2 в течение года было проведено восемь сессий работы. Распределение времени на эксперименты на спектрометрах реактора производилось в соответствии с рекомендациями экспертов по поступившим заявкам и имеющимися долгосрочными обязательствами.

Научные исследования в 2002 г. велись на 10 установках: HRFD, DN-2, DN-12, SKAT, YuMO, EPSILON, REFLEX-P, KDSOG, NERA и DIN. Крупные методические работы выполнены на спектрометрах FSD, SPN, EPSILON и REFLEX-P. На фурье-дифрактометре FSD, предназначенном для изучения внутренних напряжений в материалах и инженерных изделиях, продолжалась работа по детекторной системе. В частности, в октябре были установлены два новых элемента ± 90 -градусных детекторов на основе ZnS(Ag)-сцинтилляторов модернизированной конфигурации с увеличенным телесным углом. На SPN в течение года шла радикальная модернизация, в результате которой завершена установка новой головной части спектрометра, введён в действие многоканальный поляризатор нейтронов, предназначенный для проведения малоугловых исследований (его поляризационная эффективность превысила 90% в широком интервале длин волн), введён в действие эффективный многоканальный фокусный анализатор поляризации. На EPSILON установлены девять новых детекторов с коллиматорами, таким образом, число детекторов доведено до 36. На REFLEX-P заново проведена сборка нейтронно-оптической системы, что привело к увеличению интенсивности поляризованного пучка в ~ 4 раза. Кроме того, на всех спектрометрах ИБР-2 продолжались методические работы, направленные на улучшение их параметров, условий проведения экспериментов и обработки первичной информации.

Научные результаты. Дифракция. В продолжение исследований соединения $(La_{1-y}Pr_y)_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ (LPCM-y в 2002 г. проведена серия нейтронных дифракционных экспериментов (на HRFD, DN-12 и DMC на источнике SINQ) для получения информации о магнитной фазовой диаграмме составов с преобладанием изотопа ^{18}O (до 75%). Их основным результатом явилось утверждение о качественной идентичности фазовых диаграмм LPCM-y/ ^{16}O и LPCM-y/ ^{18}O (Рис.1). В свою очередь, это позволяет считать, что гигантский

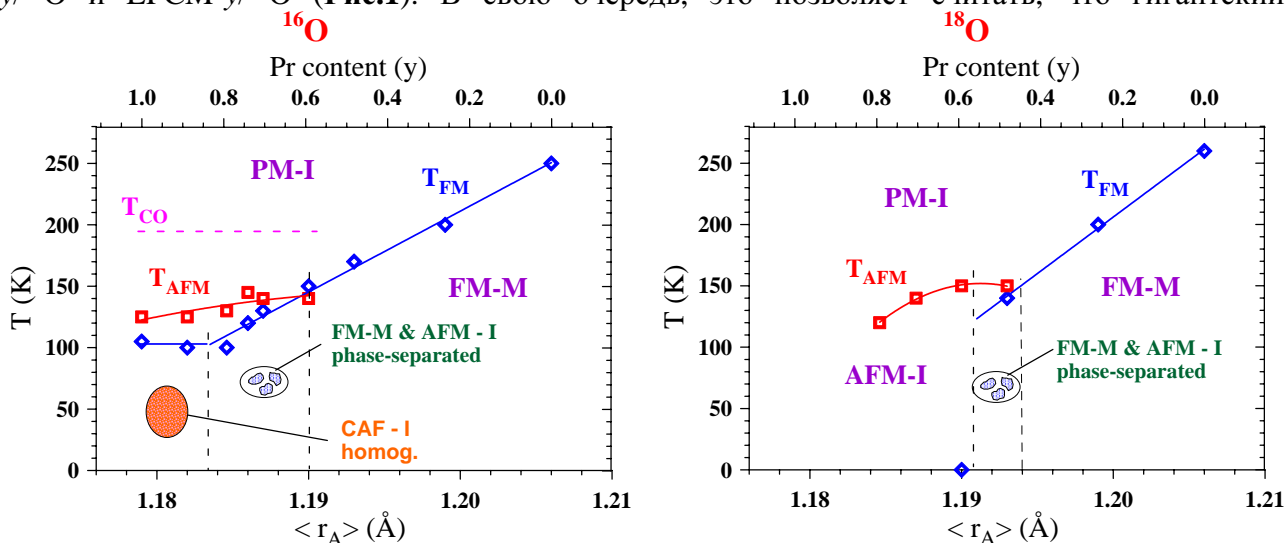


Рис.1. Магнитные фазовые диаграммы для составов $(La_{1-y}Pr_y)_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$, содержащих изотопы кислорода ^{16}O (слева) и ^{18}O (справа).

изотопический эффект в электросопротивлении, наблюдавшийся ранее для состава LPCM с $y=0.75$, является проявлением перехода в другое фазовое состояние (подробнее см. в разделе Experimental Reports).

Изучены кристаллическая и магнитная структуры нового слоистого сложного оксида марганца Sr_2MnGaO_{5+x} при промежуточных (между предельными $x=0$ и 0.5) содержаниях кислорода $x=0.13$ и 0.41 . Ранее было показано, что в предельных случаях магнитные структуры существенно различны и соответствуют антиферромагнитным (АФМ) типам G для $x=0$ и C для $x=0.5$. Оказалось, что в то время как состав с $x=0.13$ при понижении температуры ($T_N \approx 200$ К) переходит в однородное антиферромагнитное состояние типа G (т.е. его поведение такое же как и состава с $x=0$), в составе с $x=0.41$ последовательно возникают магнитные фазы обоих типов G ($T_N \approx 140$ К) и C ($T_N \approx 110$ К) с примерно равными концентрациями (Рис.2). Необычным фактом является отсутствие признаков каких-либо структурных различий у двух возникающих магнитных фаз.

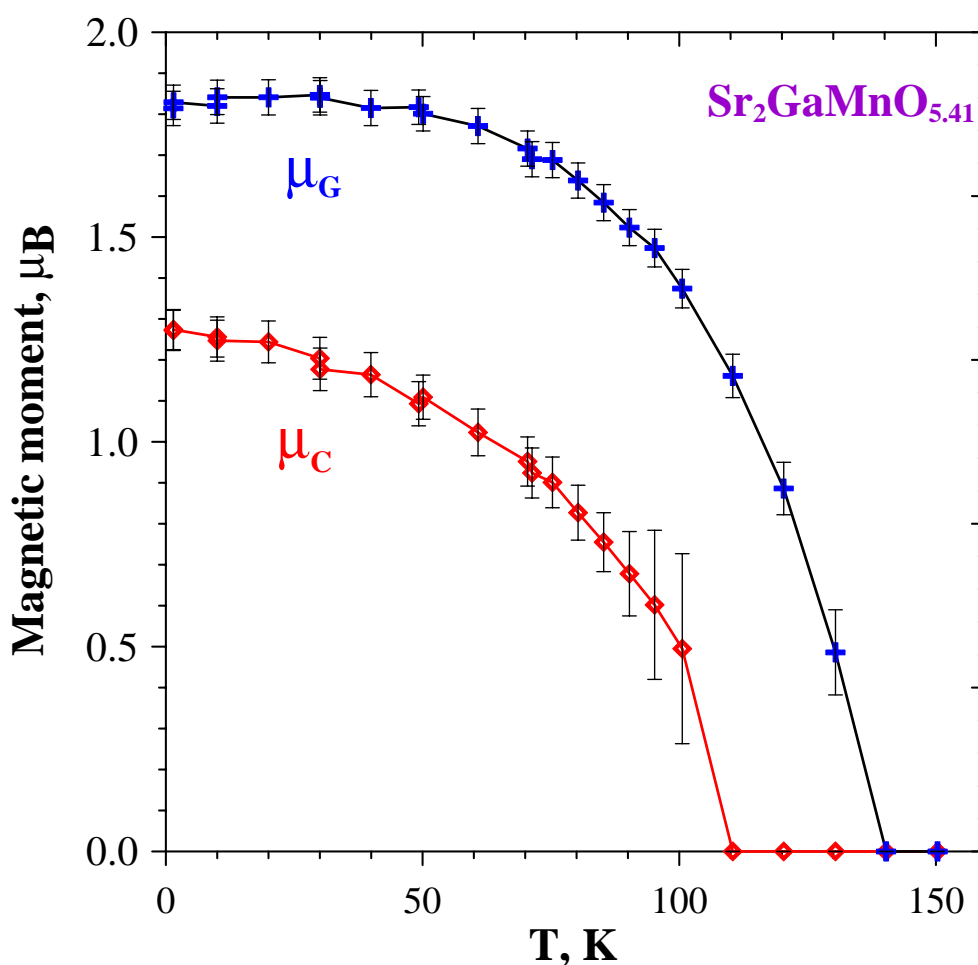


Рис.2. Зависимость величины магнитных моментов состава $Sr_2MnGaO_{5.41}$ от температуры. При $T \approx 140$ К и 110 К происходят два последовательных магнитных перехода с образованием антиферромагнитных фаз G и C типа, т.е. возникает магнитное фазовое расслоение.

На спектрометре ДН-12 выполнено большое число экспериментов, направленных на изучение поведения как атомной, так и магнитной структуры кристаллов при высоких давлениях. Например, исследована кристаллическая структура халькогенидов ртути $HgSe_{0.7}S_{0.3}$ $HgTe_{0.85}S_{0.15}$ в диапазоне давлений до 8 ГПа. На основе полученных структурных

данных построена феноменологическая модель структурного фазового перехода из кубической структуры типа сфалерита в гексагональную структуру типа киновари, происходящего в этих соединениях под давлением.

В рамках программы изучения манганитов на ДН-12 проведено исследование кристаллической и магнитной структуры $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_3$ ($y=0, 0.1$) и $\text{Pr}_{0.8}\text{Na}_{0.2}\text{MnO}_3$, обладающих CMR – эффектом, при давлениях до 4.5 ГПа в диапазоне температур 16 – 300 К. Впервые обнаружено, что в этих соединениях, имеющих существенно различные магнитные структуры при нормальном давлении ($\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ и $\text{Pr}_{0.8}\text{Na}_{0.2}\text{MnO}_3$ имеют АФМ структуру псевдо-СЕ типа, $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}_{0.9}\text{Fe}_{0.1}\text{O}_3$ – ферромагнетик), при высоких давлениях в области низких температур происходит стабилизация АФМ состояния типа А, характеризующегося вектором распространения $\mathbf{q}=(010)$ (подробнее см. в разделе Experimental Reports).

Исследовано влияние на Fe_2O_3 квазигидростатического давления до 4 ГПа и гидростатического давления до 2.5 ГПа. Обнаружено, что в квазигидростатических условиях, уже при давлении $P \sim 2$ ГПа происходит спин-переориентационный переход, приводящий к изменению угла магнитных моментов Fe по отношению к ромбоэдрической оси (111) кристалла. В то же время, в гидростатических условиях, вплоть до давления 2.5 ГПа переориентации магнитных моментов не наблюдалось.

На ДН-2 изучались монокристаллы $\text{Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$, в которых ранее были обнаружены аномалии в температурных зависимостях некоторых макроскопических свойств. Дифракционные эксперименты подтвердили гипотезу о множественных фазовых превращениях в этом соединении. По-видимому, ситуация в $\text{Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Te}$ аналогична наблюдавшейся в узкощелевом полупроводнике InSe, для которого анализ кинетических, гальваномагнитных и термоэлектрических явлений свидетельствовал о существовании структурных фазовых переходов пайерлсовского типа. Более того, исследованные для InSe температурные зависимости удельного сопротивления указали на нестабильность структуры и наличие ряда фазовых превращений. Для прояснения ситуации планируется проведение структурных исследований InSe на моно- и поликристаллических образцах.

Малоугловое рассеяние нейтронов. В рамках исследований кластерного состояния фуллеренов в растворах проведены эксперименты по малоугловому рассеянию нейтронов на системе C_{60} /сероуглерод и коллоидном растворе C_{60} в воде. Измерения показали отсутствие какой-либо заметной зависимости рассеяния в C_{60} /сероуглерод от температуры и присутствие в растворах небольших кластеров фуллеренов со средним числом частиц около четырех. Это число не зависит от температуры и концентрации в исследованных диапазонах. Отсюда следует, что использование капельной модели при описании кластерного состояния фуллеренов в растворе некорректно. Для коллоидного раствора C_{60} в воде обнаружено наличие полидисперсности в широком диапазоне размеров вплоть до 50 нм. Вариация контраста при разбавлении системы тяжелой водой указывает на присутствие в агрегатах компоненты отличной от фуллеренов. Одна из гипотез происхождения данной компоненты связана с возможным образованием особых гидратных оболочек вокруг фуллеренов (подробнее см. в разделе Experimental Reports).

Исследована конформация элонгационного фактора eEF1A млекопитающих (кролик) в растворе методами малоуглового нейтронного рассеяния и сканирующей микрокалориметрии. Найдено, что в отличие от бактериального аналога белка молекула eEF1A не имеет фиксированной жесткой структуры в растворе. Радиус инерции молекулы eEF1A оказался равным 5.2 нм, что значительно больше величины для прокариотического EF1A. Удельная теплота денатурации eEF1A, измеренная методом сканирующей микрокалориметрии, оказалась равной 4 кал/г, что значительно ниже величины 7 кал/г для прокариотического EF1A, рассчитанной для той же температуры денатурации. Это обстоятельство указывает на то, что конформация eEF1A в растворе значительно более неупорядоченная, чем таковая прокариотического белка. Данные нейтронного рассеяния

показывают, что eF1A становится значительно более компактным при образовании комплекса с деацилированной тРНК.

Поляризованные нейтроны и нейтронная оптика. Методом рефлектометрии изучено формирование интерфейса и поверхности при образовании мультислоев из P(dS-b-pVMA) кополимеров с различным молекулярным весом составляющих блоков. Установлено, что многочисленные особенности, наблюдающиеся в спектрах незеркально рассеянных нейтронов, связаны с наличием случайно распределенных островков или пор на поверхности пленок и с наличием сложных межфазных границ.

В рамках исследований многослойных магнитных структур проведены эксперименты по рефлектометрии на структурах MgO (001) / [Fe (x ML)/ V (y ML)]_N / Pd. Получены зависимости для намагниченности и распределения атомов Fe и V вглубь образца. Ядерный и магнитный потенциалы падают быстрее и растут сильнее после прохождения границы раздела в направлении от ванадия к железу, чем в направлении от железа к ванадию. Этот факт обусловлен асимметрией взаимного проникновения атомов железа и ванадия

На спектрометре REFLEX-P продолжался прецизионный эксперимент по поиску поверхностных магнитных возбуждений в магнитных тонкопленочных структурах. Набран полный набор экспериментальных данных. В настоящее время ведется работа по созданию математической модели для обработки полученных результатов.

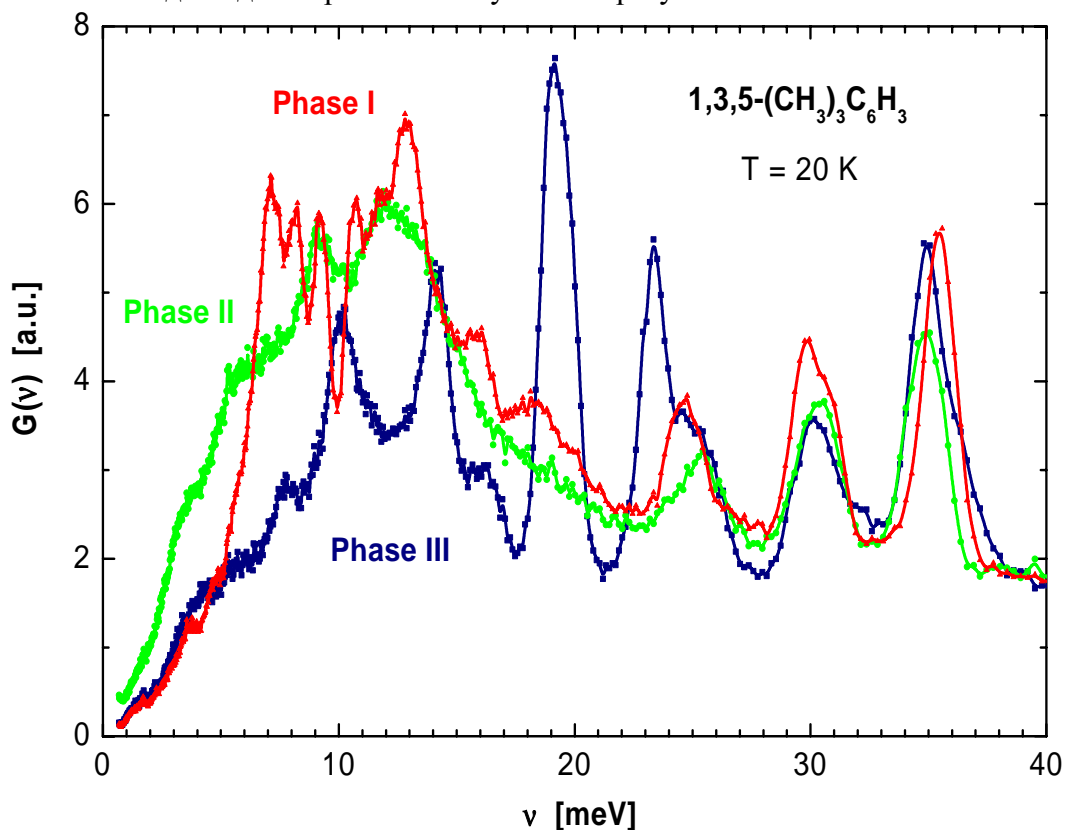


Рис. 3. Плотность фононных состояний различных структурных фаз мезитилена.

Неупругое рассеяние нейтронов. На спектрометре NERA исследованы структурные фазовые переходы и динамика твердого мезитилена, и влияние концентрации и температуры на динамику аммониевых групп и фазовые переходы в смешанных кристаллах Rb_{1-x}(NH₄)_xBr. Мезитилен известен как органический растворитель имеющий сравнительно низкую температуру замерзания 227 К и как перспективный материал для холодных источников нейтронов. Результаты одновременных измерений спектров дифракции и

неупругого рассеяния нейтронов показали, что фазовый состав твердого мезитилена зависит от скорости охлаждения, т.е. мезитилен является интересным примером относительно простого молекулярного кристалла, существующего при низких температурах в разных структурных модификациях, обладающих существенно разными динамическими характеристиками (**рис. 3**). Это позволит в дальнейшем исследовать влияние упаковки молекул на динамику решетки и ротационную динамику метиловых групп (подробнее см. в разделе Experimental Reports).

Методом неупругого рассеяния нейтронов выполнены исследования эффектов кристаллического электрического поля в $R\text{AgSb}_2$ с $R=\text{Ce, Tm, Er}$ и Ho . Определены параметры КЭП, схемы уровней и волновые функции. Температурная зависимость магнитной восприимчивости, рассчитанная вдоль различных кристаллографических направлений исходя из параметров КЭП, хорошо согласуется с результатами измерений на монокристаллах. Анализ показал, что магнитокристаллическая анизотропия в этих соединениях в значительной степени обусловлена наличием КЭП.

Прикладные исследования. Продолжено дифракционное изучение текстур образцов амфиболитов и гнейсов из разреза Кольской сверхглубокой скважины СГ-3 и их аналогов с поверхности. С использованием количественной информации о текстурах и данных об упругих модулях минералов, образующих горные породы, было проведено моделирование распределения скоростей упругих волн в исследуемых образцах. Анализ полученных данных позволит выяснить вклад ориентированных минеральных компонент в суммарную упругую анизотропию горных пород, что необходимо для установления закономерностей между особенностями текстур и механизмами деформационных и метаморфических процессов, обусловивших текстурообразование в процессе эволюции литосферы.

Комплексное применение нейтронографического текстурного анализа и ультразвукового пространственного прозвучивания сферических образцов при различных высоких давлениях позволило дать физическое объяснение различному характеру изменения анизотропии свойств мантийных оливинитов и установить факт уменьшения коэффициента анизотропии с ростом давления для оливиновых ксенолитов.

Изучена деформация образца, состоящего из песчаника и оливина. Для этого измерена деформация бестекстурного многофазного песчаника, содержащего кварц, различные виды полевого шпата и слюду. Образец был деформирован путем удара для моделирования условий сильного воздействия. Деформация сканировалась поперек границы раздела между дунитом (оливин) и кварцитом (кварц). Данные, полученные с помощью нейтронной дифракции по времени пролета, были проанализированы совместно с результатами исследования с помощью рентгеновского синхротронного излучения и микроструктурных измерений. Результаты показывают, что остаточные деформации значительно различаются в зависимости от характеристической комбинации текстуры, особенностей приложенной деформации и микроструктурных особенностей горных пород. Размер зерна рассеивающих кристаллов оценивался путем анализа профиля пиков (дифракция синхротронного излучения) по обеим сторонам границы раздела фаз.

Для обоснования механизма распухания графитовых блоков под действием нейтронных потоков проведен ряд экспериментов *in-situ* по изучению анизотропии поведения образцов реакторного графита под действием внешних сжимающих напряжений. Исследование проведено как в упругой, так и пластической области деформации. Установлено, что кристаллическая решетка графита не изменяется вплоть до напряжений, близких к напряжению разрушения. Возможно, что столь необычный результат связан с исходной пористостью образцов, т.е. действие сжимающих напряжений сводится к закрыванию пор в образцах, не вызывая заметной упругой деформации кристаллической решетки. Эти данные будут проверены на образцах графита, вырезанных из разных мест и по-разному расположенных в реакторном блоке.

На дифрактометре ДН-2 проведено исследование явления упорядочения в сплаве NiCr, который относится к материалам конструкционного назначения. Исследовался ряд составов на основе NiCr с добавками Mo, Si и C. Образцы представляли собой пластины, отожженные при температурах 300, 350, 400 и 450°C. Лишь в одном (сплав 32ХНМ, отожженный при $T=450^{\circ}\text{C}$) из 32 исследованных образцов были обнаружены сверхструктурные дифракционные пики, указывающие на упорядочение атомов Ni и Cr. Установлено, что в этом образце образуется сверхструктура Ni₂Cr. При упорядочении атомы хрома и никеля располагаются по плоскостям (110) исходной кубической ячейки (пространственная группа Fm3m, $a=3.62 \text{ \AA}$) так, что после одного слоя хрома следует два слоя никеля. Элементарная ячейка такой решетки является орторомбической (Pnmm) с $a=7.653(1)$, $b=2.560(1)$ и $c=3.631(1) \text{ \AA}$. Упорядочение происходит во всем объеме образца.