

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Основные цели исследований по теме состояли в изучении структуры, динамики и микроскопических свойств наносистем и новых материалов, интересных с точки зрения фундаментальных исследований, или имеющих большое значение для развития нанотехнологий в сфере электроники, фармакологии, медицины, химии, современной физики конденсированных сред и смежных областей методами рассеяния нейтронов и комплементарными методами.

Основная часть научных экспериментальных работ проводилась на базе комплекса спектрометров модернизированного реактора ИБР-2 в соответствии с ПТП ОИЯИ и пользовательской программой ЛНФ. Также по некоторым научным задачам работа проводилась в нейтронных и синхротронных центрах в России и за рубежом согласно существующим соглашениям о сотрудничестве, а также в соответствии с принятыми заявками на эксперимент. Также проводились работы по модернизации существующих и созданию новых спектрометров в соответствии с планами развития комплекса спектрометров реактора ИБР-2М. Основное внимание было уделено реализации первоприоритетных задач - созданию нового дифрактометра для исследования микрообразцов ДН-6 и многофункционального рефлектометра ГРЭЙНС.

В рамках исследований по теме сотрудники отдела НИКС поддерживали широкие связи со многими научными организациями в странах-участницах ОИЯИ, а также других странах. Как правило, сотрудничество оформлялось совместными протоколами или соглашениями. В России наиболее активное сотрудничество велось с близкими по тематике организациями, такими как НИЦ КИ, ПИЯФ, ГНЦ РФ ФЭИ, МГУ, ИФМ УрО РАН, ИК РАН, ИЯИ РАН и др.

Главными направлениями научных исследований, реализация которых осуществлялась сотрудниками НЭО НИКС, являются:

- Исследование структуры и свойств новых кристаллических материалов и наносистем методом дифракции нейтронов;
- Исследование магнитных коллоидных систем в объеме и на границах раздела;
- Исследование структуры углеродных наноматериалов;
- Магнетизм слоистых наноструктур;
- Исследование надмолекулярной структуры и функциональных характеристик биологических, коллоидных и полимерных нанодисперсных материалов;
- Исследования наноструктуры и свойств липидных мембран и липидных комплексов;
- Исследование атомной динамики наносистем и материалов методом неупругого рассеяния нейтронов;
- Исследование текстуры и свойств минералов и горных пород;
- Анализ внутренних напряжений в объемных материалах и изделиях.

1.1.1. Научные результаты

1.1.1.1. Структурные исследования новых оксидных, интерметаллических и наноструктурированных материалов

Проведено исследование кристаллической, магнитной структуры несобственного мультиферроика $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$, методом нейтронной дифракции, рентгеновской дифракции и магнитной восприимчивости в диапазоне высоких давлений 0 – 10 ГПа и температур 1.5 – 300 К, [1] (рис. 1). В данном соединении спонтанная электрическая поляризация возникает вследствие нарушения инверсионной симметрии за счет возникновения неколлинеарного

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

антиферромагнитного упорядочения. Кроме того, магнитные моменты железа в тригональной структуре $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ (пр. гр. $P\text{-}3m1$) образуют 2D магнитную треугольную решетку, при этом магнитные взаимодействия между магнитными плоскостями в 25 раз слабее внутрислойных. С повышением давления в $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ наблюдался структурный фазовый переход в моноклинную фазу симметрии $C2/c$, реализующийся через широкую область структурного фазового расслоения (остаточная фракция исходной тригональной фазы наблюдалась вплоть до 10 ГПа). Симметрия антиферромагнитного (АФМ) упорядочения для тригональной фазы характеризуется волновым вектором $q = (1/3, 0, k_z)$. С повышением давления наблюдалось увеличение величины k_z от 0.45 до 0.48, и увеличение температуры Нееля с барическим коэффициентом 0.09 ГПа^{-1} . В моноклинной фазе высокого давления установления магнитного упорядочения не наблюдалось вплоть до температуры 1.5 К.

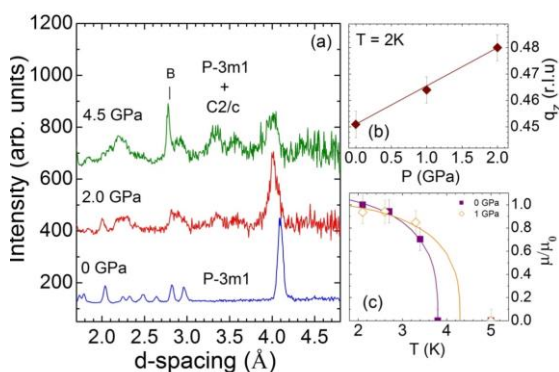


Рис. 1. Участки нейтронных дифракционных спектров (дифрактометр ДН-12, ИБР-2), демонстрирующие структурный фазовый переход в $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ при высоком давлении (а). Знаком “В” обозначен пик от наковален камеры давления. Барическая зависимость компоненты k_z вектора распространения АФМ структуры, соответствующей тригональной фазе $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ и рассчитанной при $T = 2 \text{ K}$ (b). Температурные зависимости упорядоченного магнитного момента Fe для тригональной фазы при различных давлениях, нормированных на значение при $T = 2 \text{ K}$ (c).

Продолжены исследования структурного и магнитного фазовых переходов в феррите меди CuFe_2O_4 [2] (рис. 2). Дополнительные нейтронные дифракционные эксперименты были проведены на установке HRPT (SINQ, PSI, Швейцария). Феррит меди кристаллизуется в структуре классической шпинели и может находиться в двух структурных модификациях – кубической (пр. гр. $Fd\bar{3}m$) при $T > 700 \text{ K}$ и тетрагональной (пр. гр. $I4_1/amd$) ниже этой температуры. Характер температурных изменений межатомных расстояний свидетельствует о том, что в основе структурного перехода лежит ян-теллеровское искажение CuO_6 октаэдров, а не взаимная миграция атомов меди и железа. Установлено, что при переходах между тетрагональной и кубической фазами оба структурных состояния равновесно сосуществуют в довольно широком температурном интервале ($\sim 40^\circ\text{C}$). При этом характерные размеры доменов сосуществующих фаз велики ($\sim 1000 \text{ \AA}$, мезоскопическое фазовое расслоение). Одной из причин стабилизации такого состояния являются дальнедействующие внутренние напряжения внутри кристаллитов, возникающие при структурном фазовом переходе и проявляющиеся в сильном анизотропном уширении дифракционных пиков. Температура образования ферритмагнитного упорядочения заметно выше (на $\sim 50 \text{ K}$) температуры структурного перехода. Это свидетельствует о слабой связи между решеточной (орбитальной) и магнитной (спиновой) подсистемами. Отсутствие связи структурного и магнитного переходов в CuFe_2O_4 является одним из существенных отличий этой шпинели от нормальных шпинелей с магнитными катионами только в В-позициях, в которых из-за образования магнитными атомами “пирохлорной решетки” дальний магнитный порядок образуется только вследствие ослабления фрустраций при структурном переходе.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

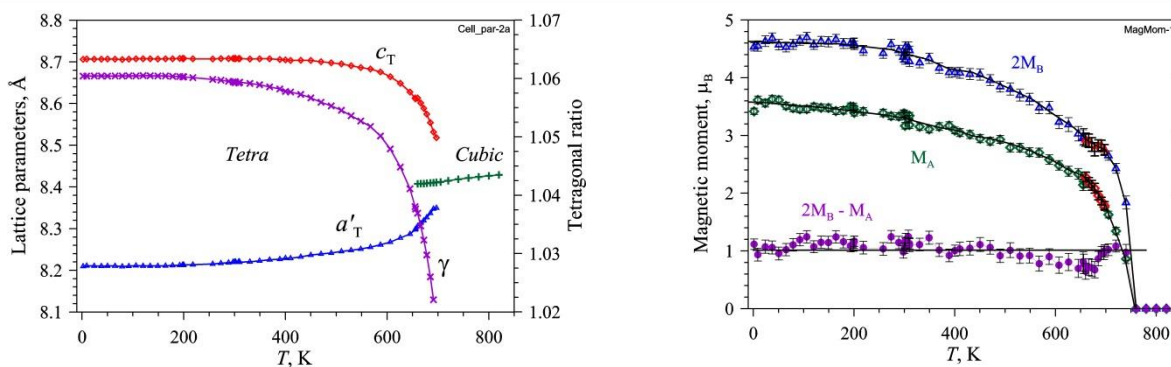


Рис. 2. Слева: Зависимость параметров ячейки кубической и тетрагональной фазы (левая шкала) и тетрагонального отношения (γ , правая шкала) от температуры. Для удобства восприятия в тетрагональной фазе показан параметр $a'_T = \sqrt{2} \cdot a_T$. Некоторые температурные точки измерялись дважды. Статистические ошибки меньше размера символов. Справа: зависимости от температуры (данные получены при нагревании) упорядоченного магнитного момента в октаэдрических (удвоенная величина, $2M_B$) и тетраэдрических (M_A) позициях и разности между ними ($2M_B - M_A$). Указаны статистические ошибки точек. Линии через точки $2M_B$ и M_A проведены для удобства восприятия. Линия, проведенная через их разность, является средним значением ($1.01 \mu_B$) по всем точкам в интервале (1.5 – 750) К.

На дифрактометре ФДВР продолжены исследования электродов литий-ионных аккумуляторов [3]. *In situ* нейтронные дифракционные эксперименты были проведены для изучения в реальном времени процессов заряда – разряда коммерческих литиевых аккумуляторов с электродами из LiFePO_4 (LFP) и графита. Экспериментальные данные позволили в деталях проследить стадийность процесса внедрения Li в графит с последовательным образованием нескольких LiC_n фаз и обратимый переход $\text{LiFePO}_4 \leftrightarrow \text{FePO}_4$. Сравнение процессов заряда/разряда в батареях с катодом из чистого LFP и LFP, содержащим ~1% ванадия (LFPV), показало, что во втором случае существенно большая доля материала анода переходит в конечное LiC_6 состояние из-за меньшей относительной массы графита к фтор-железофосфату. Анализ изменений микроструктуры материала катода при внедрении в него ванадия показал значительное увеличение степени дефектности структуры, что коррелирует с лучшими электрохимическими свойствами LFPV по сравнению с LFP.

На дифрактометре ДН-12 проведено исследование кристаллической и магнитной структуры интерметаллидов кобальта RCo_2 ($R = \text{Tb}, \text{Ho}$) в диапазоне давлений до 5 ГПа [4], **рис. 3.** В данных соединениях обнаружены необычные физические явления, среди которых – переход из немагнитного в магнитно-упорядоченное состояние подрешетки кобальта при изменении ионного радиуса и магнитного момента R – катиона. Установлено, что в TbCo_2 под давлением происходит резкое линейное уменьшение температуры Кюри с барическим коэффициентом -9 К/ГПа и значения упорядоченного магнитного момента с коэффициентом $-0.1 \mu_B/\text{ГПа}$. При это величина упорядоченного магнитного момента Tb не изменяется под давлением. В HoCo_2 изменение температуры Кюри имеет нелинейный характер, в диапазоне 0-1.7 ГПа ее уменьшение характеризуется барическим коэффициентом -6 К/ГПа , при более высоких давлениях она слабо зависит от давления. Упорядоченный магнитный момент в этом соединении под давлением уменьшается с примерно таким же коэффициентом, как а в TbCo_2 , $-0.1 \mu_B/\text{ГПа}$.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

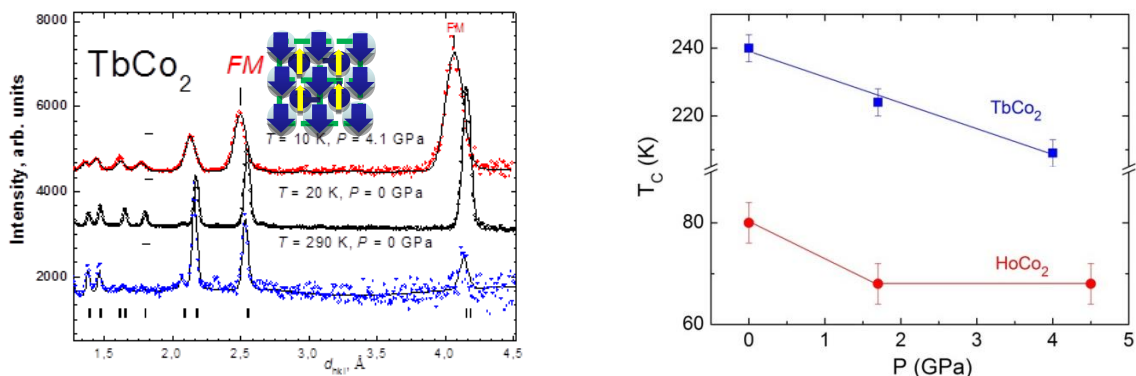


Рис. 3. Слева: Нейтронные дифракционные спектры $TbCo_2$, измеренные на дифрактометре ДН-12 при различных давлениях и температурах. Знаками “FM” обозначены пики с наибольшим магнитным вкладом от ферромагнитного упорядочения подрешеток Tb и Co. Справа: барические зависимости температуры Кюри в $TbCo_2$ и $HoCo_2$.

На дифрактометре ДН-6 проведено исследование кристаллической структуры двойного перовскитного антисегнетоэлектрика Pb_2MgWO_6 при высоких давлениях до 5.4 ГПа и комнатной температуре (**рис. 4**). При давлениях $P \sim 1$ ГПа наблюдался структурный фазовый переход из антисегнетоэлектрической орторомбической фазы симметрии $Pnma$ в параэлектрическую кубическую фазу симметрии $Fm-3m$. Определены структурные параметры обеих фаз и их барические зависимости.

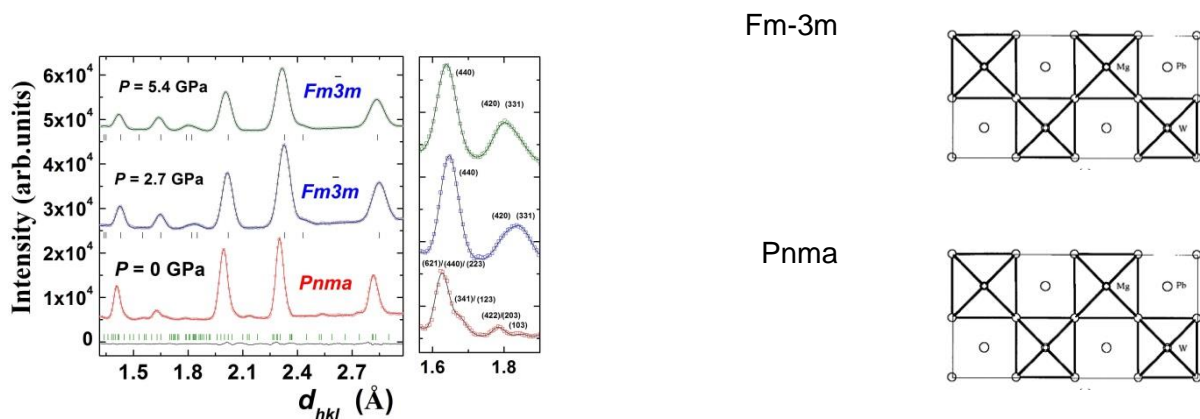


Рис. 4. Слева: нейтронные дифракционные спектры Pb_2MgWO_6 , измеренные при различных давлениях. Справа: схематическое изображение кристаллической структуры антисегнетоэлектрической орторомбической фазы симметрии $Pnma$ и кубической параэлектрической фазы симметрии $Fm-3m$.

Продолжены исследования структурных особенностей и люминесцентных свойств кристаллофосфоров на основе лютеций-алюминиевых гранатов $Lu_3Al_5O_{12}:Ce^{3+}$, допированных наночастицами оксида лютеция Lu_2O_3 . Установлено, что в данной системе в процессе термообработки не образуются новые структурные фазы, однако происходит формирование устойчивой дефектной области на границе раздела фаз $LuAG:Ce$ и Lu_2O_3 , что подтверждается изменением всех структурных характеристик $LuAG:Ce$ после введения оксида лютеция.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1.1.2 Исследования магнитных жидкостей и наночастиц

Рассмотрены экспериментальные аспекты наблюдения эффектов взаимодействия частиц в полидисперсных магнитных жидкостях посредством малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей [5]. Выделены различные режимы взаимодействия, предсказываемые теорией дипольных жидкостей, в отношении анализа структурного фактора рассеяния в различных условиях (отсутствие и присутствие внешнего магнитного поля). Показано, что наиболее перспективным для экспериментальных исследований является режим слабой связи (малая константа дипольного взаимодействия, большая концентрация частиц) в случае магнитных жидкостей с твердыми и мягкими стабилизирующими оболочками. Из сравнения экспериментальных данных рассеяния магнитными жидкостями с разной стабилизацией следует, что наиболее информативными системами с этой точки зрения являются классические магнитные жидкости на основе неполярных органических растворителей со стабилизацией магнетитовых наночастиц (характерный размер 8-10 нм) олеиновой кислотой. Рассмотрен также и режим образования равновесных цепочечных агрегатов (большая константа дипольного взаимодействия, малая концентрация частиц), который является наиболее удобным для изучения посредством малоуглового рассеяния. Фактически в данном режиме магнитную жидкость можно представить как двух-фазный раствор, состоящий из невзаимодействующих агрегатов и отдельных частиц. На практике, однако, такой режим трудно наблюдать в чистом виде из-за наличия дополнительной коллоидной агрегации, которая появляется в процессе приготовления как результат сильного диполь-дипольного взаимодействия. В процессе экспериментального исследования обнаружено, что в полидисперсных магнитных жидкостях присутствуют специфические магнитные корреляции, которые отвечают сильному эффективному отталкиванию в концентрированных системах (объемная доля магнитного материала $\sim 10\%$). В отличие от корреляций в положении частиц, которые исчезают при малых концентрациях (объемная доля магнитного материала $\sim 1\%$), магнитные корреляции сохраняются при таких концентрациях.

Продолжено детальное изучение водных растворов магнетоферритина (искусственного биологического комплекса апоферритина с различным содержанием магнитного материала в белковой полости), представляющих медико-биологический интерес. Используя данные малоуглового рассеяния синхротронного излучения и нейтронов (в последнем случае применена вариация контраста), получено, что даже для относительно малых факторов загрузки магнитного материала (магнетит при 100-200 атомов железа на молекулу апоферритина) в таких системах наблюдается частичное разрушение белковой оболочки (**рис. 5**). Показано, что данный эффект увеличивается с ростом фактора загрузки. Дополнительно при больших загрузках (> 500) наблюдается частичная агрегация комплексов.

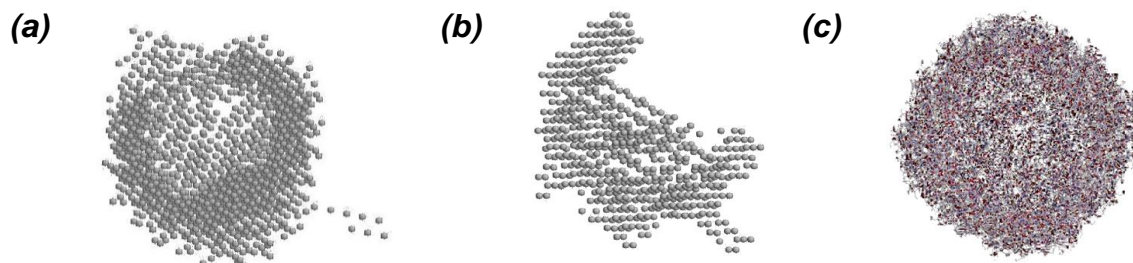
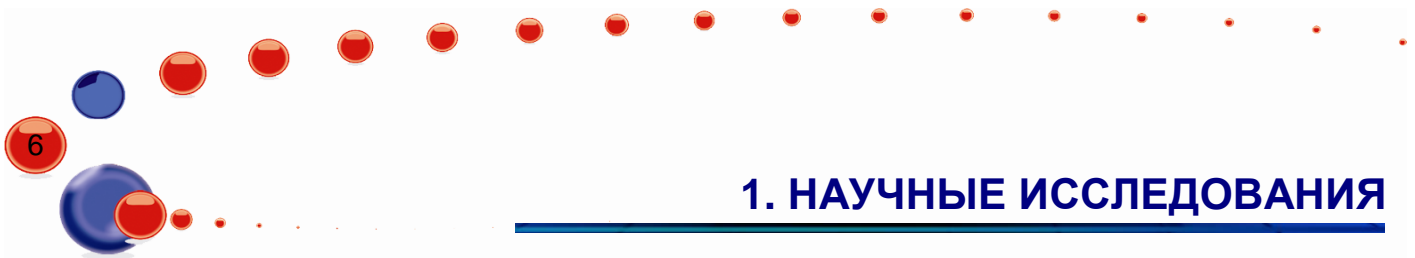


Рис. 5. Результаты моделирования на основе экспериментальных данных малоуглового рассеяния на апоферритине (а); белковой компоненте магнетоферритина с фактором загрузки $LF = 156$ (b) и сравнение с кристаллографическими данными апоферритина (с).



1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Малоугловое рассеяние нейтронов использовано совместно с моделированием молекулярной динамики для исследования взаимодействия растворителя и насыщенных монокарбоновых кислот (миристиновая кислота, стеариновая кислота), используемых для стабилизации магнитных наночастиц в магнитных жидкостях на основе неполярных органических растворителей [6]. С помощью молекулярной динамики получено распределение плотности длины рассеяния (ПДР) нейтронов вокруг молекул кислот. Найденная при этом модуляция распределения ПДР в зависимости от длины кислоты согласуется с данными малоуглового рассеяния на слабоконцентрированных растворах с дейтерированными растворителями. В частности, используя расчетные распределения ПДР, удается описать полностью экспериментальные кривые рассеяния вплоть до остаточного некогерентного фона (рис. 6).

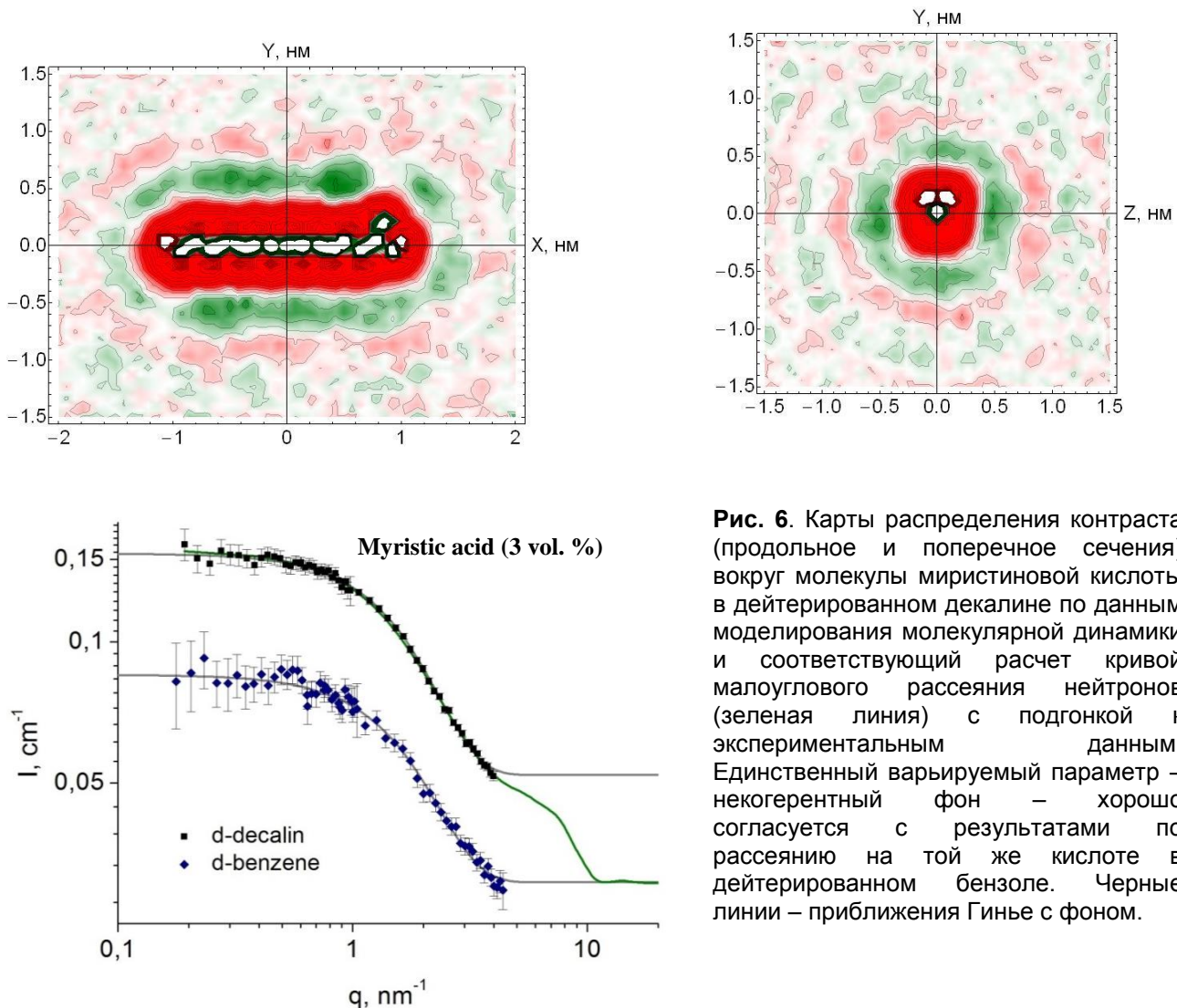


Рис. 6. Карты распределения контраста (продольное и поперечное сечения) вокруг молекулы миристиновой кислоты в дейтерированном декалине по данным моделирования молекулярной динамики и соответствующий расчет кривой малоуглового рассеяния нейтронов (зеленая линия) с подгонкой к экспериментальным данным. Единственный варьируемый параметр – некогерентный фон – хорошо согласуется с результатами по рассеянию на той же кислоте в дейтерированном бензоле. Черные линии – приближения Гинье с фоном.

Проведен анализ данных нейтронной рефлектометрии на границе раздела магнитная жидкость (магнетит/олеат натрия/D₂O)-кремний. Наблюден сильный вклад диффузного

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

рассеяния, основной причиной которого является малоугловое рассеяние на наночастицах магнитной жидкости, адсорбированных на поверхности кремния. Проведено исследование различных способов обработки фона при выделении из экспериментальных данных кривой зеркального отражения [7]. Из сравнения структурных особенностей магнитной жидкости на границе раздела и в объеме (данные малоуглового рассеяния) сделан вывод о том, что на поверхности кремния преимущественно адсорбируются отдельные частицы, а не агрегаты.

С помощью малоуглового рассеяния нейтронов исследовано поведение полиэтиленгликоля (полимера, добавляемого в состав частиц водных магнитных жидкостей для увеличения их биосовместимости) с низкой молекулярной массой ($M_w = 400, 1000$) в тяжелой воде [8]. Показано, что в концентрированных растворах полимерные молекулы частично ассоциируются в агрегаты с размером свыше 30 нм. Рассеяние на слабоконцентрированных растворах (< 3%) указывает на тип полимера «гауссов клубок»; соответствующий форм-фактор (рассчитываемый по формуле Дебая) использован при анализе рассеяния на концентрированных растворах, которое хорошо описывается в рамках модели «взаимодействующие гауссовы клубки».

1.1.1.3 Исследование углеродных наноматериалов

На основе анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов (включая вариацию контраста) на жидких дисперсиях детонационных наноалмазов предложен специальный непрерывный пространственный переход углеродных состояний от кристаллического алмаза (sp^3 -гибридизация) внутри частиц к графитоподобному состоянию (sp^2 -гибридизация) на поверхности (рис. 7).

Такой переход позволяет совместить экспериментально наблюдаемый сдвиг в средней плотности длины рассеяния частиц от плотности кристаллического алмаза (свидетельство наличия неалмазной компоненты в составе частиц) и диффузный характер поверхности, проявляющийся в специфическом отклонении от закона Порода в рассеянии [9]. Предложенный профиль имеет простое степенное поведение и, благодаря ряду особенностей, объясняет равномерное спадание общей интенсивности при вариации контраста, свойственное однородным частицам. Используемая ранее при описании структуры частиц организация типа «сферическое ядро – графеновая оболочка», дающая для толщины неалмазной компоненты на поверхности частиц значение 0.5 нм, может быть рассмотрена как приближение к данному профилю, который естественным образом отвечает переходу алмаз-графен в терминах усредненной плотности длины рассеяния. При этом неалмазные переходные связи (предположительно sp^{2+x} -связи) располагаются преимущественно ближе к поверхности частиц. Рассмотренный профиль также позволяет напрямую определить параметры функции распределения наноалмазов по размерам.

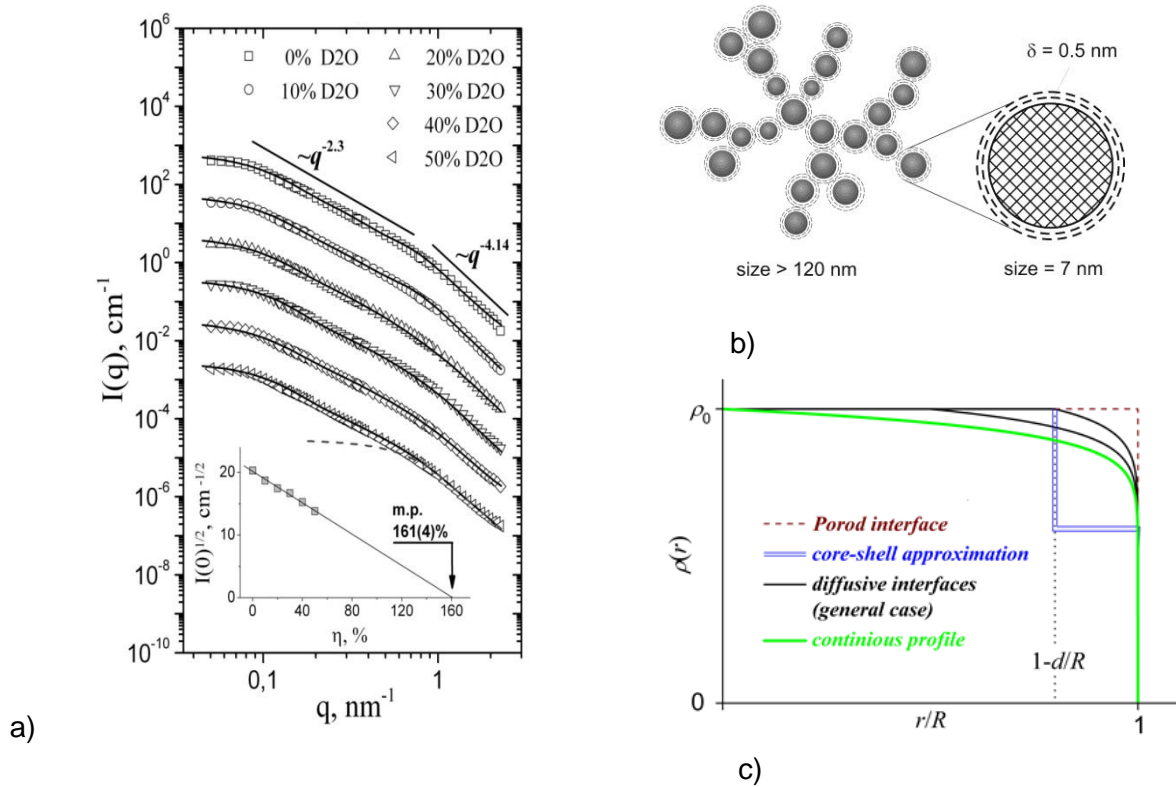


Рис. 7. Кривые малоуглового рассеяния нейтронов на жидких дисперсиях детонационных наноалмазов, измеренные с вариацией контраста (а). Схематический вид кластера ДНА в жидких дисперсиях с выделением его основной структурной единицы – частицы, составленной из кристаллического алмаза и графеновой оболочки (b). Рассмотрены различные приближения такой оболочки. Наилучшим образом экспериментальные данные малоуглового рассеяния нейтронов описывает диффузный непрерывный профиль - зеленая линия (с).

Методом малоуглового рассеяния нейтронов проведена сравнительная структурная характеристика кластеров фуллеренов C_{60} и C_{70} в воде и в смешанном растворителе NMP/ H_2O . Водные растворы получали методом замены растворителя. Для получения водно-органической системы C_{60} /NMP/ H_2O фуллерен изначально растворялся в органическом растворителе с последующим добавлением воды, так что доля NMP в конечном растворе составляла не более 0.005% по объему. Получено распределение по размерам кластеров для каждого из образцов. Исследована возможность использования растворов фуллеренов на основе NMP/ H_2O в биомедицинских применениях с точки зрения токсичности. В частности, наблюдается корреляция между размерами кластеров фуллерена в растворах и их цитотоксичностью [10].

1.1.1.4 Исследование магнитных наноструктур

На спектрометре РЕМУР проведено исследование магнитного состояния слоистой наноструктуры Ta(10нм)/V(150нм)/ $Fe_{0.7}V_{0.3}$ (1нм)/V(1.2нм)/ $Fe_{0.7}V_{0.3}$ /Nb(150нм)/Si, состоящей из ферромагнитных и сверхпроводящих слоёв, методом рефлектометрии поляризованных нейтронов (рис. 8). Предполагалось, что в такой наноструктуре могут реализовываться три явления. Первое явление – антиферромагнитное упорядочение пары слоёв $Fe_{0.7}V_{0.3}$ (1нм) во внешнем магнитном поле. При этом, степень антиферромагнетизма должна была возрастать

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

при сверхпроводящих переходах слоёв ниобия ($T_c=8.5\text{K}$) и ванадия (4.8K). Второе явление – это намагничивание сверхпроводящей пары ферромагнитными слоями, что проявляется в намагничивании сверхпроводящего слоя. И, наконец, третье явление – это образование доменной структуры с малыми размерами доменов и нулевой средней намагниченностью.

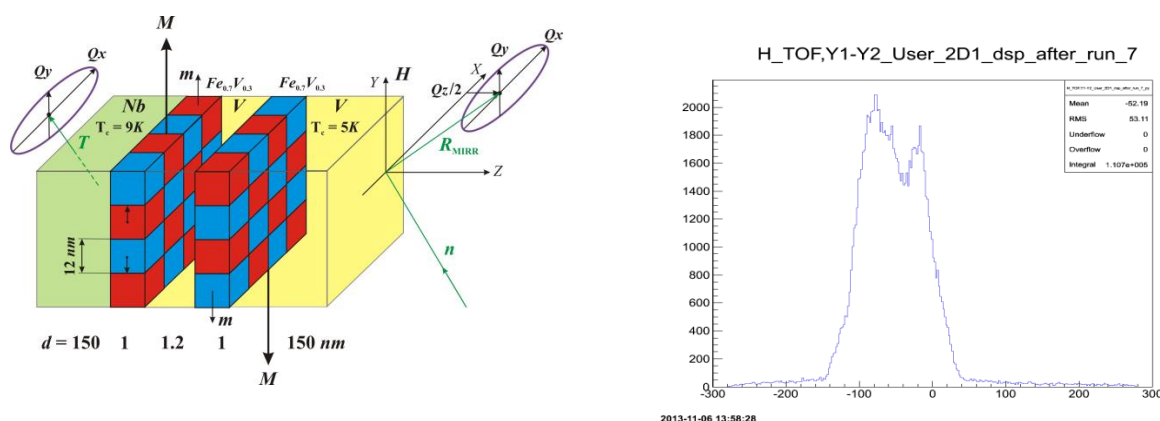


Рис. 8. Слева: схематическое представление криптоферромагнитного состояния. Справа: Зависимость от номера канала детектора в направлении по вертикали интенсивности прошедшего через образец пучка поляризованных нейтронов при длине волны $1.29 \pm 0.01 \text{ \AA}$, падающего на образец под углом скольжения 5.4 мрад. Видны пики дифракционного рассеяния нейтронов на решётке (межплоскостное расстояние 50 нм) доменов с линейным размером 12 нм.

Измерения были проведены в интервале температуры $1.3\text{-}110\text{K}$ и диапазоне напряжённости магнитного поля $30 \text{ \AA} - 9.5 \text{ кЭ}$. В диапазоне $1.3\text{-}10\text{K}$ наблюдалось рассеяние нейтронов, максимум которого находился при температуре 8K , что ниже температуры сверхпроводящего перехода в слое ниобия. Рассеяние регистрировалось по убыванию нейтронов из зеркально отражённого и преломлённого пучков и по увеличению интенсивности нейтронов при определённых углах в вертикальной плоскости (моды собственно малоуглового и малоуглового дифракционного рассеяния (рис. 8) в скользящей геометрии). Для размера магнитного домена при 8 K получено значение $d = 12\text{ нм}$. Направление магнитных моментов доменов изменялось периодически на линейных масштабах $L_1 = 43 \text{ нм}$ (масштаб антиферромагнитного упорядочения) и $L_2 = 87 \text{ нм}$. С уменьшением температуры и увеличением магнитного поля L_1 уменьшалось, а L_2 увеличивалось. В магнитном поле 2.5 кЭ , то есть, при наличии магнитной анизотропии, в структуре реализовывалось антиферромагнитное упорядочение пары ближайших к друг другу доменов ($d = 11 \text{ нм}$, $L_1 = 22 \text{ нм}$).

Полученные экспериментальные данные указывают на существование в определённом интервале температур ниже температуры сверхпроводящего перехода фазы в виде решётки доменов, в которой происходит вращение вектора намагниченности и которая существует в двух направлениях. На последнее указывает большое рассеяние, не объяснимое одним рассеянием в вертикальном направлении. Отсутствие рассеянных во втором направлении нейтронов указывает на то, что период решётки и в этом направлении находится в диапазоне меньше тысячи ангстрем.

Данные наблюдения являются первым прямым экспериментальным доказательством реализации криптоферромагнитной фазы в сверхпроводящем ферромагнетике, которое заключается в установлении антиферромагнитного упорядочения на масштабе сверхпроводящей длины когерентности (размер сверхпроводящей пары). При этом, магнитный

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

период криптоферромагнитного состояния оказался порядка 1000 раз меньше размера обычного домена в ферромагнетике (микрометры).

На спектрометре РЕМУР изучалась слоистая структура $12 \times [\text{Fe}(35\text{\AA})\text{Cr}(4.4\text{\AA})/\text{Gd}(50\text{\AA})]$, где обменное взаимодействие между РЗ и ПМ ферромагнетиками регулировалось прослойкой хрома. Установлено, что при комнатной температуре (выше температуры Кюри объемного гадолиния) в слое гадолиния есть магнитный момент в приповерхностной области вблизи межслойных границ, при этом, магнитные моменты слоёв гадолиния и железа имеют разные знаки на направление магнитного поля.

Проведено исследование ферромагнитных многослойных наноструктур типа Fe/MgO/Fe, в которых магнитные слои отделены друг от друга немагнитными прослойками. Такие наносистемы, благодаря наблюдаемому в них эффекту гигантского туннельного магнетосопротивления (ТМС), представляют большой технологический и научный интерес, так как могут использоваться в качестве элементов устройств спинтроники. Этот эффект обусловлен туннелированием электронов между слоями Fe через диэлектрическую прослойку MgO. Толщина прослойки влияет на туннелирование электронов, участвующих в обменном взаимодействии между ферромагнитными слоями и меняет магнитные свойства структуры. Изучались так называемые спиновые клапаны на основе тонкопленочной структуры MgO//Fe(200Å)/MgO(15Å)/Fe(50Å)/Ta(50Å). Для подобных систем характерно наличие особенностей в виде полочек на петле гистерезиса. Были измерены коэффициенты отражения в полях, соответствующих характерным точкам на гистерезисной кривой (рис. 9). Измерения показали хорошее качество приготовленных образцов и выявили интересное магнитное поведение, заключающееся в конкуренции зеемановского взаимодействия, межслойного обменного взаимодействия и магнитной анизотропии внутри слоев железа.

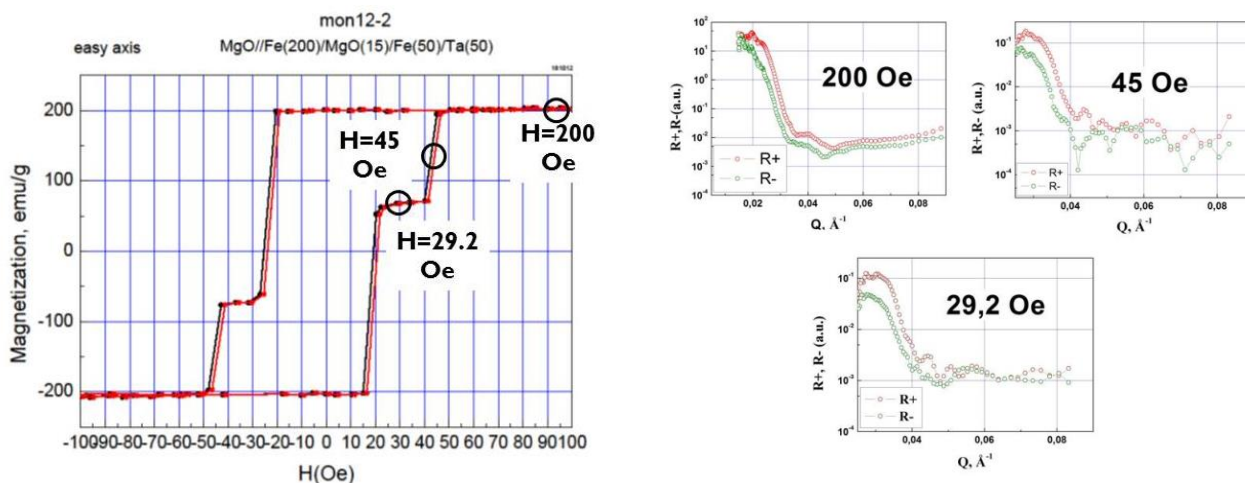


Рис. 9. Слева: Кривая намагничивания для структуры MgO//Fe(200Å)/MgO(15Å)/Fe(50Å)/Ta(50Å) при направлении внешнего магнитного поля вдоль легкой оси. Кружками обозначены точки, в которых измерялись коэффициенты отражения. Справа: коэффициенты отражения, полученные для структуры MgO//Fe(200Å)/MgO(15Å)/Fe(50Å)/Ta(50Å).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1.1.5 Исследование биологических наносистем, липидных мембран и липидных комплексов

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучен процесс спонтанного формирования фосфолипидных везикул в присутствии ионов кальция (рис. 10). Впервые детально изучено поведение межмембранного расстояния в области перехода как для мембран в жидкой, так и в гель фазе. Показано, что переход системы из связанного состояния в несвязанное в обеих фазах носит непрерывный характер, что является неординарным результатом для гель-фазы. Предшествующие теоретические работы для гель фазы указывали на то, что при добавлении ионов кальция к липидным мультислойным мембранам должен происходить резкий переход мембран из связанного в несвязанное состояние, поскольку в гель фазе отсутствуют ондуляции (мембрана более «жесткая», чем в жидкой фазе). Проведенные исследования показали, что влияние сил ондуляций на межмембранные взаимодействия имеет заметный вклад. Определены критические концентрации ионов кальция, при которых исследуемый переход происходит: в геле (0,3 мМ) и жидкой (0,4 мМ) фазах и, кроме того, непосредственно определены константы связывания ионов кальция с липидными мембранами: 22 М⁻¹ в гель и 24 М⁻¹ в жидкой фазах.

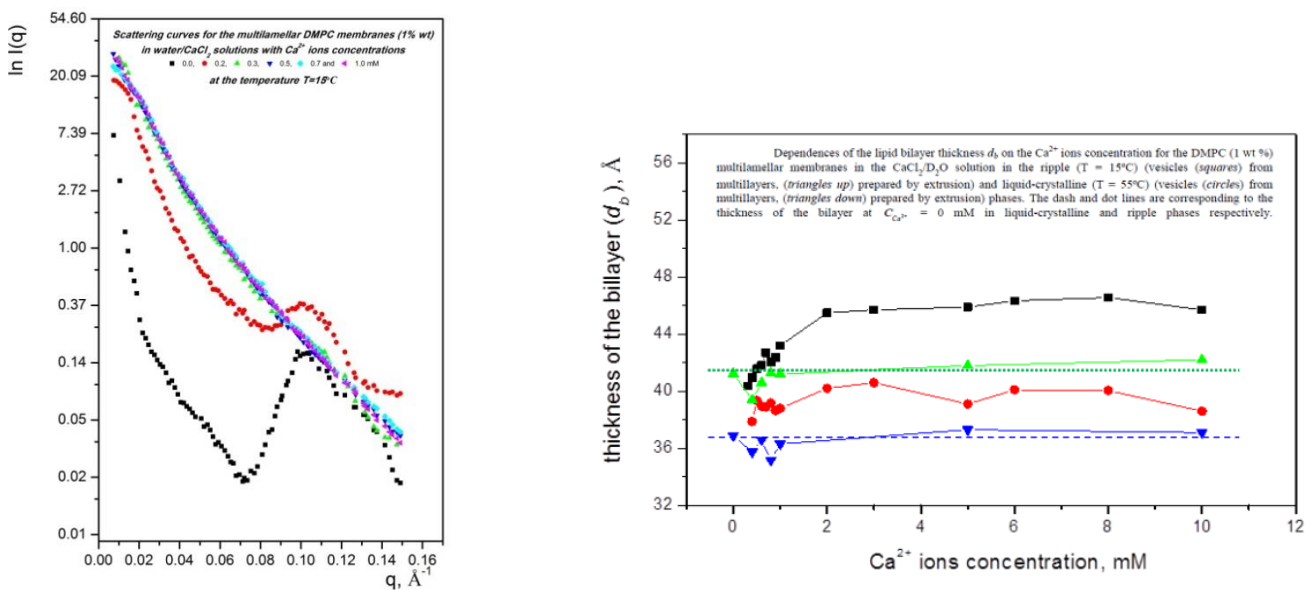


Рис. 10. Слева: кривые малоуглового рассеяния нейтронов от мультислойных мембран DMPC (1 % wt) в растворе вода/ CaCl_2 для молярных концентраций ионов Ca^{2+} 0.0, 0.2, 0.3, 0.5, 0.7 1.0 mM. Справа: концентрационные зависимости толщины бислоя в различных фазах.

Проведены исследования упаковки внутренней мембраны (кристы) митохондрий сердца крысы. Данный тип митохондрий подвергается большей нагрузке и имеет большую площадь внутренней мембраны по сравнению с митохондриями печени, исследованными ранее. В кривых рассеяния для митохондрий сердца были обнаружены дифракционные пики, которые можно связать с регулярным расположением внутренней митохондриальной мембраны (структурный параметр равен 220 \AA). Применение к митохондриям осмотического шока, а ргоіг разрушающего структуру митохондрий, приводит к исчезновению в кривых рассеяния наблюдаемых пиков. Это подтверждает связь дифракционных пиков с упаковкой внутренней мембраны. С помощью метода вариации контраста были получены кривые рассеяния

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

отдельно для белковой и липидной компонент митохондрий. Показано, что главный вклад в появление пиков делает липидный бислой. Также показано, что на организацию внутренней мембраны оказывает тоничность внешней среды и присутствие ионов кальция. Кальций и тоничность среды играют важные роли в митохондриальной и клеточной сигнализациях. Примеры кривых рассеяния приведены на

Начаты работы по разработке методики исследования структуры мембранных белков с помощью малоуглового рассеяния нейтронов. В качестве системы были выбраны растворы бицелл с встроенным в них белком бактериородопсином. На данный момент освоена методика приготовления бицелл, встраивания в них мембранного белка. С помощью малоуглового рассеяния получена информация о структуре и поведении бицелл при различных условиях: температура, концентрация, липидный состав, присутствие белка.

Начаты исследования особенностей структурного строения белков коннексина с помощью малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей на растворе различных участков коннексина. Коннексыны являются селективными каналами, играющими центральную роль в клеточной коммуникации, структурные аномалии данного белка вызывают серьезные заболевания сердца. Коннексыны имеют мембранную и водорастворимую части. Эксперименты показали, что водорастворимая часть коннексина вероятно представляет собой димер и имеет вытянутую форму. Для стабилизации раствора мембранной части коннексина используется линейный полимер. По данным малоуглового рассеяния рентгеновских лучей установлено, что полимер образует массивную «шубу» вокруг белка, что значительно затрудняет получение информации о структуре белка «вне» полимера. Применение нейтронного рассеяния и вариации контраста оказалось затруднительным, т.к. в присутствии тяжелой воды белок агрегирует.

Продолжены исследования в области модельных систем для переноса лекарств [11]. С помощью малоуглового рассеяния нейтронов и динамического рассеяния света исследованы различные агрегационные состояния в системе фосфатидилхолин-деоксихолат (DPPC/NaDC). Установлено, что в зависимости от концентрации NaDC, в данной системе образуется широкий спектр супрамолекулярных образований – эллипсоидальные везикулы (1.5 mM NaDC), лентоподобные структуры (3.5 mM NaDC), сферические смешанные мицеллы (10 mM NaDC).

1.1.1.6. Полимерные материалы

Исследованы особенности структурного строения новых полимерных композитных материалов с наночастицами железа от 10 до 100 нанометров, обладающих уникальными механическими и реологическими свойствами, методами атомной силовой микроскопии и малоуглового рассеяния нейтронов [12] (рис. 11.).

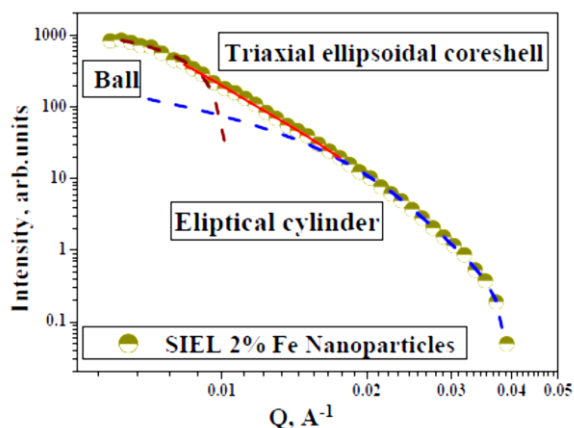


Рис. 11. Кривая малоуглового рассеяния нейтронов от нового полимерного композитного материала с наночастицами железа.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Такие материалы испытывают значительные изменения под действием магнитного поля. Так, в случае использования гомогенного магнитного поля с интенсивностью до 0.4Т модуль всестороннего сжатия изменяется в 100 раз. Под действием достаточно сильного магнитного поля образцы ведут себя как упругопластический материал.

В рамках исследования кинетики стеклования полимеров выполнено моделирование стеклования полистирола в широком диапазоне скоростей охлаждения ($10^{-4} - 2$ К/сек). Задачей исследований являлось определение лучшей модели для описания экспериментальной зависимости изобарной теплоемкости системы в интервале температур 90-130°C. В качестве базовых подходов для описания стеклования полимеров использовались метод Тула-Нарайанасвами и подход Шмельцера-Гутзова с различными выражениями для времени релаксации системы к равновесию. Показано, что для всех существующих подходов необходимо сильное изменение параметров моделирования (как минимум, параметра неэкспоненциальности β) для различных скоростей охлаждения. Показано, что метод Шмельцера-Гутзова с оригинальным выражением для времени релаксации системы τ позволяет не менее качественно описывать экспериментальные данные по дифференциальной сканирующей калориметрии [13].

1.1.1.7. Атомная и молекулярная динамика

Проведено экспериментальное и теоретическое исследование молекулярной динамики и структурного строения производных соединений алкилкумарина – гексафлюорофосфата (ESP-PF6) и тосилата (ESP-TOS) (рис. 12). Экспериментальные исследования проводились с помощью спектроскопии инфракрасного поглощения, рамановского рассеяния, неупругого рассеяния нейтронов и терагерцового излучения.

Для теоретического моделирования молекулярной динамики использовалось приближение функционала плотности и использовались программные пакеты CASTEP и GAUSSIAN09. Получено хорошее согласие экспериментальных данных с результатами теоретического моделирования.

Проведено исследование атомной динамики жидкого галлия при высоких температурах методом неупругого рассеяния нейтронов. Из экспериментальных дважды-дифференциальных сечений рассеяния жидкого галлия, полученных при температурах 313, 433, 553 и 673 К, выделена квазиупругая часть, включая как когерентную, так и некогерентную компоненты. В случае когерентного рассеяния был выполнен анализ спектров в области передач волнового вектора Q , прилежащей к главному максимуму структурного фактора ($Q \sim Q_0$). При этом использовалась модифицированная модель жидкости твердых сфер и получена температурная зависимость коэффициента самодиффузии жидкого галлия в области 313 – 673 К. В случае некогерентного рассеяния квазиупругие данные анализировались в более широком интервале передач волнового вектора Q и полученные результаты удалось описать моделью простой диффузии.

Результаты двух методов анализа, как по величине коэффициента диффузии, так и его температурной зависимости хорошо согласуются между собой и примерно описываются аррениусовским законом с постоянной энергией активации ~ 6 Кдж/моль

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

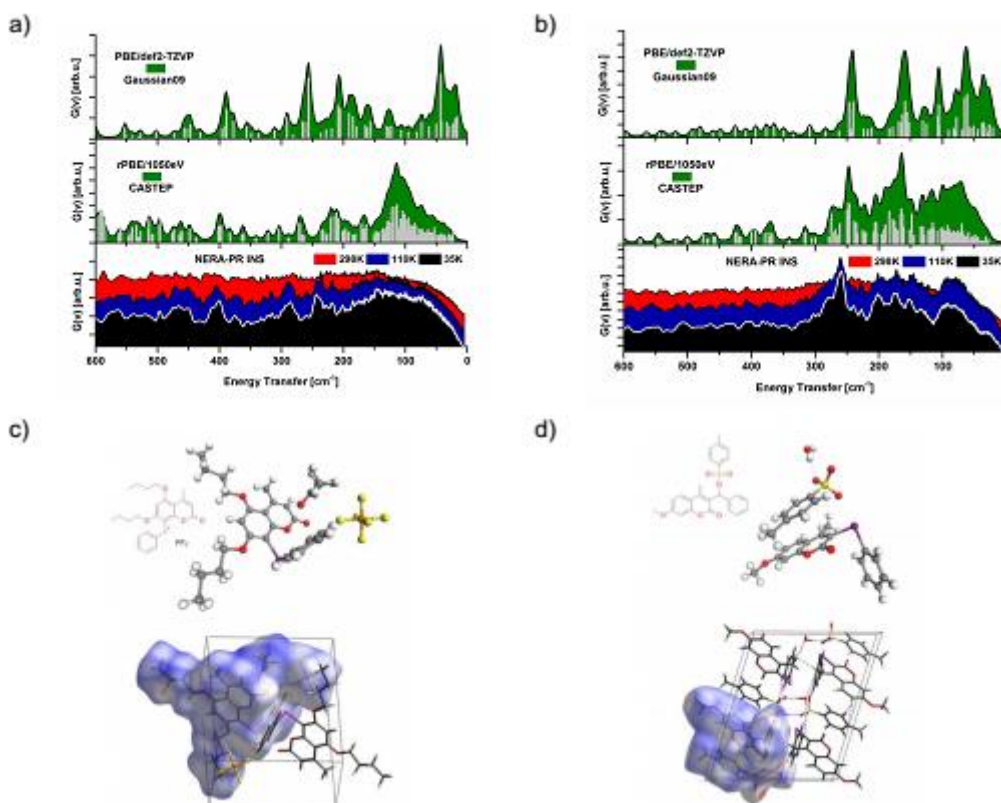


Рис. 12. Спектры неупругого рассеяния нейтронов, результаты их теоретического моделирования в рамках различных приближений и кристаллическая структура ESP-PF6 (a) и ESP-TOS (b).

Из анализа формы пиков когерентного и некогерентного квазиупругого рассеяния также установлено, что распад флуктуаций плотности ближайшего окружения протекает в жидком галлии по простому экспоненциальному закону.

1.1.1.8. Прикладные работы

К прикладным работам в отделе НЭО НИКС ЛНФ традиционно относятся экспериментальные исследования текстуры горных пород и минералов, внутренних напряжений в них и определение внутренних напряжений в объемных материалах и изделиях, включая инженерные материалы и детали машин и устройств. В основном, эти исследования ведутся с помощью дифракции нейтронов.

Одной из важных проблем современной ядерной энергетики является контроль состояния металла реакторного корпуса в течение всего срока его службы и гарантия целостности корпуса реактора при нормальных условиях эксплуатации, а также при любых проектных авариях. При эксплуатации ядерных установок важным источником информации об изменении свойств корпусных сталей, которые ухудшаются под воздействием нейтронного облучения, служит программа образцов-свидетелей, которые располагаются у внутренней стенки шахты реактора. Для увеличения количества облучаемых образцов корпусной стали реактора при подтверждении его проектного срока эксплуатации или при его продлении используется технология реконструкции образцов-свидетелей после их механических испытаний с помощью различных видов сварки (электродуговой, электронно-лучевой, лазерной и т.д.). При этом необходимо контролировать уровень остаточных напряжений после сварки в реконструированных образцах-свидетелях.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

На дифрактометре ФСД проведены эксперименты по изучению распределения остаточных напряжений в образцах-свидетелях, возникающих после электронно-лучевой (electron beam welding - EBW) и лазерной (laser beam welding - LBW) сварки. Результаты экспериментов (рис. 13) показали, что уровень остаточных напряжений для образца LBW значительно выше, чем для образца EBW, и достигает величины 550 МПа в районе сварного шва. Это подтверждает хорошо известный факт, что среди всех методов сварка электронным лучом дает наименьший уровень остаточных напряжений в сварных швах. По всей видимости, это обусловлено малым количеством вводимой теплоты при данном сварочном процессе (в 4-5 раз меньше, чем, например, при дуговой), в результате чего резко снижается деформация конечного изделия. Кроме того, по уширению дифракционных пиков был оценен уровень остаточных микродеформаций, который непосредственно характеризует плотность дислокаций в исследуемом материале. В образце EBW микродеформация достигает $3.5 \cdot 10^{-3}$, а для образца LBW несколько выше - $4.5 \cdot 10^{-3}$. Данный эффект сопровождается значительным (~2.5 раза) увеличением микротвердости в зоне сварных швов. По всей видимости, наблюдаемое увеличение микротвердости является результатом формирования мартенситной (или мартенситно-бейнитной) структуры в области сварного шва и ЗТВ.

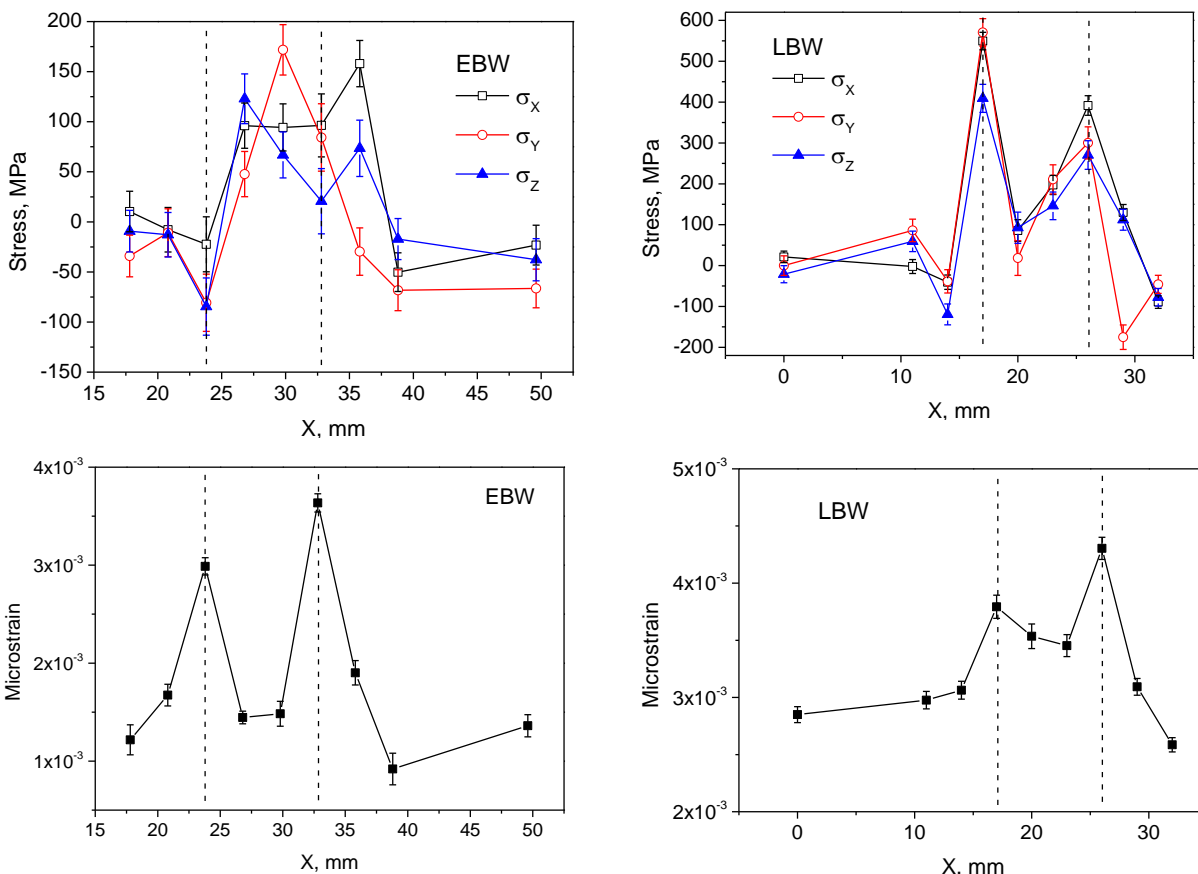
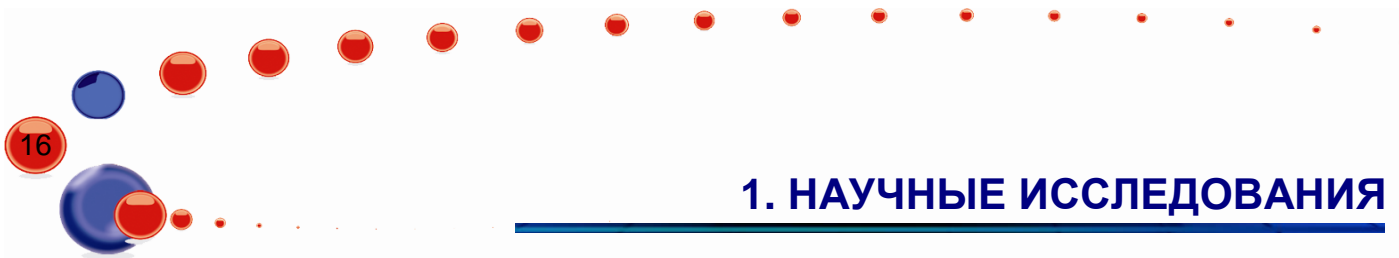


Рис. 13. Распределение остаточных напряжений (вверху) и микродеформаций (внизу) в образцах, восстановленных методом электронно-лучевой (EBW) и лазерной (LBW) сварки.



1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

На дифрактометре Эпсилон проведено исследование остаточных напряжений образцов горных пород на основе кальцита, обусловленных присутствием в них магнитного пиротита. Определено распределение внутренних напряжений в фазе кальцита в зависимости от угла вращения образца в плоскости XY вокруг оси Z.

Проведено исследование текстуры ряда образцов из феррито-перлитной стали, цель которого заключается в изучении влияния обработки, химического состава, текстуры на прочностные свойства колес железнодорожных вагонов, изготовленных из этой стали. На основе измерения полюсных фигур (200), (110), (211) для α -Fe, проведенных на дифрактометре СКАТ, сделан вывод о том, что термообработка разрушает текстуру. Введение примесей в сплав приводит к переориентации слабой преимущественной ориентировки.

Проведены эксперименты по исследованию термических внутренних напряжений, возникающих при сезонных колебаниях температуры в мраморных плитах [15].

1.1.2. Методические результаты

Проведены работы по созданию и тестированию устройств окружения образца нового дифрактометра ДН-6. Завершены работы по созданию криостата для экспериментов с камерами высокого давления и проведено его тестирование. Приобретены камеры высокого давления с алмазными наковальнями с рабочим диапазоном до 15 ГПа (площадка 0.8 мм) и 50 ГПа (площадка 0.5 мм), первые эксперименты показали возможность их успешного применения для экспериментов на ДН-6. Разработана усовершенствованная детекторная система для регистрации спектров при угле рассеяния 90° на основе 96 отдельных газовых счетчиков, последующее создание которой позволит повысить светосилу установки в 3-4 раза.

Проведен запуск первой стадии рефлектометра ГРЭИНС. Измерены и оптимизированы профили пучка при различных конфигурациях элементов рефлектометра. Проведена экспериментальная оценка интегрального потока тепловых неполяризованных нейтронов (длина волны свыше 0.05 нм) после отклоняющего зеркала при тепловом ($2 \times 10^6 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$) и холодном ($1 \times 10^6 \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$) режимах работы замедлителя. Проведена оптимизация времяпролетных спектров по фону быстрых нейтронов. Получены первые кривые отражения на стандартных системах при двух режимах работы замедлителя (рис. 14).

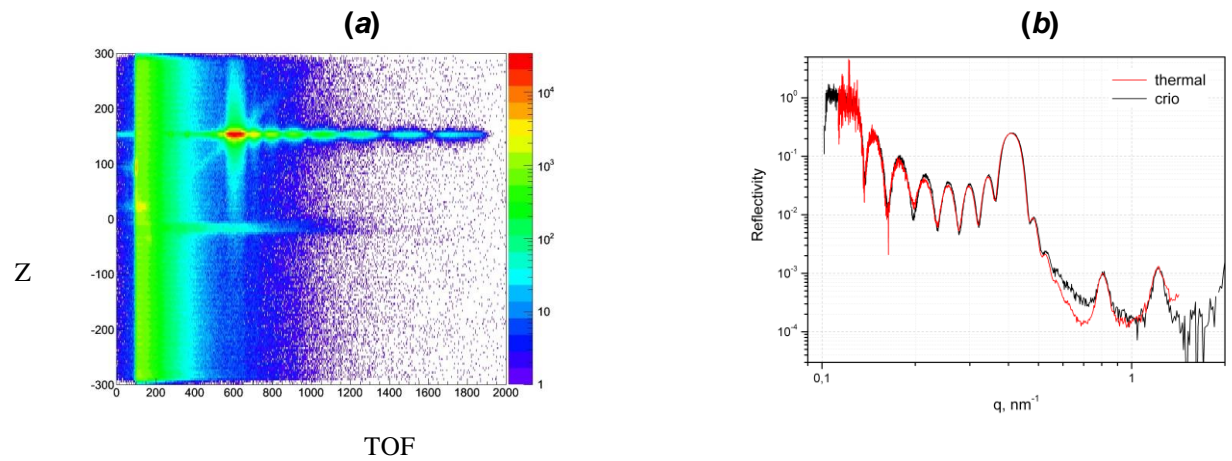


Рис.14. (а) 2D спектр отраженного пучка неполяризованных нейтронов на слоистой структуре [Ni(8.4nm)Ti(7nm)] \times 8/Floatglass (производитель MIRROTRON, Венгрия), полученный на рефлектометре GRAINS при криогенном режиме работы замедлителя в координатах Z (ширина канала 0.35 мм) – время пролета (ширина канала 32 мкс). (б) Коэффициент зеркального отражения как функция переданного импульса для той же системы, измеренный в тепловом (thermal) и криогенном (crio) режимах работы замедлителя.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

В рамках наладки рефлектометра проведен первый эксперимент по изучению влияния оксидации на структуру тонкой титановой пленки на стеклянной подложке, выполненный в рамках разработки новых покрытий для нейтроннооптических устройств.

Продолжались работы по реализации проекта по созданию нового дифрактометра на ба канале для нейтронографических исследований переходных процессов в реальном времени. Подготовлены рабочие чертежи на изготовление фоновой защиты детекторной системы. Изготовлена и установлена диафрагма нейтронного пучка с регулируемым окном, с линейным перемещением по горизонтальной и вертикальной оси и креплением на выходном фланце нейтронновода RTD.

Продолжены работы по созданию макетного варианта спектрометра радиографии на канале 14 (рис. 15).

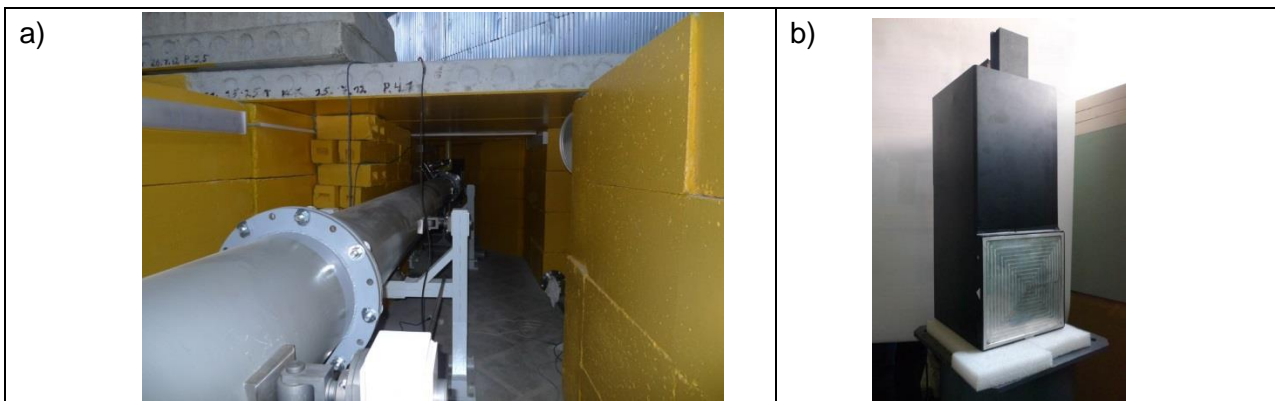


Рис. 15. Вакуумная коллимационная система (а) и система регистрации изображений на основе CCD камеры (b).

Изготовлена и установлена на пучке вакуумная коллимационная система. Изготовлена и протестирована на 12 канале система регистрации изображений на основе CCD камеры. Продолжены работы по созданию биологической защиты канала. Проведено тестовое открывание шибера, во время которого произведена оценка нейтронного потока в положении образца, которая составила $5 \cdot 10^6$ н/см²/с.

На дифрактометре ДН-12 совместно с НЭО КС проведена замена детекторных счетчиков, электроники и системы накопления данных. Использование новых детекторов позволило повысить светосилу установки на 30 %.

После долгого перерыва в отделе НЭОКС продолжено создание модулей детектора АСТРА для ФСД на основе сцинтиллятора ZnS. Совместно с сотрудниками НЭОКС новый сцинтилляционный модуль детектора АСТРА установлен и проверен в работе в режиме низкого разрешения на ФСД. В ближайшее время данный модуль будет тестироваться в режиме высокого разрешения. На дифрактометре ФСД продолжены испытания «List Mode»-анализатора для накопления «сырых» данных в списочном режиме. В настоящее время продолжаются работы по разработке и совершенствованию сложных алгоритмов для восстановления спектров высокого разрешения.

На спектрометре ЮМО совместно с НЭО КС проведена замена электроники сбора данных с 3 детекторов (2 – кольцевые пропорциональные гелий-3 детекторы и детектор прямого пучка), проведена проверка состояния газовой смеси детекторов, заменены предусилители на кольцевых детекторах, установлена новая накопительная электроника,

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

проложены новые кабели от управляющей электроники к детекторам, включая вакуумные разъемы (более километра кабеля). Создан электронный журнал и база данных по экспериментам. Проведена работа по обновлению программного обеспечения, включающего развитие программ SONIX и SAS.

На дифрактометрах СКАТ и Эпсилон определены технические параметры после модернизации. Величины нейтронного потока в положении образца, определенные с использованием урановых камер деления, составили $1.7 \cdot 10^6$ н/см²/с для Эпсилон и $6.8 \cdot 10^5$ н/см²/с для СКАТ. Измерены профили нейтронных пучков, уточнена функция разрешения СКАТ.

Для исследований Li-ion аккумуляторов в дифракционном эксперименте в режиме реального времени разработаны специальные модельные электрохимические ячейки и температурная приставка (рис. 16), которые позволят создать на объемном образце температуры от -100 до 100 °С (экстремальные температуры эксплуатации аккумуляторов).

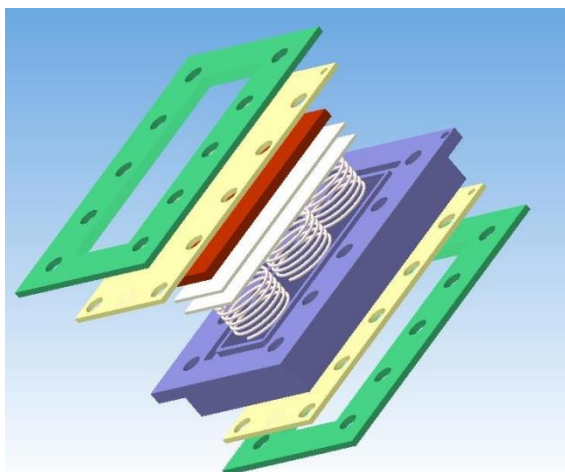


Рис. 16. Слева: 3D модель новой электрохимической ячейки для тестирования электродных материалов. Зеленым цветом обозначена рама из нержавеющей стали, желтым – экраны-токосборники из ванадия, красным цветом – электродные материалы (катод и анод) вместе с сепаратором и электролитом, серым – второй токосборник из ванадия, нитрид бора и пружины, синий – фторопластовый каркас. Справа: Устройство для создания особых температурных условий на аккумуляторах в сборе.

На рефлектометре РЕМУР испытана мода малоуглового рассеяния в скользящей геометрии в режиме плановых измерений с ферромагнитно-сверхпроводящим образцом. Проведена замена двигателей в приводах спектрометра. В основном запущено новое программное обеспечение для работы с двумерным позиционно-чувствительным детектором, которое обеспечивает накопление информации в четырех поляризационных режимах работы. Продолжаются работы по созданию анализатора поляризации с сечением 16см×18см.

На рефлектометре РЕФЛЕКС продолжены исследования отражательных свойств тонкопленочных многослойных структур, изготовленных по специальному алгоритму, предложенному В.К. Игнатовичем (рис. 17) [14].

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

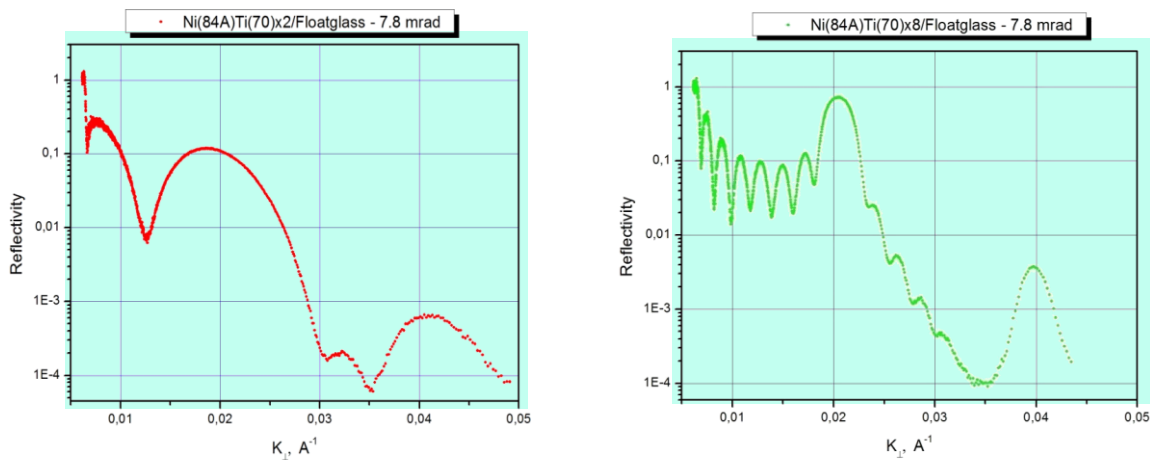


Рис. 17. Коэффициенты отражения от периодических структур, образованных бислоями Ni-Ti. Рисунок снизу поясняет принцип формирования высокого коэффициента отражения в широком интервале переданных импульсов: группы бислоев с разными периодами формируют брэгговские пики в обратном пространстве; периоды бислоев подбираются таким образом, чтобы пики перекрывались друг с другом, формируя, таким образом, протяженную область с высоким коэффициентом отражения.

Его идея заключается в использовании свойств определенных периодических тонкопленочных структур для создания нейтронных зеркал с высоким коэффициентом отражения в определенной области переданного импульса. Каждый период структуры состоит из бислоя, который образуют слой с положительной плотностью длины рассеяния и последующий слой с отрицательной плотностью длины рассеяния. Коэффициент отражения от подобной периодической структуры имеет особенность в виде брэгговского пика, высота и ширина которого будут определяться конкретными значениями плотностей длины рассеяния, толщин слоев и количества периодов. Такой подход является альтернативой к широко используемой методике создания подобных зеркал с аperiodической структурой методом магнетронного напыления. В технологии создания аperiodических нейтронных зеркал нет четких научных основ изготовления, методика обрабатывается методом проб и ошибок. Это делает существующий способ производства в определенной степени ненадежным, с большим выходом брака и длительными отладками оборудования. Наличие технологии, опирающейся на четкий математический алгоритм построения структуры нейтронного зеркала, может упростить процесс их создания и повысить их качество. Заказчиками нейтронных зеркал с высоким критическим углом полного отражения являются нейтронные центры, использующие для формирования пучков нейтронов нейтроноводы, основным элементом которых и являются рассматриваемые нейтронные зеркала. Образцы для исследований были изготовлены фирмой Mirrotron Ltd, Budapest.

Разработана методика расчета поведения вектора поляризации пучка нейтронов при прохождении произвольной пространственной конфигурации магнитных полей. Данный метод позволяет с большой точностью оценить потери величины вектора поляризации при прохождении любого элемента конструкции спектрометра, создающего магнитные поля и на основе этого проводить оптимизацию установки. С помощью программного пакета MagNet были рассчитаны трехмерные распределения магнитных полей от отдельных элементов, используемых на спектрометре с поляризованными нейтронами РЕФЛЕКС на 9-м канале реактора ИБР-2. Далее, полученные распределения полей использовались программным пакетом VITESS для моделирования прохождения вектора поляризации.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Проведено исследование волноводной слоистой структуры $\text{CuNi}(15 \text{ nm})/\text{TbCo}_5(150 \text{ nm})/\text{CuNi}(50 \text{ nm})//\text{Si}(\text{substrate})$. Здесь $\text{Cu}(33 \text{ at.}\%)\text{Ni}(67 \text{ at.}\%)$ является немагнитным, а TbCo_5 слабомагнитным (намагниченность насыщения 500 Гс) слоем при комнатной температуре. Установлено, что по измерению интенсивности поляризованного микропучка нейтронов, выходящего из торца волноводного слоя такой структуры, можно регистрировать изменения намагниченности порядка 10 Гс. Таким образом, поляризованный микропучок нейтронов можно использовать как более чувствительный метод исследования слабомагнитных слоёв, чем обычная нейтронная рефлектометрия, для которой порог чувствительности имеет порядок 1000 Гс

Литература

1. D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, E.V.Lukin, N.T.Dang, L.S.Dubrovinsky, E.A.Bykova, K.V.Kamenev, H.-P.Liermann, W.Morgenroth, A.Ya.Shapiro, and B. N. Savenko "Effect of high pressure on the crystal structure, magnetic, and vibrational properties of multiferroic $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ ", *Phys. Rev. B*, v. 87, pp. 014112-1-6 (2013).
2. А.М. Балагуров, И.А. Бобриков, М.С. Мащенко, Д. Сангаа, В.Г. Симкин "Структурный фазовый переход в шпинели CuFe_2O_4 ", *Кристаллография*, т. 58 (5), с. 696-703 (2013).
3. И.А. Бобриков, А.М. Балагуров "Исследование Li-ионных аккумуляторов в реальном времени с помощью нейтронной дифракции", *Новости ОИЯИ*, № 3, с. 19 (2013).
4. E.Burzo, P.Vlaic, D.P.Kozlenko, S.E.Kichanov, N.T.Dang, E.V.Lukin, B.N.Savenko "Magnetic properties of TbCo_2 compound at high pressures", *Journal of Alloys and Compounds*, v. 551, pp. 702-710 (2013).
5. M.V.Avdeev "Particle interaction in polydisperse magnetic fluids: Experimental aspects of small-angle neutron scattering applications", *Journal of Molecular Liquids* (2013), in press.
6. R.A.Eremin, Kh.Kholmurodov, V.I.Petrenko, L.Rosta, M.V.Avdeev. Effect of the solute--solvent interface on small-angle neutron scattering from organic solutions of short alkyl chain molecules as revealed by molecular dynamics simulation. *J. Appl. Cryst.* v. 46, p. 372-378 (2013).
7. И.В.Гапон, В.И.Петренко, М.В.Авдеев, Л.А.Булавин, Ю.Н.Хайдуков, О.Солтведель, В.Зависова, П.Копчански, Учет диффузного рассеяния при анализе зеркального отражения нейтронов на границе раздела магнитная жидкость-кремний, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* (2013), принята в печать.
8. V.I.Petrenko, L.A.Bulavin, M.V.Avdeev, V.M.Garamus, M.Koneracka, P.Kopcansky. Structure and interaction of poly(ethylene glycol) in aqueous solutions. Small-angle neutron scattering data. *Macromol. Symposia* (2013), accepted.
9. M.V.Avdeev, Aksenov V.L., Tomchuk O.V., Bulavin L.A., Garamus V.M., Osawa E., The spatial diamond-graphite transition in detonation nanodiamond as revealed by small-angle neutron scattering, *Journal of Physics: Condensed Matter* 25 (2013) P. 445001 (7pp).
10. Е.А.Кизима, Томчук А.А., Булавин Л.А., Петренко В.И., Алмаши Л., Коробов М.В., Волков Д.С., Кошлань И.В., Кошлань Н.А., Блаха П., Авдеев М.В., Структура и токсичность водных растворов фуллерена C_{60} , *Поверхность. Рентген. Синхротрон. Нейтрон. Исслед.* 2013, принята в печать.
11. M.A. Kiselev, M. Janich, A. Hildebrand, P. Strunz, R.H.H. Neubert, D. Lombardo "Structural transition in aqueous lipid/bile salt [DPPC/NaDC] supramolecular aggregates: SANS and DLS study", *Chem. Phys.* v. 424, p. 93-99 (2013).
12. G. E. Iacobescu, M. Balasoiu, I. Bica "Investigation of magnetorheological elastomer surface properties by atomic force microscopy", *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, v. 26, p. 785-792 (2013).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

13. J.W.P. Schmelzer, T.V. Tropin "Dependence of the width of the glass transition interval on cooling and heating rates", J. Chem. Phys., v. 138, p. 034507 (11pp) (2013).
14. T. Veres, L. Cser, V. Bodnarchuck, V. Ignatovich, Z.E. Horváth, B. Nagy "Investigation of periodic Ni-Ti multilayers", Thin Solid Films, v. 540, p. 69-72 (2013).
15. V.V. Luzin, Nikolayev D.I., Siegizmund S. Temperature Induced Internal Stress in Marble, Proc. of the 7th international conference on mechanical stress evaluation by neutron and synchrotron radiation, 10-12 September 2013, Sydney, Australia (in press).