

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

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-2. 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.

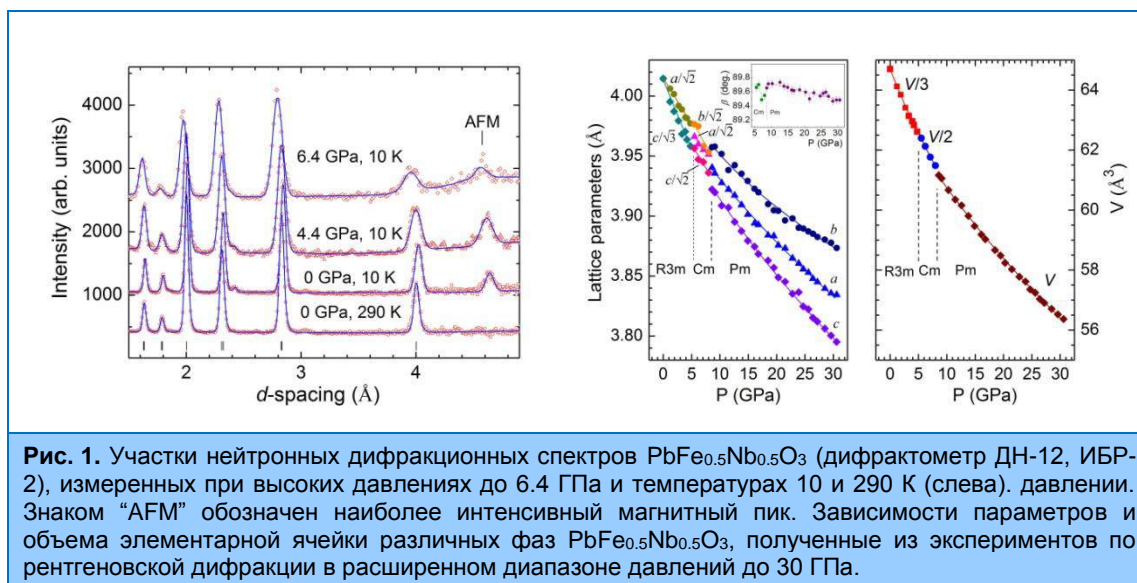
I. Научные результаты

Структурные исследования новых оксидных и наноструктурированных материалов.

Проведено исследование кристаллической, магнитной структуры и колебательных спектров мультиферроика-релаксора $PbFe_{0.5}Nb_{0.5}O_3$ методами нейтронной дифракции, рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии в диапазоне высоких давлений 0 – 30 ГПа и температур 10 – 300 К, [1] (рис. 1). С повышением давления в данном соединении

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

наблюдалось два последовательных структурных фазовых перехода из исходной полярной ромбоэдрической фазы R3m в полярные моноклинные фазы Cm и Pm при $P = 5.5$ и 8.5 ГПа, соответственно. Антиферромагнитное упорядочение G-типа остается стабильным в исследуемом диапазоне давлений и температура Нееля возрастает с барическим коэффициентом $(1/T_N)dT_N/dP = 0.012 \text{ GPa}^{-1}$. Существование полярных фаз высокого давления в сочетании с магнитным упорядочением, характеризующимся ростом T_N в $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ предполагает стабильность магнитоэлектрического эффекта и является уникальным явлением, резко контрастирующим с общей тенденцией к подавлению полярных фаз и/или магнитоэлектрической связи в большинстве обычных оксидных мультиферроиков при воздействии давления.



Проведено исследование атомной и магнитной структуры интерметаллидов кобальта RCO_2 с помощью дифракции нейтронов в диапазоне высоких давлений 0 – 4 ГПа и температуры 10 – 300 К [2, 3]. Данные соединения на протяжении многих лет рассматривались как модельные системы, демонстрирующие явление зонного электронного метамагнетизма (ЗЭМ). Данное явление заключается в появлении намагниченности подрешетки переходного металла как отклика на воздействие магнитного поля подрешетки редкоземельного металла в интерметаллидах. В ходе экспериментов установлено, что концепция ЗЭМ справедлива для соединений с достаточно высокими температурами магнитного упорядочения $T_C \sim 150\text{-}200$ К ($R = \text{Tb, Ho}$), но она не может описать магнитные свойства соединений с небольшими значениями $T_C \sim 30\text{-}40$ К. На примере ErCo_2 показано несогласованное поведение намагниченностей Er и Co подрешеток и подавление магнетизма Co подрешетки при стабильных магнитных свойствах Er подрешетки под давлением (**рис. 2**). Полученные результаты в сочетании с теоретическими расчетами указывают на необходимость уточнения концепции ЗЭМ с учетом особенностей электронной структуры соединений RCO_2 .

Проведены исследования особенностей структурного строения перспективных высоковольтных катодных материалов на основе $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4 - \text{LiNi}_{0.5-x}\text{Mn}_{1.5-y}\text{M}_{x+y}\text{O}_4$ ($M = \text{Co, Cr, Ti, Al, Mg; } x+y=0.05$), синтезированных в Институте химии и механохимии Сибирского отделения РАН (г. Новосибирск) с целью улучшения электрохимических свойств. Незамещенный $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ характеризуется высоким потенциалом (4.7 В), соответствующим плоскому плато на зарядно-разрядной характеристике при средней емкости 120 mAh/g, что

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

значительно увеличивает удельную запасенную энергию аккумулятора по сравнению с другими материалами ($\text{LiCoO}_2 \sim 3.8$ В, $\text{LiFePO}_4 \sim 3.2$ В при аналогичной емкости).

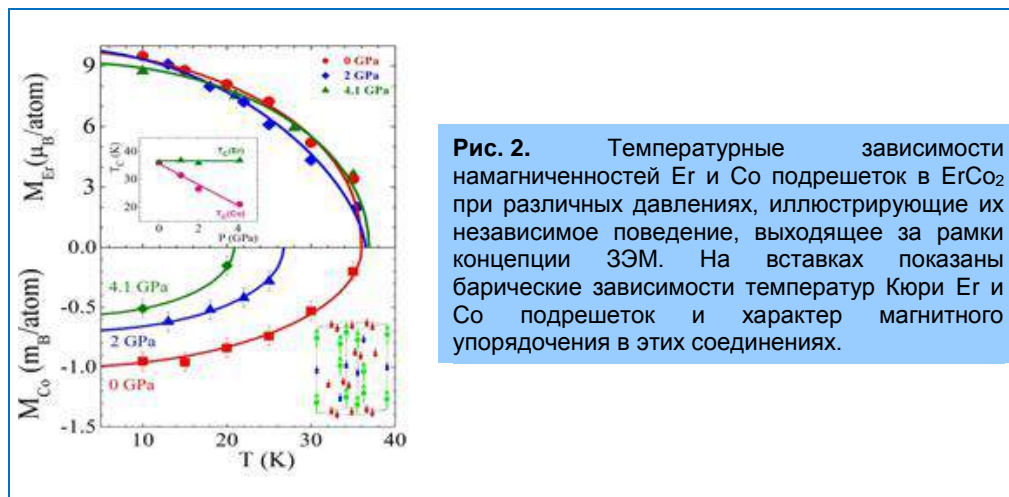


Рис. 2. Температурные зависимости намагниченностей Eg и Co подрешеток в EgCo_2 при различных давлениях, иллюстрирующие их независимое поведение, выходящее за рамки концепции ЗЭМ. На вставках показаны барические зависимости температур Кюри Eg и Co подрешеток и характер магнитного упорядочения в этих соединениях.

В зависимости от методики синтеза $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ может иметь либо примитивную кубическую структуру симметрии $P4_332$ с упорядоченным расположением катионов (при этом температура синтеза не должна превышать 700°C) либо гранецентрированную кубическую структуру симметрии $Fd-3m$ и разупорядоченным расположением катионов (формируется при температурах более 800°C). Из-за структурных трансформаций во время циклирования соединения $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ с пространственной группой $P4_332$ показывает худшее электрохимическое поведение, чем $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ со структурой $Fd-3m$. Образцы для исследования были синтезированы при $T < 800^\circ\text{C}$ с помощью малого замещения катионов Ni и Mn на другие переходные металлы и процедуры механоактивации смеси реагентов в планетарной мельнице. В результате обработки полученных нейтронных дифракционных спектров с помощью метода Ритвельда выяснилось, что все исследованные образцы имеют двухфазную структуру, где основной является фаза пр. гр. $Fd-3m$, дополнительная фаза с пр. гр. $P4_332$ составляет от 1 до 20% в зависимости от добавляемого металла и температуры синтеза. Было обнаружено, что ионы добавляемого металла преимущественно замещают позицию Ni, что в свою очередь вызывает выпадение примесной фазы NiO в небольшом количестве (1-2%). Средний размер блоков составил 70-80 нм для образцов, синтезированных при 700°C , и 100-150 нм для образцов, синтезированных при 800°C . Большие микродеформации обнаружены, как и ожидалось, наоборот больше в образцах с меньшей температурой синтеза.

Исследования магнитных жидкостей и наночастиц.

Продолжено исследование влияния загрузки магнитных наночастиц на структуру белковой оболочки магнитоферритина (синтетический биологический комплекс апоферритина с различным содержанием магнитного материала в белковой полости) в широком диапазоне фактора загрузки LF (число атомов железа на комплекс) магнитного материала [4,5]. Увеличение магнитной загрузки до $LF=910$ приводит к нарушению стабильности растворов и частичному выпадению раствора в осадок. При этом сигнал малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) от надосадочного раствора имеет вид, характерный для чистого апоферритина (рис.3а). Результаты экспериментов по вариации контраста (рис.3б) показали смещение с ростом LF эффективной точки компенсации комплекса и увеличение в ней остаточного рассеяния, что связано с увеличением структурной полидисперсности системы. Как результат, наблюдается существенно большая (в сравнении с расчетным) относительная

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

доля магнитного материала в комплексе, которая растет с ростом загрузочного фактора, что указывает на частичное разрушение оболочки апоферритина. Работа выполнялась в сотрудничестве с Институтом экспериментальной физики Словацкой Академии Наук (Кошице, Словакия) и Физическим факультетом Киевского Национального Университета им. Тараса Шевченко (Киев, Украина).

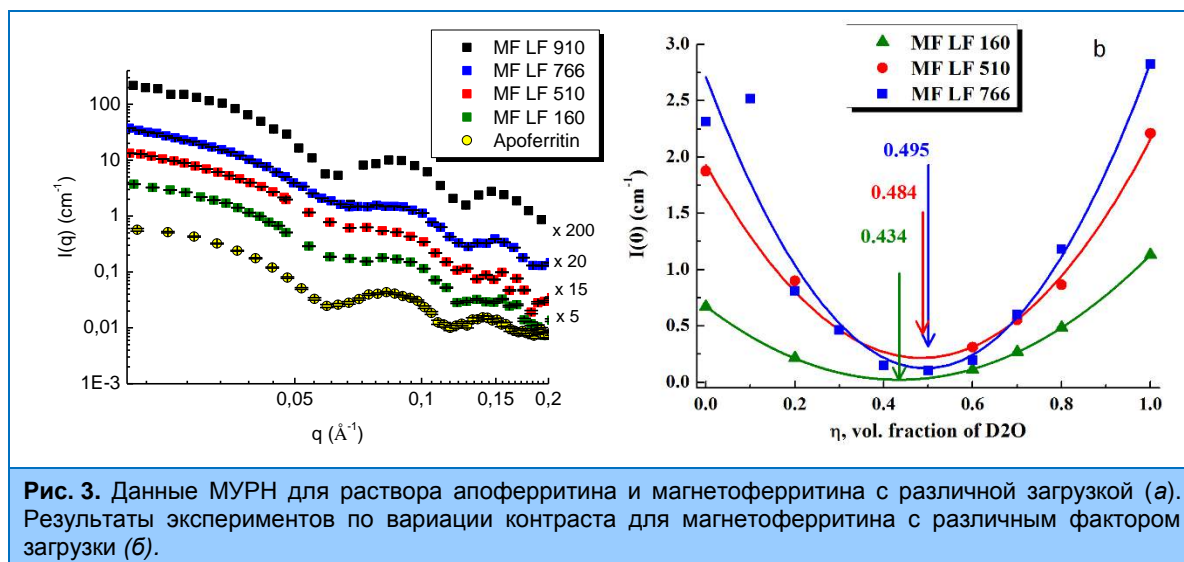


Рис. 3. Данные МУРН для раствора апоферритина и магнетоферритина с различной загрузкой (а). Результаты экспериментов по вариации контраста для магнетоферритина с различным фактором загрузки (б).

В рамках комплексного исследования влияния наночастиц на биологические макромолекулы в растворах проведен анализ данных малоуглового рассеяния синхротронного излучения (МУРР) для смесей фибриллярных амилоидных агрегатов белка лизоцим (яичный белок) с магнетоферритином. Из экспериментов по МУРР (рис. 4) и флюоресценции было выявлено, что добавление магнетоферритина в амилоидные растворы лизоцима приводит к уменьшению амилоидной агрегации белков [6]. Найденные из данных МУРР функции распределения по парным расстояниям (рис. 4) строго указывают на уменьшение размера амилоидных агрегатов в смеси с магнетоферритиновым комплексом. Получено, что эффект более выражен для больших загрузок магнитного материала. Работа выполнялась в сотрудничестве с Институтом экспериментальной физики Словацкой Академии Наук (Кошице, Словакия), Гельмогольц-центром Геестхахта (Геестхахт, Германия) и Физическим факультетом Киевского Национального Университета им. Тараса Шевченко (Киев, Украина).

В рамках изучения обнаруженного ранее эффекта реорганизации магнитных наночастиц при добавлении биосовместимого полимера полиэтиленгликоль (ПЭГ) в водные магнитные жидкости, стабилизированные олеатом натрия, проведено детальное изучение водных мицеллярных растворов олеата натрия и их смесей с ПЭГ. Данные МУРН обнаруживают изменения структуры и взаимодействия между мицеллами олеата натрия при добавлении ПЭГ. Показано, что структурные свойства чистых водных растворов олеата натрия соответствует типичному поведению мицелл с зарядом и характеризуется переходом от сферических к цилиндрическим мицеллам при 2% содержании олеата натрия в системе. Получены структурные параметры мицелл и параметры взаимодействия в мицеллярных растворах олеата натрия без и с добавлением ПЭГ в систему. При малых добавках ПЭГ (порядка 2%) обнаружено уменьшение агрегационного числа мицелл и изменение степени роста числа агрегации от концентрации поверхностно-активного вещества в растворе.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

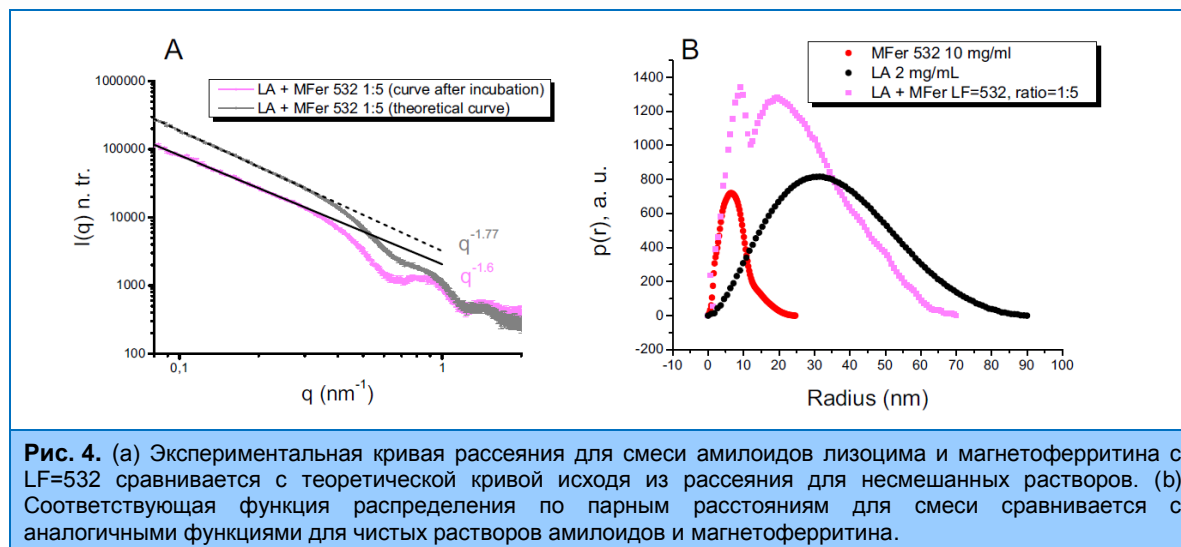


Рис. 4. (а) Экспериментальная кривая рассеяния для смеси амилоидов лизоцима и магнетоферритина с LF=532 сравнивается с теоретической кривой исходя из рассеяния для несмешанных растворов. (б) Соответствующая функция распределения по парным расстояниям для смеси сравнивается с аналогичными функциями для чистых растворов амилоидов и магнетоферритина.

При большом содержании ПЭГ (около 10%) проявляется экранировка межмицеллярного взаимодействия в системе, что объясняется эффективным покрытием поверхности мицелл полимером [7]. Работа выполнялась в сотрудничестве с Гельмогольц-центром Геестххта (Геестххт, Германия), Институтом экспериментальной физики Словацкой Академии Наук (Кошице, Словакия) и Физическим факультетом Киевского Национального Университета им. Тараса Шевченко (Киев, Украина)

Исследование углеродных наноматериалов.

В рамках развития синтеза биоактивных производных фуллеренов проведены комплексные исследования (атомно-силовая микроскопия (АСМ), малоугловое рассеяние нейтронов и инфракрасная спектроскопия) водных коллоидных растворов фуллерена C₆₀, полученных с помощью различных методик. Показано, что наряду с мономерами C₆₀ (размер порядка 0.7 нм) в растворах присутствуют сферические агрегаты с размерами в широком диапазоне 2-50 нм. Из анализа данных МУРН (рис. 5) получены размерные характеристики (радиус инерции и максимальный размер) агрегатов в объемных растворах спустя три и шесть месяцев после приготовления, которые находятся в хорошем согласии с данными АСМ для высушиваемых образцов. Для выявления возможных дополнительных связей в водных растворах фуллерена проведены эксперименты по инфракрасной спектроскопии. На спектрах выявлены дополнительные пики, которые соответствуют O–H, C–OH и C–O связям. Данный факт указывает на то, что на поверхности фуллерена и их кластеров присутствует гидроксильная оболочка, обеспечивающая стабилизацию растворов [8]. Работа выполнялась совместно с Киевским Национальным Университетом им. Тараса Шевченко (Киев, Украина).

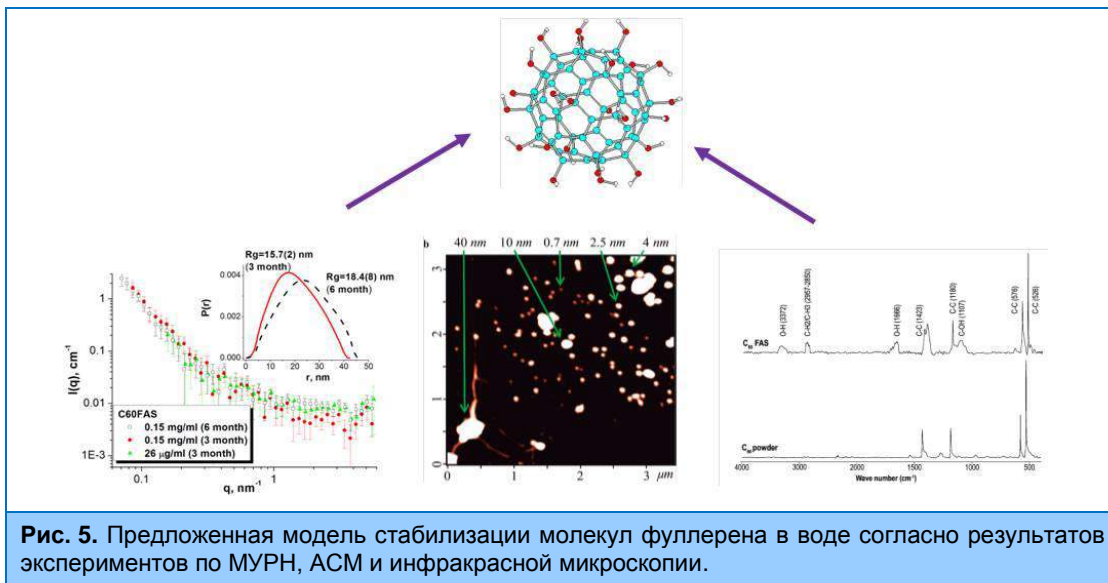


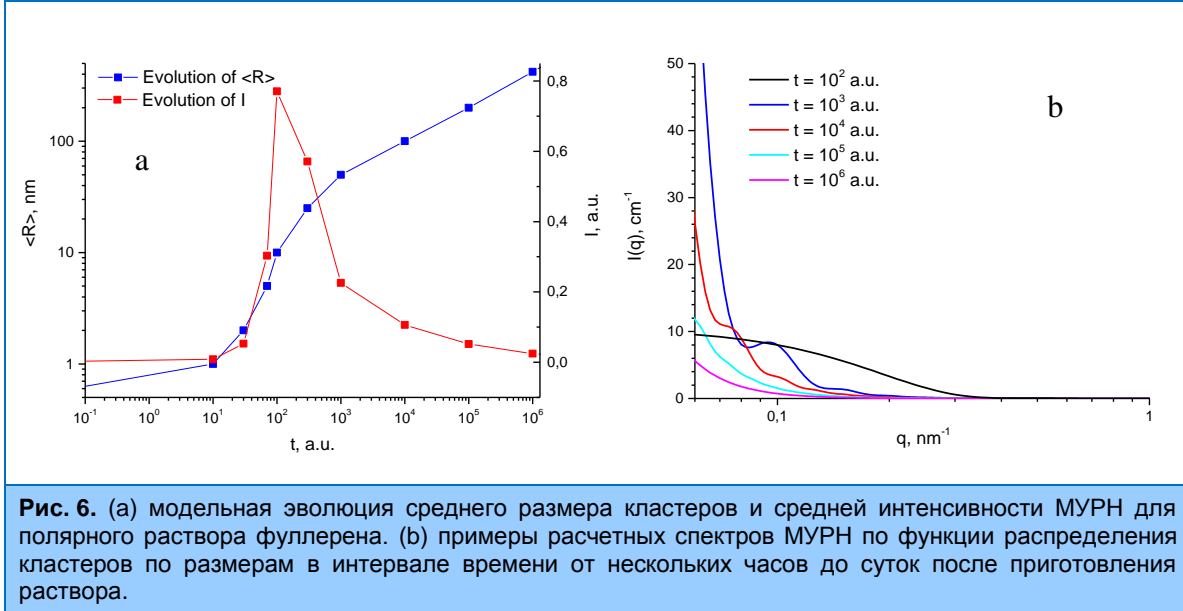
Рис. 5. Предложенная модель стабилизации молекул фуллерена в воде согласно результатам экспериментов по МУРН, АСМ и инфракрасной микроскопии.

В рамках структурных исследований наноалмазов была развита и апробирована на практике общая теория малоуглового рассеяния на сферических наночастицах с диффузной поверхностью [9]. Рассмотрено приближение малой диффузности и большой ширины диффузного слоя, что наблюдается в экспериментах МУРН на детонационных наноалмазах. Получены выражения для определения параметров функции распределения частиц по размерам в логнормальном приближении. Рассмотрены зависимости инвариантов рассеяния в зависимости от плотности длины рассеяния растворителя в рамках экспериментов по вариации контраста на жидких дисперсиях такого рода частиц. Теоретические результаты использованы в анализе данных МУРН на кластерных растворах детонационных наноалмазов в воде и диметилсульфоксиде от разных производителей. Получено полное соответствие с предсказываемым поведением инвариантов рассеяния в области изменения контраста. Подтверждено наличие в составе детонационных наноалмазов переходной оболочки от алмаза к графиту в виде специфической степенной зависимости в терминах усредненной радиальной плотности. Работа выполнялась совместно с Физико-техническим институтом имени А.Ф.Иоффе (Санкт-Петербург, РФ), Гельмогольц-центром Геестхахта (Геестхахт, Германия), Исследовательским институтом Нанюглерода (Нагано, Япония) и Физическим факультетом Киевского Национального Университета им. Тараса Шевченко (Киев, Украина).

Продолжена работа по моделированию кинетики образования и роста кластеров в растворах фуллерена C_{60} . В рамках экстраполяции численных решений кинетических уравнений по времени, получена первая оценка эволюции функции распределения кластеров по размерам $f(R,t)$ для насыщенного полярного раствора C_{60} для интервала в семь суток. На основании полученных данных выполнен расчет кривых МУРН на растворе для разных временных интервалов. Показано, что по данным модельных расчетов наибольшая интенсивность МУРН будет наблюдаться в интервале от нескольких часов до одних суток с момента приготовления раствора (рис. 6). Обсуждается точность полученных оценок и возможности проведения более качественных расчетов для конкретных систем. Перспективы данных исследований связаны с применением новых уравнений и методом баланса популяций (РВЕ). Для приложения данного подхода продолжено решение модельных задач методом дискретизации с динамической сеткой, что позволяет выполнять расчеты на длительных интервалах времени эволюции системы. В дополнение к случаям чистого распада и чистой агрегации частиц рассмотрена модель наличия в системе обоих процессов, в качестве

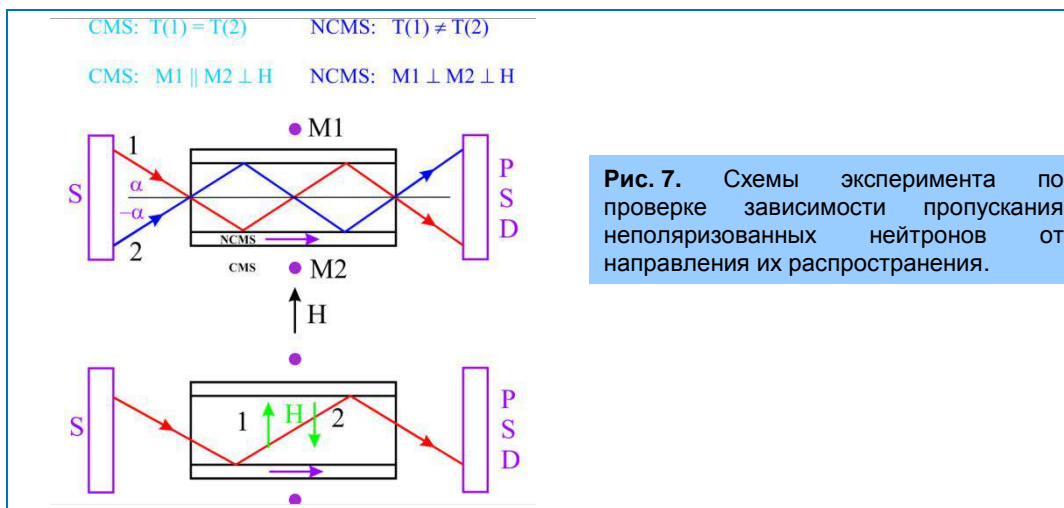
1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

исходных «ядер» взаимодействия использовались математически простые ядра (константа, сумма и проч.).



Исследование слоистых наноструктур

На рефлектометре РЕМУР проведено исследование невзаимного прохождения нейтронов через некопланарную магнитную систему (NCMS) [10]. Новая генерация элементов спинтроники основана на использовании наиболее сложных некопланарных магнитных систем (NCMS), в которых реализуется пространственная зависимость трёх ортогональных компонент вектора индукции магнитного поля. Нейтрон, как и электрон, имеет спин $s = 1/2$, поэтому исследования процессов прохождения нейтронов важны для выявления общих закономерностей, присущих обеим частицам.



Аппроксимация нейтронами поведения электрона является оправданной в ферромагнетиках, где обменное поле велико и можно пренебречь силой Лоренца. Некопланарная магнитная система, в соответствии с решением уравнения Шредингера,

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

характеризуется свойством, не присущим компланарной магнитной системе (CMS), а именно, зависимостью пропускания неполяризованных нейтронов (или электронов) от направления их распространения. Для проверки этого утверждения была создана NCMS, в которой границы раздела между областями с разным направлением намагниченности не превышали толщину 10 нм, что обеспечивало неадиабатический режим прохождения через них спина нейтрона. NCMS представляла собой два магнитных зеркала с ортогональными друг другу и лежащими в плоскости зеркал векторами намагниченности, помещённых в перпендикулярно направленное зеркалам магнитное поле. На **рис. 7** показаны две схемы проверки поведения нейтронов при прохождении CMS и NCMS. В первой схеме пучок нейтронов направлялся так, что реализовывались последовательности “первое зеркало-магнитное поле-второе зеркало” и “второе зеркало-магнитное поле-первое зеркало”.

На **рис. 8** показаны зависимости интенсивности нейтронов для CMS и NCMS, соответственно. В случае NCMS наблюдается антифазное поведение кривых пропускания. На второй схеме **рис. 7** (внизу) показан второй вариант проверки, когда направление магнитного поля изменялось на обратное.

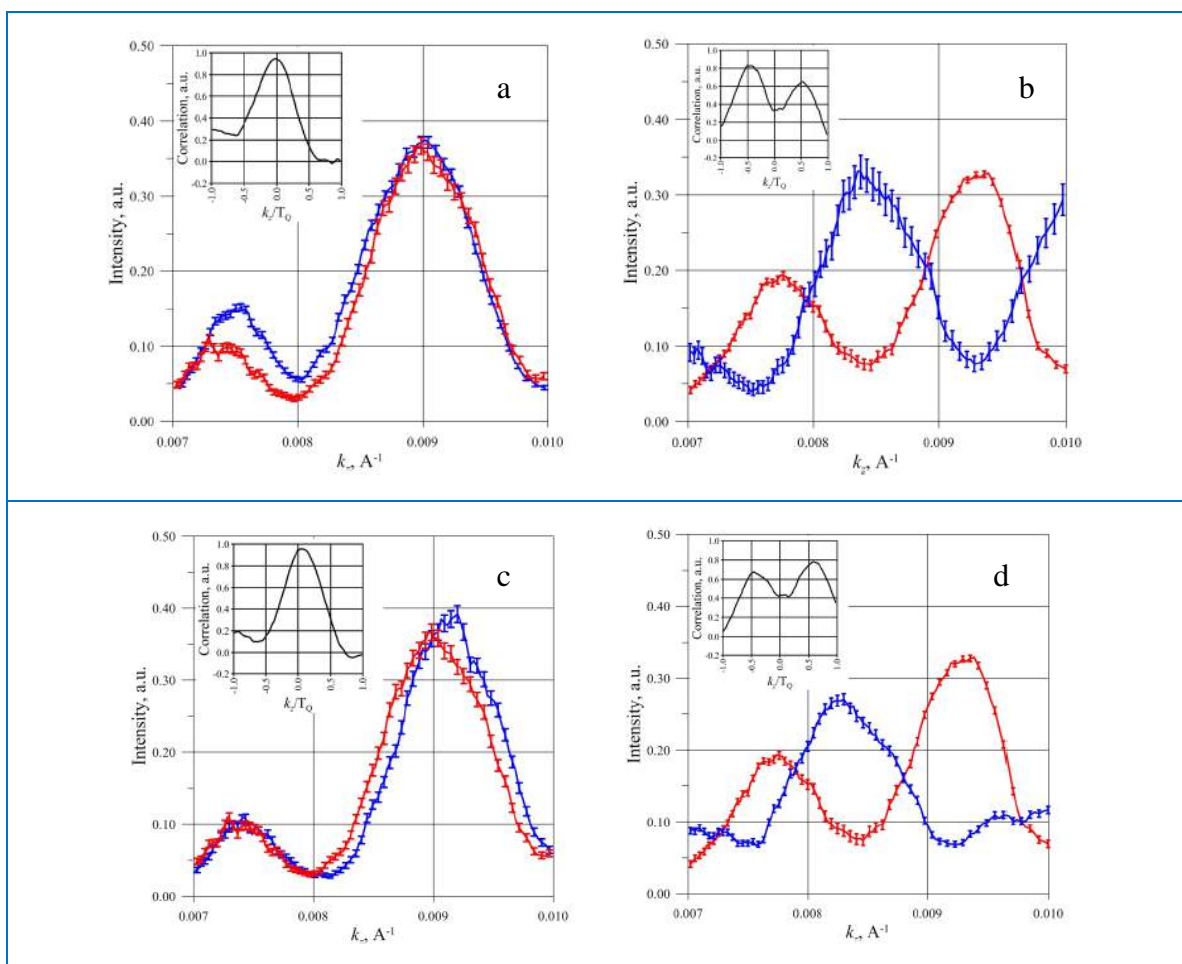


Рис. 8. Зависимости пропускания неполяризованных нейтронов, полученные с использованием первой экспериментальной схемы для CMS (a) и NCMS (b). Зависимости пропускания неполяризованных нейтронов, полученные с использованием второй экспериментальной схемы для CMS (c) и NCMS (d).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Соответственно этой схеме на **рис. 8** показаны зависимости пропускания неполяризованных нейтронов для CMS и NCMS, соответственно. Таким образом, показано, что NCMS обладает свойством зависимости пропускания от направления распространения нейтронов, что, в свою очередь, есть следствие не коммутативности алгебры спина $\frac{1}{2}$.

Проведено исследование пленочных покрытий нитрида титана методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии с целью определения структурных параметров: толщин слоев, шероховатостей межслойных границ и плотности длины рассеяния отдельных слоев. Монослойные TiN и многослойные покрытия TiN/WN снижают износ при резке и формировании инструментов, увеличивают твердость поверхности и уменьшают коэффициент трения. Исследования проводились на нейтронном рефлектометре РЕФЛЕКС на реакторе ИБР-2 и на установке для рентгеноструктурного анализа Bruker в Санкт-Петербургском государственном университете. На основе полученных коэффициентов отражения от пленки нитрида титана толщиной 32нм, напыленной методом магнетронного напыления на кремниевую подложку (TiN(32нм)/Si), восстановлены профили плотности длины рассеяния (ПДР) в направлении нормали к границе раздела сред (**рис. 9**).

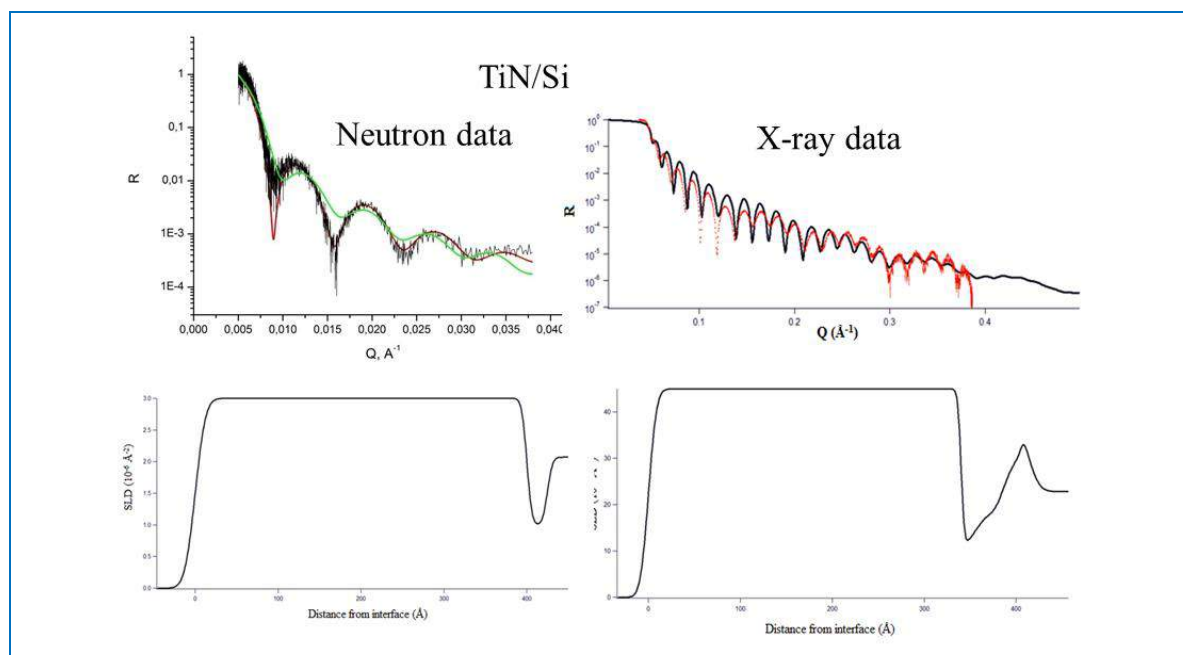


Рис. 9. Коэффициенты отражения нейтронов (слева) и рентгеновских лучей (справа) от пленки нитрида титана толщиной 32нм. Восстановление профиля плотности длины рассеяния в обоих случаях (внизу) показывает наличие переходного слоя между пленкой и подложкой с относительно низким значением ПДР. Это свидетельствует о плохой адгезии пленки к поверхности подложки

Исследование биологических наносистем, липидных мембран и липидных комплексов

Проведены исследования самоорганизации и структурных параметров мицелл рН-чувствительных ПАВ – аминоксидов, синтезированных в Университете Коменского (Братислава, Словакия) методом малоуглового рассеяния нейтронов на установках Yellow Submarine (Будапешт, Венгрия) и ЮМО. Ранее было показано, что изменение рН дает широкие возможности для управления свойствами особых молекул ПАВ – аминоксидов. Согласно данным МУРН, при $\text{pH} < 3$ и при $\text{pH} > 8$ в растворе наблюдаются заряженные мицеллы, однако согласно литературным данным аминоксиды могут иметь заряд только в кислой среде. Были

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

проведены дополнительные исследования Дзета потенциала растворов для уточнения информации о заряде.

Методом малоуглового нейтронного и синхротронного рассеяния исследовано влияние сахарозы на структуру липидного бислоя однослойных везикул [11]. Установлено, что при повышении концентрации сахарозы до 40% происходит существенное уменьшение толщины липидного бислоя.

Проведены исследования модельных липидных мембран липидной матрицы верхнего орогового слоя кожи (stratum corneum) методом дифракции нейтронов и рентгеновских лучей. Главным результатом является сохранение сверхсильного межмембранного взаимодействия при полной гидратации мембраны.

Полимерные материалы

Синтез и исследование структуры и физических свойств магнитных эластомеров одно из направлений активно развивающихся технологий создания новых «умных» наноматериалов с молекулярной анизотропией и ферромагнитными наночастицами. Проведено исследование магнитных эластомеров, синтезированных в Западном Университете г. Тимишоара, Румыния в поперечном (P_i) и продольном (V_i) магнитном поле методом малоуглового рассеяния нейтронов. Измерения проводились на исходном эластомере P1(B1) без ферромагнитных включений (матрица) и на эластомерах P12-P32, P13-P33, P14-P34 и B2-B4 с феррочастицами в разных концентрациях и полимеризованных, без и в магнитном поле разной величины.

Как показывают результаты нейтронных исследований, исходная полимерная матрица уже является анизотропной (полимерные кластеры типа разветвленных цепей являются более протяженными в направлении, поперечном плоскости пленки). Магнитное поле, приложенное в том же поперечном направлении, действует как фактор, вызывающий взаимное притяжение и сближение феррочастиц вдоль линий поля. Тем самым, происходит выдавливание полимера из зазоров между частицами, и анизотропия полимерных кластеров меняется (размер кластера в плоскости пленки увеличивается, в поперечном направлении – сокращается). Этот результат получен экспериментально впервые и полностью согласуется с результатами численного моделирования поведения систем магнитных частиц в упругом двумерном массиве при намагничивании, указывающими на положительную структурную магнитострикцию в системах с кластерами.

Продолжена работа по сравнению и анализу результатов описания стеклования полимеров в рамках современных теоретических методов. Сравнение с экспериментом проводилось на основании данных дифференциальной сканирующей калориметрии для полистирола в интервале скоростей охлаждения от $5 \cdot 10^{-6}$ К/с до 2 К/с. Ширина диапазона предоставленных экспериментальных данных на три порядка превышает существующие и описанные в литературе результаты. Показано, что использование распространенных теоретических методов (TNM, Адам-Гиббс и другие) приводит к сильному расхождению с экспериментом. Предложено новое выражение для времени релаксации для описания экспериментальных данных в рамках подхода с одним параметром порядка. Выполнено сравнение используемых подходов и описаны перспективы их развития. В качестве дополнительных параметров для сравнения использовались предельная фиктивная температуры системы, параметры пиков C_p (высота и положение), произведенная энтальпия (рис. 10). Проверена предсказательная способность моделей на основании линейной экстраполяции их параметров по скорости охлаждения. Показано, что модели Адама-Гиббса дают лучшие результаты [12,13]. Работа выполнялась в сотрудничестве с Университетом Росток (Росток, Германия).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

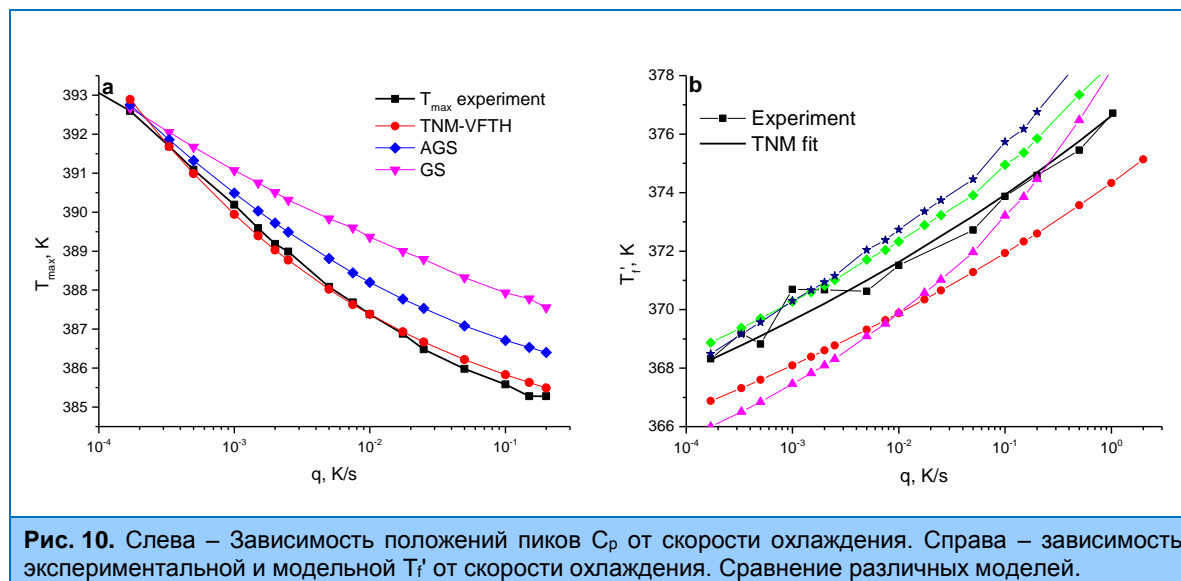
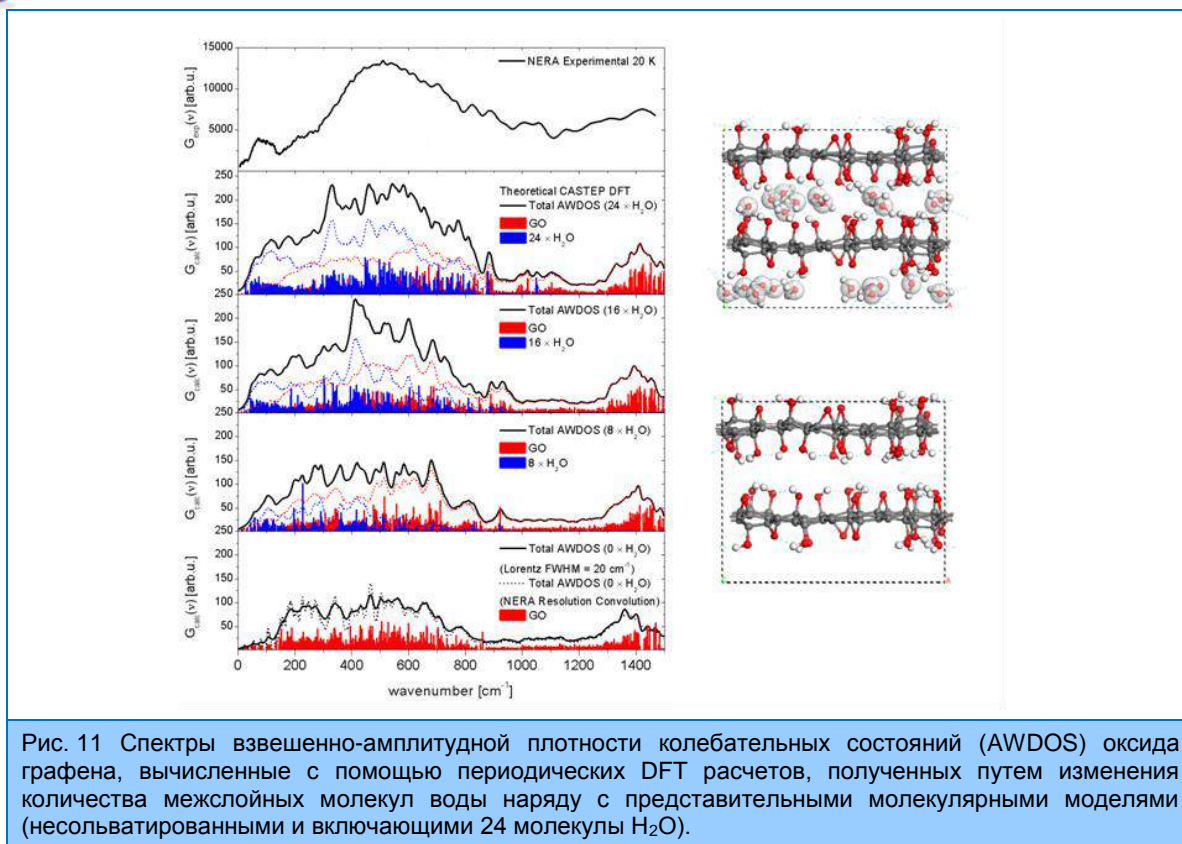


Рис. 10. Слева – Зависимость положений пиков C_p от скорости охлаждения. Справа – зависимость экспериментальной и модельной T_i' от скорости охлаждения. Сравнение различных моделей.

Атомная и молекулярная динамика

Проведено экспериментальное и теоретическое исследование колебательной динамики удержанной воды в оксиде графена [14]. На сегодняшний день принято считать, что оксид графена (ОГ) в основном содержит гидроксильную (-OH) и эпоксидную (-O-) группы, распределенные по его базисным плоскостям. Наличие атомов водорода в недавно синтезированном ОГ свидетельствует о его метастабильности. В результате он переходит в стабильную форму путем рекомбинации атомов водорода с соседними эпоксидными и гидроксильными группами, образуя воду, которая всегда присутствует в оксидных материалах графена. Измерения рассеяния нейтронов на образце ОГ, синтезированного модифицированным методом Хаммерса в Институте общей и неорганической химии РАН (Москва) проводились при 20K на времяпролетном спектрометре обратной геометрии HEPA. В силу отсутствия информации о спектрах неупругого рассеяния ОГ было проведено атомистическое моделирование низкотемпературного спектра на основе модели Лерфа-Клиновского с переменным числом молекул воды в межслоевом пространстве (при расстоянии, равном 7 Å, как было выявлено при одновременных измерениях методом нейтронной дифракции). В попытке имитировать ближний порядок была предложена систематическая периодическая модель. Также проведены расчеты с использованием теории функционала плотности (DFT). Экспериментальный однофононный INS спектр ОГ, зарегистрированный на спектрометре HEPA, приведен в сравнении с теоретическими результатами и представительными периодическими моделями на рис. 11. Обычно можно увидеть 6 полос, разрешенных в экспериментальном спектре, которые были найдены приблизительно в ~ 1500 , 1000, 500, 250, 100 и 25 см^{-1} , соответственно. Теоретические расчеты позволили проанализировать особенности спектра.



Полоса в диапазоне $\sim 1500\text{-}1200\text{ см}^{-1}$ может быть точно отнесена к набору $\delta\text{C-O-H}$ мод. Доминирующая, четко выраженная особенность, охватывающая диапазон $\sim 700\text{-}300\text{ см}^{-1}$, может быть отнесена к набору либрационных мод воды. Общая форма и положение этой полосы были восстановлены надлежащим образом. Либрационные моды широко распределены ниже 700 см^{-1} в следующем порядке: $\omega\text{H}'\text{O-H} > \tau\text{H}'\text{O-H} > \rho\text{H}'\text{O-H}$. Изгибные моды, как правило, проявляют себя в диапазоне $> 600\text{ см}^{-1}$, в то время как крутильные - в $< 600\text{ см}^{-1}$. Колебательные моды широко распространены ниже 500 см^{-1} . Экспериментальные полосы, возникающие в $\sim 250\text{ см}^{-1}$ и $\sim 50\text{-}150\text{ см}^{-1}$, соответственно, могут быть связаны с поступательными модами координированной воды. Согласно расчетам, верхняя полоса может быть приписана, главным образом, к $\nu\text{O}\cdots\text{O}$ валентным колебаниям молекул воды, водородно-связанным с гидроксильными группами. Группа в $\sim 50\text{-}150\text{ см}^{-1}$ может быть связана с видимыми движениями центров масс воды, которые, в свою очередь, сильно связаны с деформациями структуры ОГ. Моды, образующиеся ниже 100 см^{-1} , можно отнести к поступательным модам воды, сильно связанным с бабочкообразными деформациями ОГ слоев. Наконец, энергетически слабейшие моды были обнаружены теоретически при ~ 30 и 45 см^{-1} , соответственно. Верхние могут быть связаны с так называемыми дыхательными движениями структуры ОГ и описываются как колебание межслойного расстояния. Самые низкие вибрации, так называемые сдвиговые моды, соответствуют параллельным переносам слоев. Эти движения проявляются как полоса, наблюдаемая экспериментально при 30 см^{-1} . Проведенный анализ позволил удовлетворительно качественно описать соответствующий спектр неупругого рассеяния, который определяется, главным образом, за счет межслойных молекул воды, что подтверждает достоверность модели Лерфа-Клиновского.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

На спектрометре ДИН-2ПИ исследовано неупругое когерентное рассеяние нейтронов в жидком галлии при начальной энергии нейтронов $E_0 = 28,7$ мэВ и $7,65$ мэВ и температурах образца $T = 333$ К и 533 К (рис. 12). Установлено, что дисперсионная кривая в жидком галлии распадается на две ветви, что связано, по-видимому, с наличием в этом металле двух типов межчастичного взаимодействия: металлической и ковалентной связей. Эта особенность межчастичного взаимодействия в галлии проявляется также в структуре жидкого металла как асимметрия главного пика его структурного фактора.

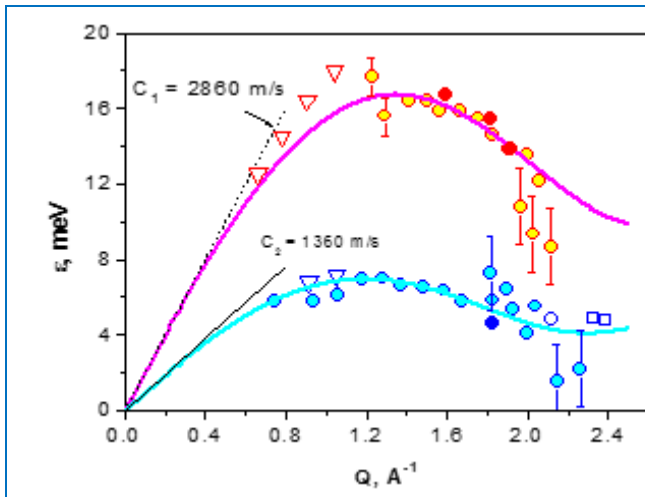
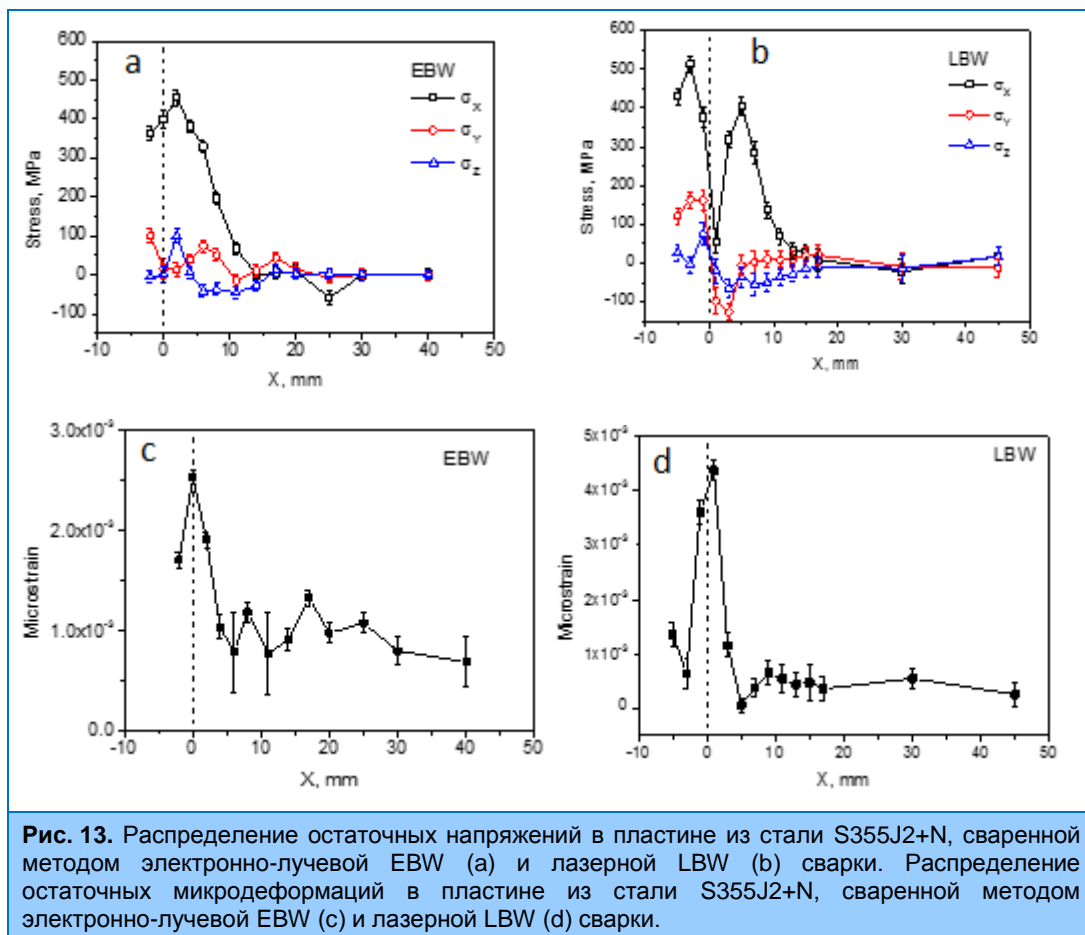


Рис. 12. Дисперсионные кривые в жидком галлии ($T = 333$ К). Кружками показаны экспериментальные данные, полученные на спектрометре ДИН-2ПИ (незаполненные кружки – начальная энергия нейтронов $E_0 = 28.7$ meV, заполненные кружки – $E_0 = 7.65$ meV). Пустые квадраты – неупругое рассеяние нейтронов. Треугольники – неупругое рассеяние синхротронного излучения. C_1 и C_2 – скорости звука для верхней и нижней ветвей дисперсионной кривой.

Прикладные работы

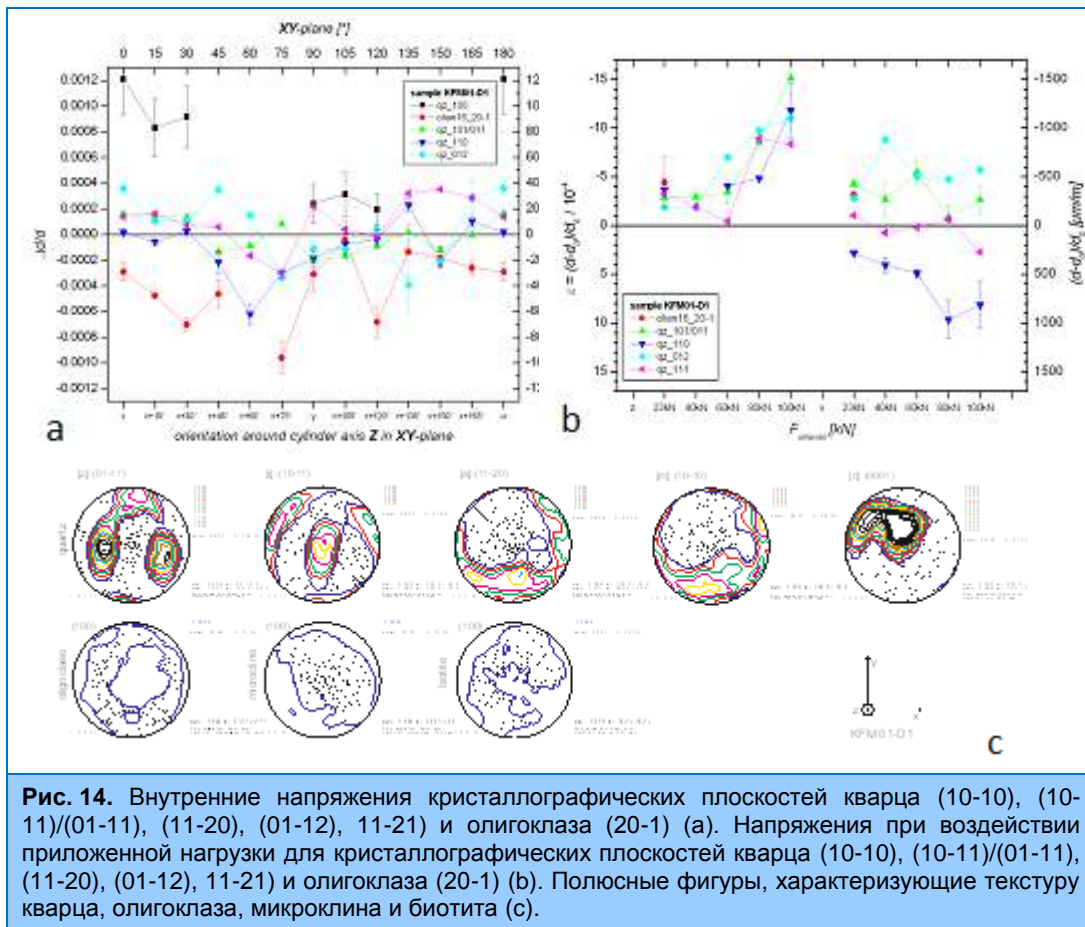
К прикладным работам в отделе НЭО НИКС ЛНФ традиционно относятся экспериментальные исследования текстуры горных пород и минералов, внутренних напряжений в них и определение внутренних напряжений в объемных материалах и изделиях, включая инженерные материалы и детали машин и устройств. В основном, эти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

На дифрактометре ФСД были продолжены эксперименты по изучению распределения остаточных напряжений в сварных швах, полученных с помощью различных методов лучевой сварки [15] (рис. 13). Образцы для измерений были изготовлены в Институте электроники БАН (София, Болгария) в виде пластин, сваренных методом электронно-лучевой (electron beam welding - EBW) и лазерной (laser beam welding - LBW) сварки. Установлено, что максимумы остаточных напряжений наблюдаются не в центрах швов, а в зоне термического влияния (ЗТВ), при этом уровень остаточных напряжений довольно резко падает при удалении от ЗТВ. Максимальной по величине в обоих образцах является компонента тензора напряжений σ_x , направленная вдоль линии сварного шва, и имеющая, в основном, растягивающий характер. Для образцов EBW и LBW максимальные уровни остаточных напряжений сопоставимы по величине и достигает величин 460 МПа и 530 МПа, соответственно. Исходя из результатов предыдущих экспериментов на ФСД по изучению остаточных напряжений в образцах-свидетелях для АЭС, можно отметить, что уровень напряжений в образце LBW типично высок для данного вида сварки. В то же время образец EBW демонстрирует существенно больший уровень напряжений по сравнению с тем, который был достигнут для образцов-свидетелей с электронно-лучевой сваркой (~200 МПа). Результаты данных измерений указывают на неоптимальность подбора параметров электронно-лучевой сварки и возможность их регулировки для снижения уровня остаточных напряжений. При этом результаты нейтронных измерений могут служить надежным средством диагностики уровня остаточных напряжений.



Помимо исследования остаточных напряжений в данных образцах интерес также представляет изучение остаточных микродеформаций (**рис. 13**), которые могут быть оценены по уширению дифракционных пиков по сравнению с функцией разрешения прибора. Анализ поведения ширин в зависимости от межплоскостного расстояния d_{hkl} показал, что уширение пиков носит анизотропный характер и зависит от направления $[hkl]$ в кристалле. Данное поведение является характерным проявлением фактора ориентации дислокаций по отношению к вектору рассеяния, что позволяет количественно оценить плотность дислокаций в исследуемом материале. В данных образцах для EBW максимальный уровень микродеформации в материале достигает $2.5 \cdot 10^{-3}$, и положения максимумов в распределении микродеформации находятся в хорошем соответствии с положениями центров сварных швов. В образце LBW максимальный уровень микродеформации почти вдвое выше - $4.5 \cdot 10^{-3}$. Полученные экспериментальные данные будут использованы для последующих модельных расчетов по методу конечных элементов (группа проф. В. Михайлова, Brandenburg University of Technology, Germany) и сопоставлены с результатами механических испытаний путем высверливания отверстий, измерения микротвердости и оптического исследования микроструктуры (группа проф. П. Петрова, Institute of Electronics BAS, Bulgaria). Это позволит систематически изучить зависимость распределения остаточных напряжений от применяемой технологии сварочного процесса и ее параметров для наиболее распространенных конструкционных материалов. Таким образом, данная информация может послужить основой для выработки конкретных технологических рекомендаций для получения желаемого уровня и профиля остаточных напряжений.

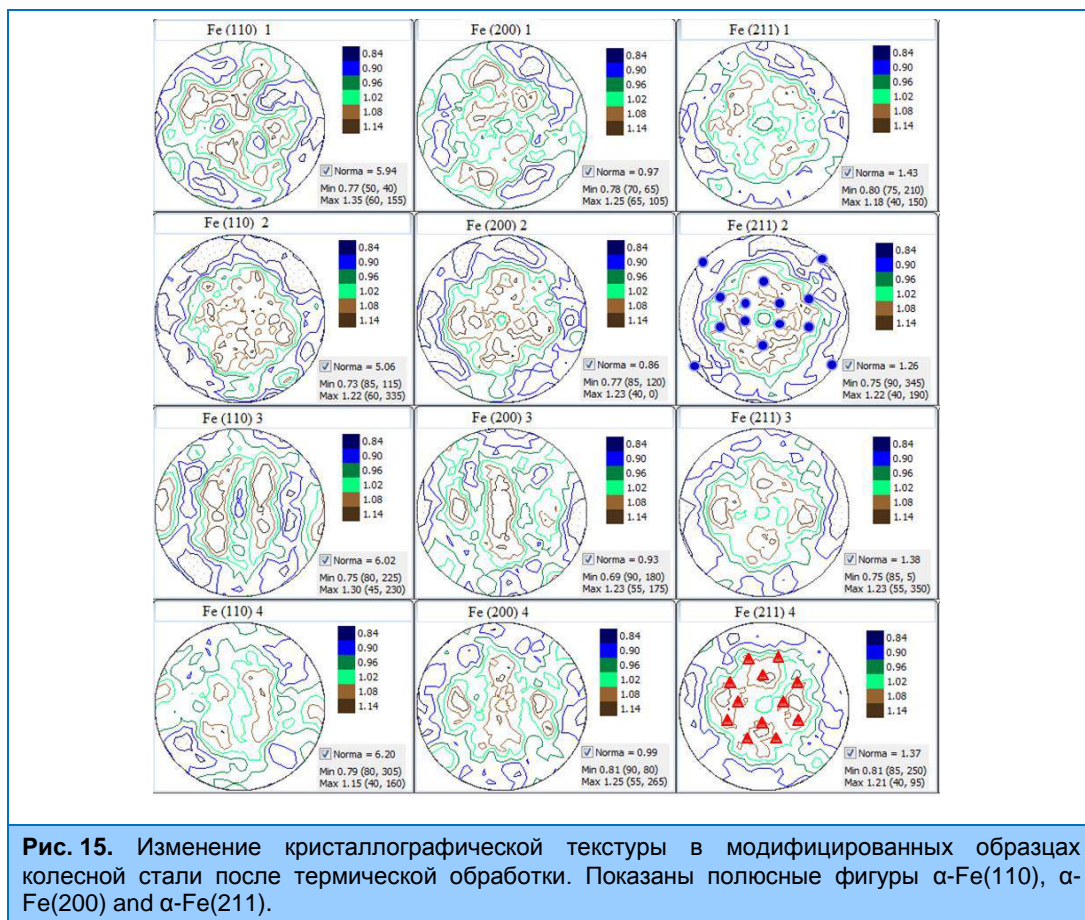
1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ



Проведено исследование текстуры, внутренних напряжений, и напряжений при воздействии приложенной нагрузки в многофазных поликристаллических образцах гранита [16] на дифрактометрах СКАТ и Эпсилон (рис. 14). Эксперименты по изучению механических свойств при воздействии одноосной циклической деформации проводились в диапазоне нагрузок до 100 kN (150 МПа) и дополнялись также одновременным анализом акустической эмиссии

Полученные значения внутренних напряжений варьировались в диапазоне от -1×10^{-3} до 1.2×10^{-3} . При измерении напряжений под воздействием приложенной нагрузки ось z цилиндрического образца была ориентирована под углом 45° по отношению к нейтронному пучку, что позволяло одновременное измерение компонент σ_1 and σ_3 . Отрицательные напряжения вдоль оси z согласуются с законом Гука, положительные напряжения вдоль оси x, ориентированной перпендикулярно σ_3 , меньше по величине и определяются соотношением Пуассона.

В рамках сотрудничества с Днепропетровским национальным университетом им. О. Гончара (Украина) проведено исследование ряда образцов из феррито-перлитной колесной текстуры [17]. Образцы вырезались из ободов железнодорожных колес и из переходной зоны от ступицы к диску. Измерение текстуры проведены методом дифракции тепловых нейтронов на установке СКАТ в ЛНФ ОИЯИ. Получен набор из 1368 (19×72) дифракционных спектров, из которых извлечены прямые *полные* полюсные фигуры (ПФ) на сетке $5^\circ \times 5^\circ$. Для каждого образца получены три полюсные фигуры (200), (110), (211) д3 α -Fe.



На основании измерений даже для очень слабой текстуры удалось выявить текстурные компоненты деформации и рекристаллизации, соответствующие технологическим операциям при изготовлении колес. Сделан вывод, что введение в сплав модификатора приводит к переориентации слабой преимущественной ориентировки в образцах из ободов. Переориентация текстурной компоненты при отжиге может быть объяснена процессами вторичной рекристаллизации и фазовым переходом в стали. Изменения в рассеянии текстурной компоненты в модифицированных образцах из переходной зоны связаны с введением модификатора, а также с некоторыми отличиями в режимах термической обработки, которые применялись к серийной и опытной сталям. Несмотря на слабый характер текстуры удалось выявить компоненты текстуры прокатки (символы Δ на рис. 15) и рекристаллизации (символы \bullet на рис. 15), характерные для ОЦК материалов, что подтверждает высокий потенциал дифрактометра SKAT (рис. 15).

II. Методические результаты

Проведены работы по созданию окончательной конфигурации нового дифрактометра ДН-6. Совместно с отделом НЭО КС изготавливается второй кольцевой детектор, состоящий из 96 независимых гелиевых счетчиков. Проведены первые успешные методические эксперименты по нейтронной дифракции в камерах с алмазными наковальнями с образцами магнетита Fe_3O_4 в диапазоне давлений до 23 ГПа (рис. 16). Также проведены работы по дальнейшему развитию техники нейтронного эксперимента с камерами высокого давления с сапфировыми наковальнями. Доступный диапазон давлений расширен до 12 ГПа за счет

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

уменьшения рабочей площадки наковален до 1 мм.

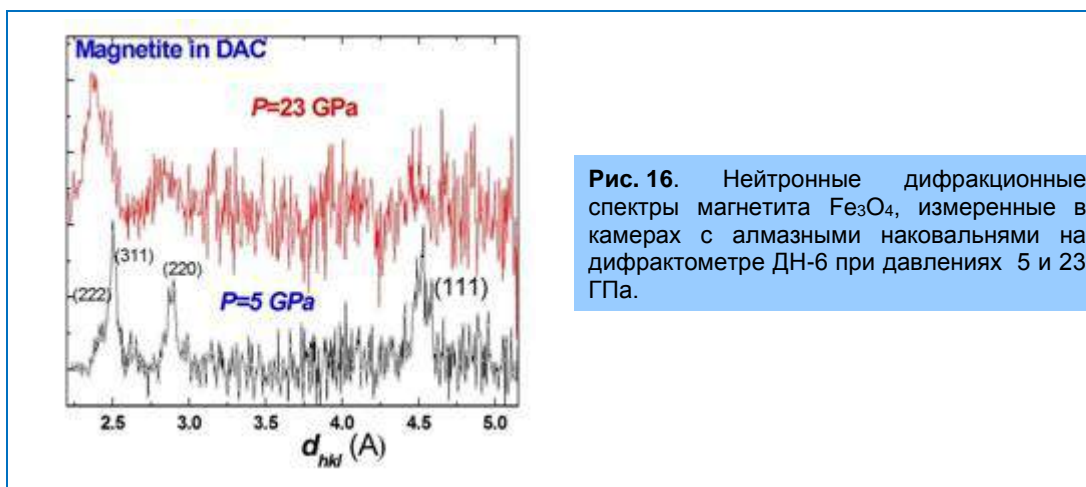


Рис. 16. Нейтронные дифракционные спектры магнетита Fe_3O_4 , измеренные в камерах с алмазными наковальнями на дифрактометре ДН-6 при давлениях 5 и 23 ГПа.

В 2014 г. проводились работы по подготовке к работе рефлектометра ГРЭИНС в рамках пользовательской политики. Рефлектометр ГРЭИНС был включен в список установок, доступных для пользователей реактора ИБР-2, и соответствующая информация про установку была добавлена на сайт ЛНФ. Созданы и проведена апробация специализированных жидкостных ячеек (**рис. 17**) для измерения границ раздела жидкость/воздух и жидкость/твердое тело. Создан универсальный держатель для измерения твердотельных образцов. Установлена в штатное положение и испытана автоматическая передвижная платформа для детектора (**рис. 17**). В рамках разработки новых покрытий для нейтроннооптических устройств проведены эксперименты по изучению влияния оксидации на структуру тонких пленок на стеклянной подложке.



Рис. 17. Столик образца с жидкостной ячейкой (слева) и автоматическая передвижная платформа для детектора (справа).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Продолжались работы по реализации проекта по созданию нового дифрактометра на ба канале для нейтронографических исследований переходных процессов в реальном времени. Изготовлена и смонтирована фоновая защита для детекторной системы дифрактометра: кольцевой детектор в аксиальной геометрии на обратных углах рассеяния, два блока из восьми точечных счётчиков для средних углов рассеяния и блок из восьми счётчиков для малых углов рассеяния. На точечные детекторы установлены новые предусилители. Запущен термостат на температуры от -40С до +100С и проведены первые измерения на модельных биологических мембранах.

Продолжены работы по созданию макетного варианта спектрометра радиографии и томографии на канале 14 (рис. 18). Установлен в рабочее положение гониометр HUBER с трансляционными и вращательными степенями свободы. Проведены первые томографические эксперименты с различными типами объектов (рис. 19). Отработана процедура 3D-реконструкции внутреннего строения исследуемых объектов с помощью различных программных пакетов. Полученные результаты показали хорошее качество получаемых данных, сравнимое с уровнем других мировых нейтронных центров.

В 2014 г. совместно с сотрудниками НЭОКС на ФСД был установлен 4-й элемент (из 7 запланированных) 90°-детектора ASTRA_Right на основе сцинтиллятора ZnS со спектросмещающими оптическими волокнами. К концу 2014 г. планируется окончательная геометрическая юстировка данного элемента на ФСД и настройка рабочих параметров детектора. Таким образом, продолжение работ по расширению многоэлементной детекторной системы ФСД позволит значительно улучшить светосилу прибора.

Продолжена работа по введению в регулярную эксплуатацию электроники для набора экспериментальных данных в списочном режиме List-mode. На дифрактометре ФСД в 2014 г. в циклах №6 (октябрь, режим водяного замедлителя) и №7 (ноябрь, режим криогенного замедлителя) в ходе пользовательских экспериментов анализатор List-mode был испытан в режиме реальной постоянной работы. Сравнительный анализ спектров, зарегистрированных параллельно "старым" и новым List-mode-анализатором, показал их идентичность. Кроме того, регистрация данных со всех элементов 90°-детекторов ASTRA с последующим применением электронной фокусировки позволила в три раза увеличить светосилу эксперимента.



Рис. 18. Установка нейтронной радиографии и томографии на 14 канале ИБР-2.

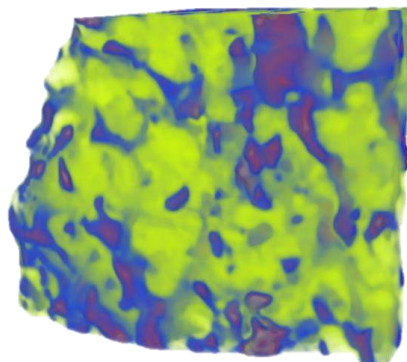
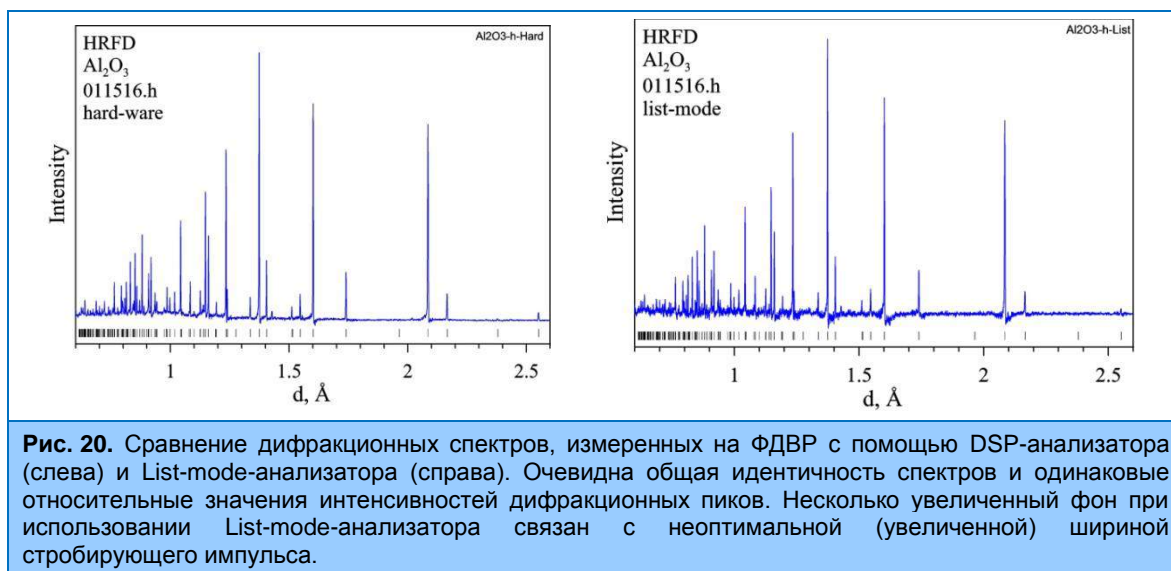


Рис. 19. Нейтронное томографическое изображение метеорита Сеймач, показывающее распределение Fe-Ni сплава и фракции горных пород (в основном, оливина).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Новый анализатор также установлен на ФДВР и выполнены первые эксперименты, в которых проведено одновременное сравнительное измерение дифракционных спектров с помощью существующего анализатора на базе DSP и нового анализатора "List-mode". С помощью разработанного алгоритма восстановлены спектры высокого разрешения, измеренные в режиме "List-mode", и проведено их сравнение с DSP-спектрами, которое показало, что спектры идентичны (рис. 20).



Это свидетельствует о корректности работы новой электроники и разработанных алгоритмов восстановления дифракционных спектров из "сырых" данных. Проблема, которую предстоит решить, связана с недостаточной скоростью обработки данных на имеющихся вычислительных мощностях. В настоящее время приобретается оборудование и разрабатываются алгоритмы, которые позволят увеличить скорость обработки данных, по крайней мере, в ~100 раз.

На 13 канале реактора ИБР-2 совместно с отделом НЭОКС продолжаются работы по созданию фурье-дифрактометра FSS. В 2014 г. была завершена конструкторская проработка для монтажа дифрактометра. В настоящее время в основном завершено создание биологической защиты и монтаж необходимого технологического оборудования. Кроме того, на FSS был установлен стальной коллиматор в закладную трубу канала для снижения радиационной нагрузки на нейтроновод, смонтированы 1-я секция зеркального нейтроновода и штатный фурье-прерыватель со столом.

Для рефлектометра РЕМУР изготовлены блок образца для экспериментов в переменном магнитном поле частотой 10-60 МГц и магнитная система широкоапертурного анализатора поляризации, предназначенного для работы с двумерным ПЧД (рис. 21).



Рис. 21. Блок образца для экспериментов в переменном магнитном поле частотой 10-60 МГц (слева) и магнитная система широкоапертурного анализатора поляризации (справа) рефлектометра РЕМУР.

Для оценки возможностей различных методов определения микроструктурных характеристик по данным, полученным на TOF-дифрактометре ФДВР, проведены эксперименты с набором порошков кубического карбида ниобия NbC_y с $y \approx 0.93$, имевших разные средние размеры кристаллитов в пределах 100 – 2500 Å [18]. Дополнительные эксперименты проведены на дифрактометре высокого разрешения с монохроматическим пучком нейтронов HRPT в PSI (Швейцария). Совместный анализ данных выполнен с помощью классических методов Ритвельда и Вильямсона – Холла и с привлечением Whole Powder Pattern Modeling (WPPM) метода. Образцы карбида ниобия $NbC_{0.93}$ с различным средним размером кристаллитов были получены с помощью высокоэнергетического размола исходного крупнозернистого порошка в течение различного времени и далее они обозначаются как $NbC-n$, где $n = 0, 1, 5, 10, 15$ – время размола в часах. Дифракционные спектры некоторых порошков $NbC-n$, измеренные на HRFD, показаны на **рис. 22**. Обработка по методу Ритвельда дифракционных спектров перемолотых образцов показала наличие в них двух фракций с очень разными ширинами пиков и со смещенными положениями максимумов. Для анализа ширины дифракционных пиков использовался классический метод Вильямсона – Холла, состоящий в анализе функциональной зависимости “полуширины” (полной ширины на половине высоты, FWHM) или интегральной ширины пиков от переменной по которой идет сканирование дифракционного спектра.

Зависимость $W^2(d^2)$ для исходного порошка $NbC-0$ показана на **рис. 23**, где также показан вклад в ширины пиков от функции разрешения HRFD. Зависимость для поликристаллических порошков NAC и Al_2O_3 линейная, тогда как экспериментальные точки от $NbC-0$ лучше описываются параболой, что соответствует $L \approx 2550$ Å. Однако основное отличие зависимости для $NbC-0$ от функции разрешения связано с наличием в этом порошке микродеформаций на уровне $\epsilon \approx 1 \cdot 10^{-3}$. Построение аналогичных зависимостей для перемолотых порошков показало, что экспериментальные значения не могут быть описаны одной кривой, поскольку наблюдается заметный разброс точек. Этот эффект может быть отнесен к проявлению сильной анизотропии микродеформаций, т.е. зависимости уширения пиков от конкретного набора индексов Миллера.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

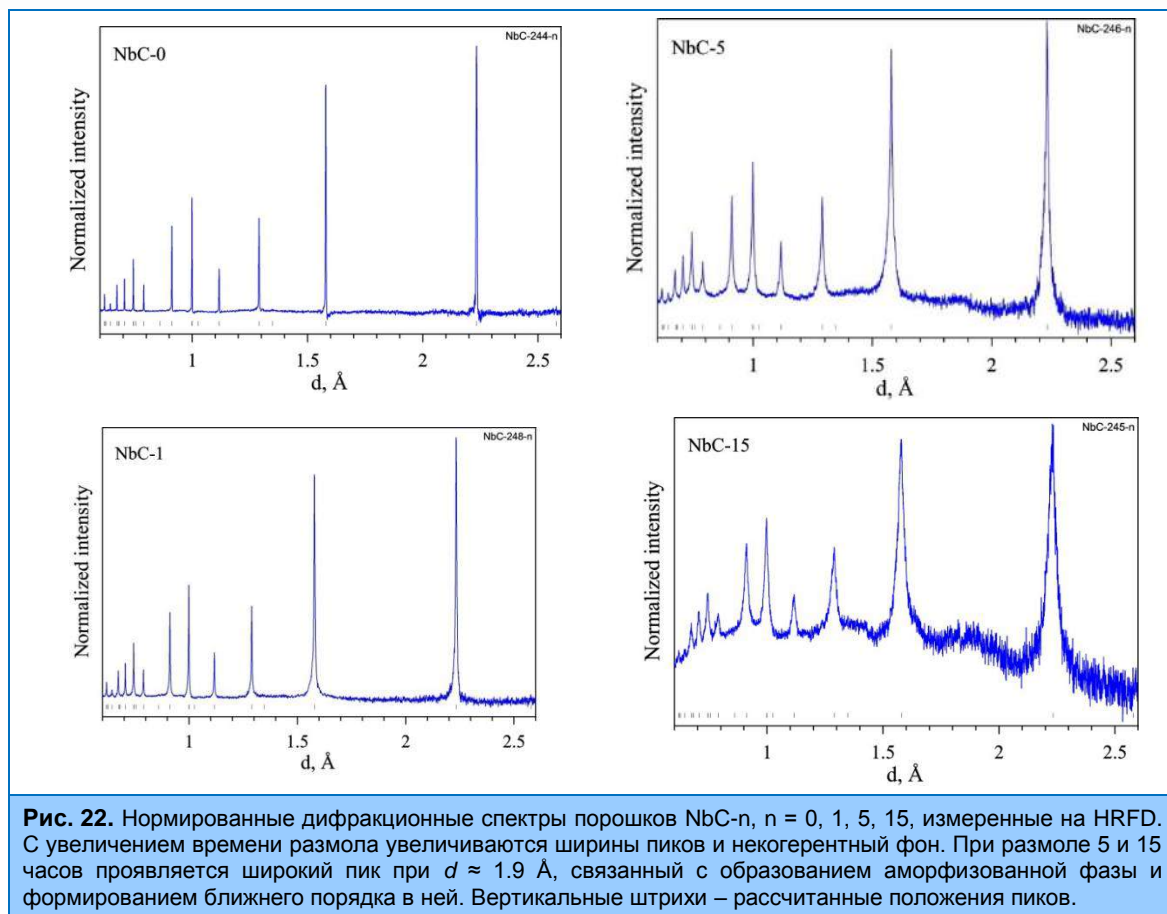
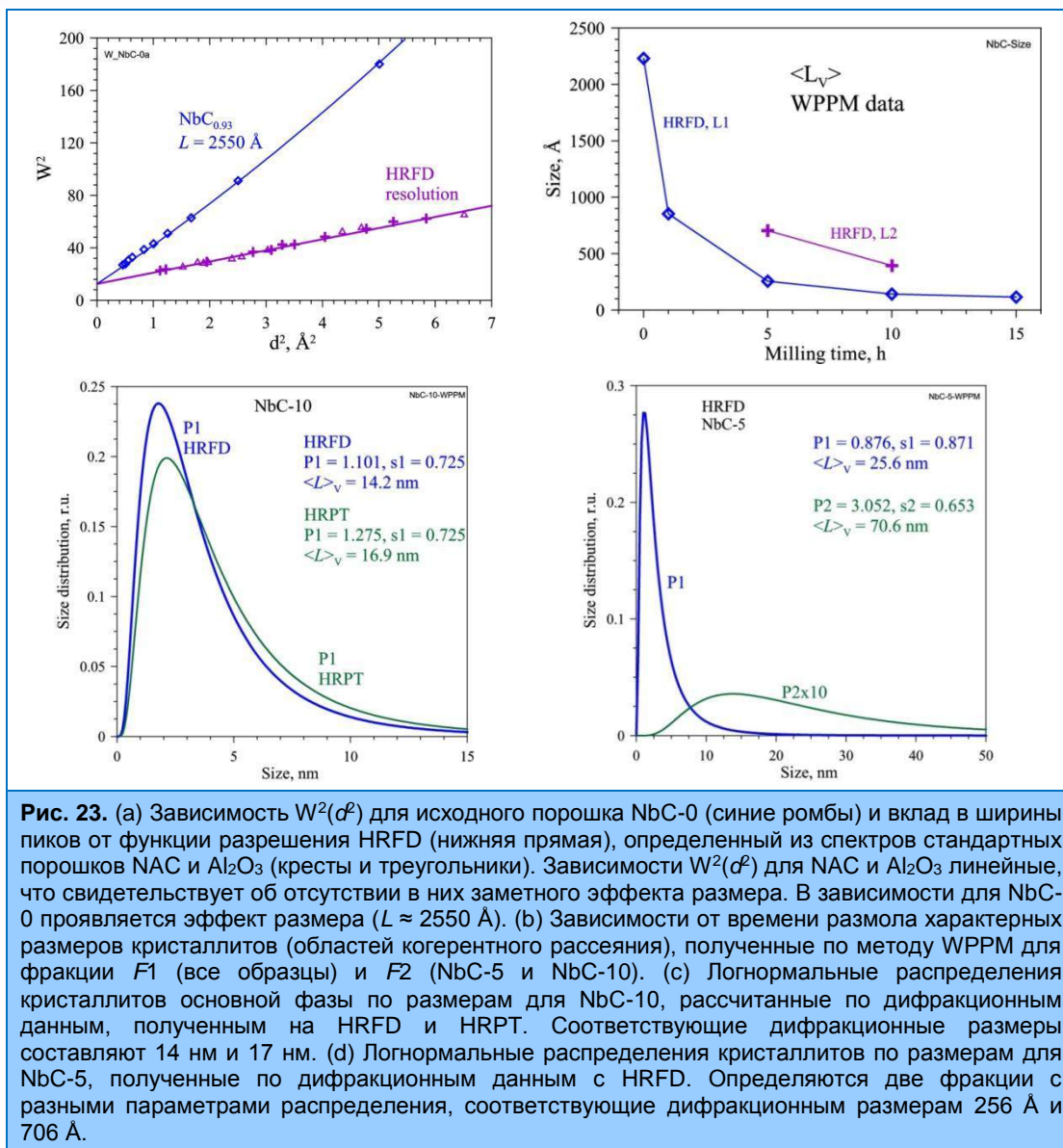


Рис. 22. Нормированные дифракционные спектры порошков NbC-n, n = 0, 1, 5, 15, измеренные на HRFD. С увеличением времени размола увеличиваются ширины пиков и некогерентный фон. При размоле 5 и 15 часов проявляется широкий пик при $d \approx 1.9$ Å, связанный с образованием аморфизованной фазы и формированием ближнего порядка в ней. Вертикальные штрихи – рассчитанные положения пиков.

Реализация WPPM метода в программном пакете PM2K пока позволяет в полном объеме проводить обработку нейтронных данных, полученных на дифрактометре с монохроматическим пучком. Спектры, измеренные на TOF-дифрактометре, включая HRFD, могут обрабатываться, но без учета правильных весов экспериментальных интенсивностей. Тем не менее, мы предприняли попытку провести анализ данных по порошкам NbC-0 и NbC-10, нейтронограммы которых были измерены на HRFD и HRPT, с помощью PM2K. При расчете профилей дифракционных пиков помимо функции разрешения учитывалось распределение кристаллитов по размерам и наличие некоторой плотности дислокаций. Распределение по размерам задавалось в виде логнормального распределения. Для NbC-0 рассчитанный средний размер кристаллитов, $\langle L \rangle_v = 2230$ Å, близок к значению $L = 2550$ Å, определенному по методу Вильямсона – Холла. Для порошка NbC-10 получены величины $\langle L \rangle_v = 169$ Å и 142 Å по данным HRPT и ФДВР и логнормальные распределения, показанные на **рис. 22**. Это означает, что обработка данных с HRFD даже без учета правильных весов позволяет получить разумные результаты.



Таким образом, высокоэнергетический размол веществ типа NbC_y может приводить к появлению фракций заметно различающихся по среднему размеру кристаллитов. Стандартный анализ эффектов уширения дифракционных пиков на уровне полных или интегральных ширин дает правильную общую картину, но позволяет получить только приближенные количественные оценки микроструктурных параметров. Детальный анализ профилей дифракционных пиков с привлечением метода WPPM дает возможность выявить численные характеристики возникающей микроструктуры в более подробном виде.

Проведена доработка имеющейся модельной ячейки для исследования электродных материалов в лабораторных условиях и методики ее заполнения. Выполнены три процедуры заправки ячейки тестовым электродным материалом. Проведены проверочные нейтронные эксперименты in-situ на дифрактометрах ФДВР и РТД. Выяснено, что электродный материал должен по возможности содержать наименьшее возможное количество связывающего вещества (на основе фторполимера) и углеродной сажи. Дифракционная картина значительно

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

улучшится при экранировании пружины с помощью нитрида бора. Наибольшую статистику нейтронных экспериментальных данных от катодного материала при стандартно заполненной ячейке удалось получить на дифрактометре РТД с использованием кольцевого детектора. Начата работа по созданию ячейки на основе кремниевых экранов и многослойной компоновкой электродных материалов типа "pouch cell".

На рефлектометре РЕФЛЕКС исследовано влияние окисного слоя титановых пленок, покрывающих поляризующие суперзеркала на поляризующую эффективность (рис. 24). Верхний слой титана призван защищать слои кобальта и железа, составляющих основу суперзеркала, от окисления. При этом на самой титановой пленке образуется окисный слой с примерно нулевой ПДР. Таким образом, возникающий окисный слой титана не только выполняет защитную функцию, он становится еще практически прозрачным для тепловых нейтронов, не влияя, таким образом, на отражательные свойства самого суперзеркала. На рефлектометре РЕФЛЕКС проведены измерения коэффициентов отражения для двух спиновых состояний нейтрона для серии образцов с разной толщиной окисного слоя. Результаты экспериментов в настоящее время обрабатываются, готовится публикация.

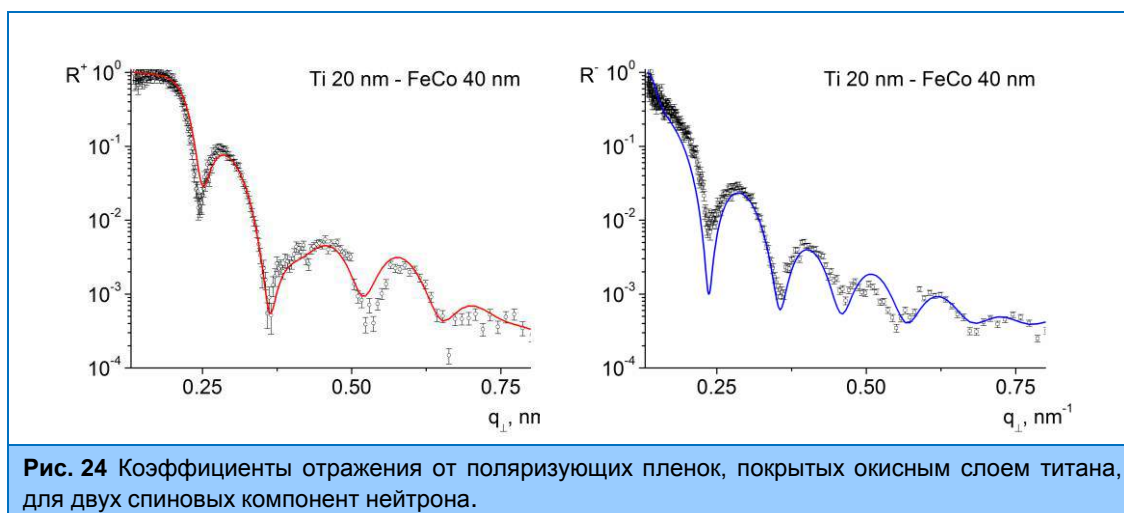


Рис. 24 Коэффициенты отражения от поляризующих пленок, покрытых окисным слоем титана, для двух спиновых компонент нейтрона.

В программном пакете VITESS проведено моделирование экспериментов по спин-эхо малоугловому рассеянию на идеальных однородных шариках диаметром в несколько десятков нанометров. Схема спин-эхо спектрометра, реализованная в пакете VITESS соответствовала создаваемой спин-эхо установке на 9-м канале реактора ИБР-2. Кривые рассеяния, полученные в результате Монте-Карло моделирования (рис. 25), удовлетворительно соответствовали теоретическим расчетам.

На рефлектометре РЕМУР проведены эксперименты по получению системы микропучков нейтронов с различными длинами волн и распределением интенсивности по углу рассеяния для резонансов $n=0, 1, 2$ при углах скольжения начального пучка 2.55, 3.27, 5.82 и 6.92 мрад (рис. 26). Трёхслойная слоистая структура (плоский волновод) преобразует обычный коллимированный пучок нейтронов шириной около 0.1 мм в узкий расходящийся микропучок нейтронов шириной около 0.1 мкм. С помощью такого узкого зонда можно сканировать локальные микроструктуры с высоким пространственным разрешением. Нейтроны падают на поверхность плёнки, проходят внутрь волноводного слоя, распространяются вдоль плёнки в волноводном слое (каналюют) и выходят через торец в виде узкой полосы. При этом расходимость микропучка определяется условиями фраунгоферовской дифракции на узкой щели.

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

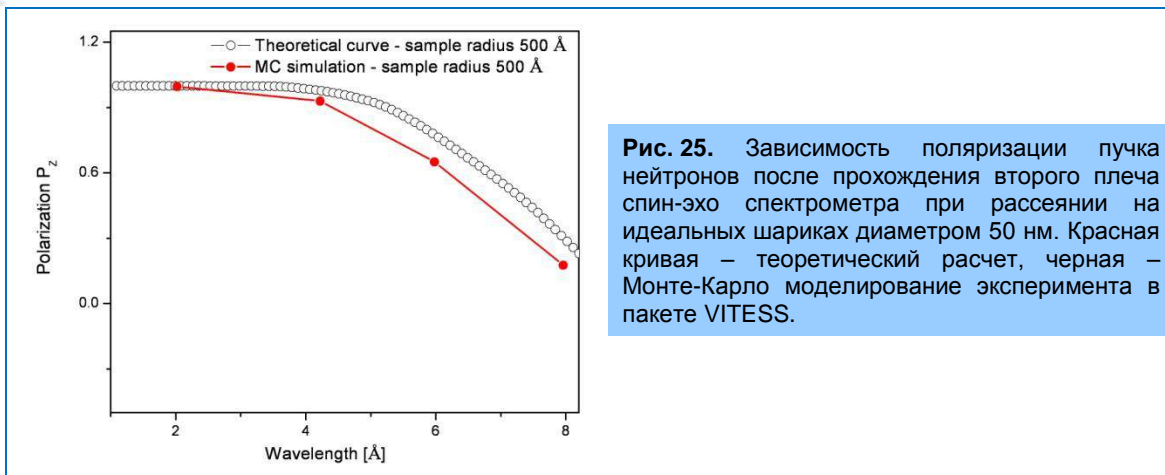


Рис. 25. Зависимость поляризации пучка нейтронов после прохождения второго плеча спин-эхо спектрометра при рассеянии на идеальных шариках диаметром 50 нм. Красная кривая – теоретический расчет, черная – Монте-Карло моделирование эксперимента в пакете VITESS.

Внутри волновода наблюдается явление резонансного усиления нейтронной плотности с образованием нейтронных стоячих волн. Поэтому на выходе волновода микропучок имеет резонансную длину волны в узком диапазоне значений. На постоянных источниках нейтронов длина волны фиксирована и ограничена величиной около 4 Å, а на импульсных источниках длину волны микропучка можно изменять с помощью угла скольжения начального пучка. Полученные экспериментальные данные соответствуют предсказаниям теории. С помощью метода времени пролёта можно легко настроить волновод на необходимую длину волны микропучка, в том числе и на длину волны более 4 Å. А при выборе определённых областей по углу рассеяния можно регистрировать одновременно несколько микропучков.

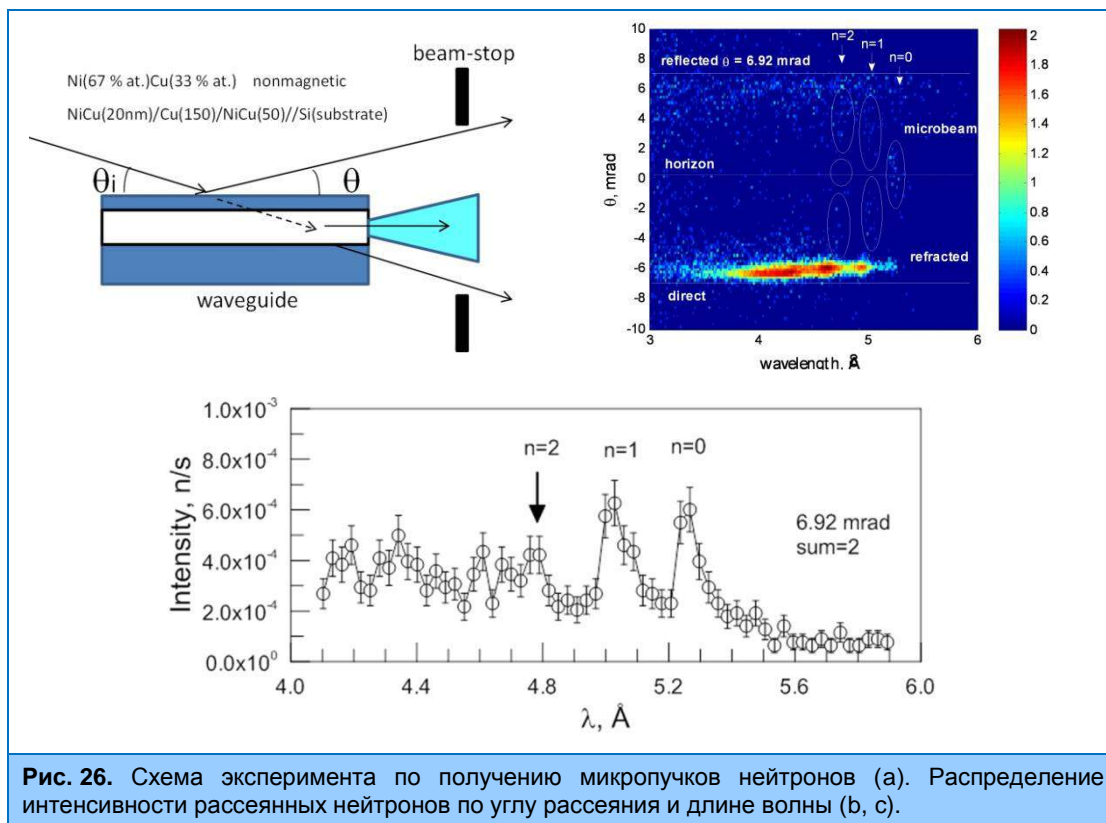


Рис. 26. Схема эксперимента по получению микропучков нейтронов (а). Распределение интенсивности рассеянных нейтронов по углу рассеяния и длине волны (b, c).

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Литература

1. Kozlenko D.P., Kichanov S. E., Lukin E. V., Dang N. T., Dubrovinsky L. S., Liermann H.-P., Morgenroth W., Kamynin A. A., Gridnev S. A., Savenko B. N., Pressure-induced polar phases in relaxor multiferroic $\text{PbFe}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$. (2014) *Physical Review B*, v. 89, p. 174107 (1-7).
2. Burzo E., Vlais P., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Dang N.T., Rutkauskas A.V., Savenko B.N., Magnetic properties, electronic structures and pressure effects of $\text{Ho}_x\text{Y}_{1-x}\text{Co}_2$ compounds. (2014) *Journal of Alloys and Compounds*, v. 584, pp. 393–401.
3. Kozlenko D.P., Burzo E., Vlais P., Kichanov S.E., Rutkauskas A.V., Savenko B.N., Sequential Cobalt Magnetization Collapse in ErCo_2 : Beyond the Limits of Itinerant Electron Metamagnetism. (2014) *Scientific Reports*, in consideration.
4. Melníková L. , Petrenko V.I. , Avdeev M.V. , Garamus V.M. , Almásy L., Ivankov O.I. , Bulavin L.A. , Mitroová Z., Kopčanský P., Effect of iron oxide loading on magnetoferritin structure in solution as revealed by SAXS and SANS. (2014) *Colloids and Surfaces B*, in press.
5. Kopcansky P., Siposova K., Melnikova L., Bednarikova Z., Timko M., Mitroova Z., Antosova A., Garamus V.M., Petrenko V.I., Avdeev M.V., Gazova Z., Destroying activity of magnetoferritin on lysozyme amyloid fibrils. (2014) *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, in press.
6. Melnikova L., Petrenko V.I., Avdeev M.V., Ivankov O.I., Bulavin L.A., Garamus V.M., Almásy L., Mitroova Z., Kopcansky P., SANS contrast variation study of magnetoferritin structure at various iron loading. (2014), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* in press.
7. Petrenko V.I., Avdeev M.V., Garamus V.M., Bulavin L.A., Kopcansky P., Impact of polyethylene glycol on aqueous micellar solutions of sodium oleate studied by small-angle neutron scattering. (2014) *Colloids and Surfaces A*, accepted.
8. Prylutskyy Yu.I., Petrenko V.I., Ivankov O.I., Kyzyma O.A., Bulavin L.A., Litsis O.O., Evstigneev M.P., Cherepanov V.V., Naumovets A.G., Ritter U.. On the origin of C60 fullerene solubility in aqueous solution. (2014) *Langmuir* v.30, p. 3967–3970.
9. Tomchuk O.V., Bulavin L.A., Aksenov V.L., Garamus V.M., Ivankov O.I., Vul' A.Ya., Dideikin A.T., Avdeev M.V., Small-angle scattering from polydisperse particles with a diffusive surface.(2014) *Journal of Applied Crystallography*, v.47, p.642–653.
10. Tatarskiy D.A., Petrenko A.V., Vdovichev S.N., Udalov O.G., Nikitenko Yu.V., Fraerman A.A., Nonreciprocal transmission of neutrons through the noncoplanar magnetic system. (2014) *Physical Review Letter*, submitted.
11. Киселев М.А., Земляная Е.В., Жабицкая Е.И., Аксенов В.Л., Исследование однослойных везикул ДМФХ в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. (2015) *Кристаллография*, т. 60, №1, с.140-150.
12. Schmelzer J.W.P., Tropin T.V., Kinetic criteria of glass-formation, pressure dependence of the glass-transition temperature, and the Prigogine-Defay ratio. (2014)*Journal of Non-Crystalline Solids*, (in press).
13. Tropin T.V., Schulz G., Schmelzer J.W.P., Schick C., Heat capacity measurements and modeling of polystyrene glass transition in a wide range of cooling rates. (2014) *Journal of Non-Crystalline Solids*, (in press).
14. Druzbicki K., Natkaniec I., Vibrational Properties of Water Retained in Graphene Oxide. (2014)

Chemical Physics Letters, v. 600, p.106–111.

15. Bokuchava G.D., Papushkin I.V., Petrov P.I., Residual Stress Study by Neutron Diffraction in the Charpy Specimens Reconstructed by Various Welding Methods. (2014) Comptes rendus de l'Académie Bulgare des Sciences, v. 67, p. 763-768.
16. Scheffzuek C., Ullemeyer K., Vasin R., Naumann R., Schilling F.R. Strain and texture investigations by means of neutron time-of-flight diffraction: application to polyphase gneisses. (2014) In: Holden T.M., Muránsky O. & Hamelin C.J. (Eds.): Mechanical Stress Evaluation by Neutrons and Synchrotron Radiation VII. Materials Science Forum v. 777, p. 136-141.
17. Lychagina T., Nikolayev D., Sanin A., Tatarko J., Ullemeyer K., Investigation of wheel steel crystallographic texture changes due to modification and thermo-mechanical treatment. (2014) Materials Science and Engineering, Dresden.
18. Курлов А.С., Бобриков И.А., Балагуров А.М., Гусев А.И., Анизотропия деформационных искажений в нанокристаллических порошках нестехиометрического карбида ниобия $NbC_{0.93}$. (2014) Письма в ЖЭТФ, т. 100,(в печати).