

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

Полный отчет за 2021 г., научные и методические результаты

Основные цели исследований по теме состояли в изучении взаимосвязи между особенностями структурного строения и динамики новых функциональных материалов и наносистем и их физическими свойствами на микроскопическом уровне, имеющих важное значение для развития современных представлений в области физики конденсированного состояния, материаловедения, химии, биофизики, геофизики и развития современных технологий в сфере электроники, компактных источников тока, фармакологии, медицины, 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.

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, МГУ, ИФМ УрО РАН, ИК РАН, ИЯИ РАН, МФТИ, КФУ и др.

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

- Исследование структуры и свойств новых неорганических и органических функциональных материалов,
- Исследование структурных и магнитных свойств материалов в экстремальных условиях,
- Изучение особенностей физико-химических процессов в функциональных материалах в режиме реального времени,
- Компьютерное моделирование структуры и свойств новых функциональных материалов и наносистем,
- Исследование структурных и магнитных свойств слоистых наноструктур,
- Исследование структуры углерод- и кремнийсодержащих наноматериалов,
- Исследование молекулярной динамики функциональных материалов,
- Исследование дисперсных систем и сложных жидкостей в объеме и на межфазных границах,
- Исследование структурной организации полимерных наноматериалов,
- Исследование надмолекулярной структуры и функциональных характеристик биологических наносистем,
- Исследования структуры и свойств липидных мембран и комплексов,
- Исследования структуры и свойств биогибридных комплексов,
- Исследование внутренних напряжений и микродеформаций в конструкционных материалах и промышленных изделиях,
- Исследование особенностей внутреннего строения объектов культурного и природного наследия, конструкционных материалов промышленных изделий,
- Исследование текстуры и свойств минералов и горных пород, конструкционных материалов.

## 1. Научные результаты

### 1.1. Структурные исследования новых оксидных, интерметаллических и наноструктурированных материалов

Слоистые ван-дер-ваальсовские магнетики типа  $\text{CrX}_3$  ( $X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) являются перспективным классом слоистых материалов – аналогов графена, в которых магнитные атомы образуют квазидвумерные слабозаимодействующие слои с гексагональными ячейками. Недавние исследования двумерных форм этих материалов показали, что магнитное упорядочение в них может сохраняться при достаточно высоких температурах вплоть до предела монослоя. Кроме того, в данных материалах обнаружено большое разнообразие новых физических явлений при изменении термодинамических параметров (температуры и давления), включая сверхпроводимость, топологические спиновые возбуждения, скирмионные состояния, переход диэлектрик-металл, спиновый кроссовер.

С помощью нейтронной дифракции (дифрактометр ДН-6) и взаимодополняющего метода рамановской спектроскопии проведены исследования структурных, магнитных и колебательных свойств модельного представителя семейства ван-дер-ваальсовских магнетиков  $\text{CrX}_3 - \text{CrBr}_3$  [1]. Магнитные моменты ионов Cr, формирующие графеноподобную магнитную решетку в слоях Br-Cr-Br, упорядочиваются ферромагнитно при температуре  $T_C = 37$  К. В области  $T_C$  обнаружено аномальное поведение структурных характеристик (рис. 1), включая параметры кристаллической решетки, межатомные расстояния и углы. Кроме того, ниже этой температуры в  $\text{CrBr}_3$  наблюдалось изменение характера теплового расширения с положительного на отрицательный как всего объема кристаллической решетки, так и квазидвумерных ван-дер-ваальсовских слоев. Следует отметить, что отрицательное тепловое расширение сравнительно редкий физический эффект, обнаруженный лишь в нескольких классах кристаллических материалов. Кроме того, графен также демонстрирует отрицательное тепловое расширение, причем коэффициент линейного теплового расширения атомных слоев в  $\text{CrBr}_3$  в области  $T < T_C$ ,  $\alpha_l = -1.6 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ , оказался близким к соответствующей величине для графена в области низких температур. Полученный результат свидетельствует о хорошей совместимости материалов типа  $\text{CrX}_3$  и графена с точки зрения перспектив создания гетероструктур на их основе для практического использования. В области температуры магнитного упорядочения также наблюдались ярко выраженные эффекты спин-фононного взаимодействия, проявляющиеся в значительном увеличении частот колебательных мод.

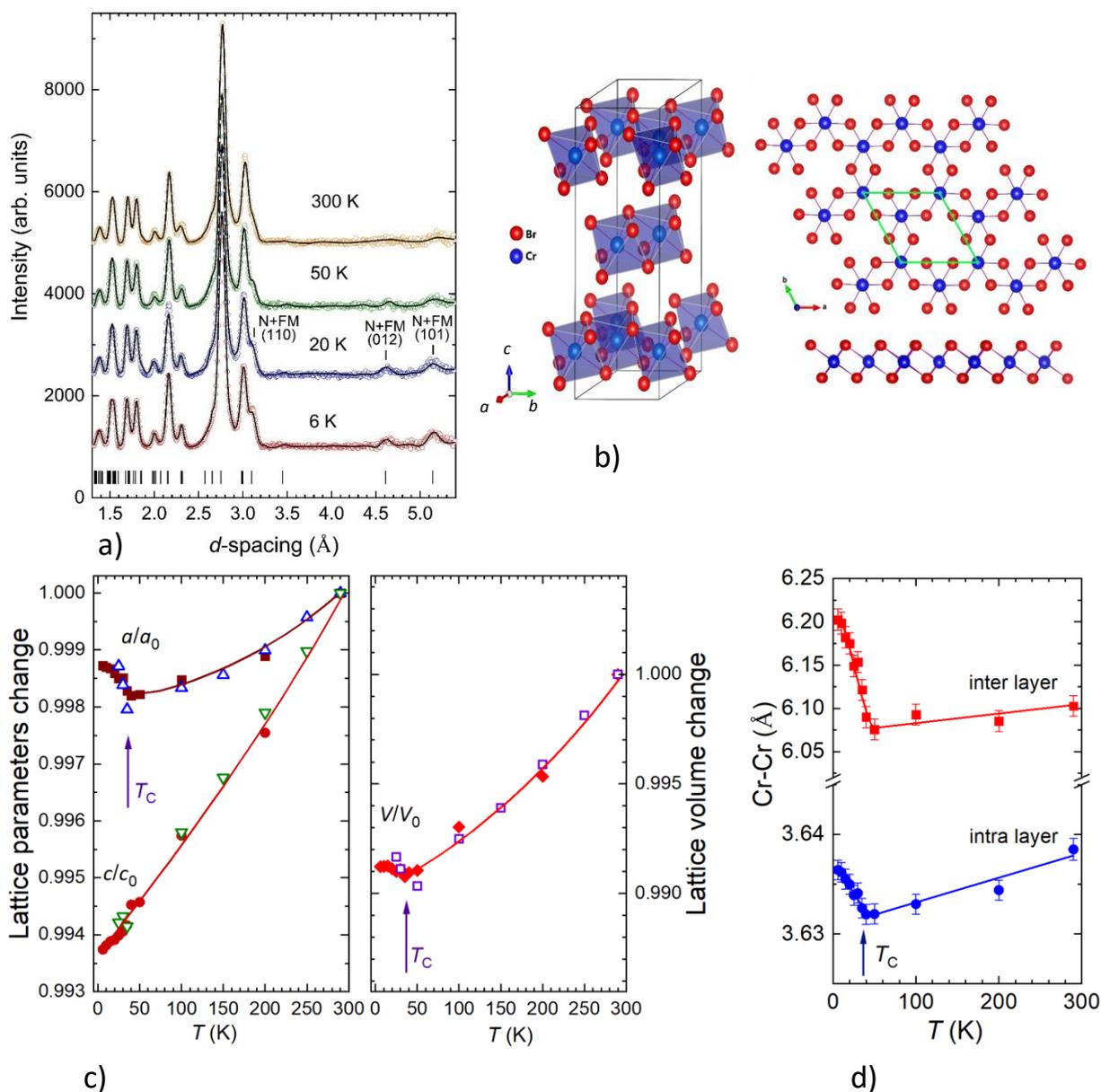


Рис. 1. a) Нейтронные дифракционные спектры CrBr<sub>3</sub>, измеренные при различных температурах и профили, рассчитанные по методу Ритвельда. b) Ромбоэдрическая кристаллическая структура CrBr<sub>3</sub> симметрии R $\bar{3}$ . c) Температурные зависимости параметров и объема элементарной ячейки кристаллической решетки CrBr<sub>3</sub>, отнормированные на соответствующие значения при комнатной температуре. d) Температурные зависимости расстояний между магнитными ионами Cr внутри ван-дер-ваальсовских слоев (intra-layer) и между слоями (inter-layer).

Проведено исследование структурных и магнитных свойств мультiferроика BaYFeO<sub>4</sub> с помощью нейтронной дифракции (ДН-12), Мессбауэровской спектроскопии, методов изучения макроскопических магнитных свойств в широкой области температур и внешних магнитных полей, рис. 2 [2]. В BaYFeO<sub>4</sub> наблюдается спин-индуцированная спонтанная сегнетоэлектрическая поляризация, связанная с особенностями симметрии магнитных состояний. Обнаружено существование магнитоупорядоченных состояний типа волны спиновой плотности с вектором распространения  $k_1 = (0, 0, 1/3)$  и температурой Нееля  $T_{N1} \approx 50$  К и циклоиды,  $k_2 = (0, 0, 0.35)$ ,  $T_{N2} \approx 35$  К, а также магнитно разупорядоченной фазы спинового стекла,

возникающей ниже  $T = 17$  К. Показано, что  $\text{BaYFeO}_4$  является редким примером мультиферроика, в формировании магнитоэлектрических свойств которого большую роль играет разупорядоченная фаза спинового стекла.

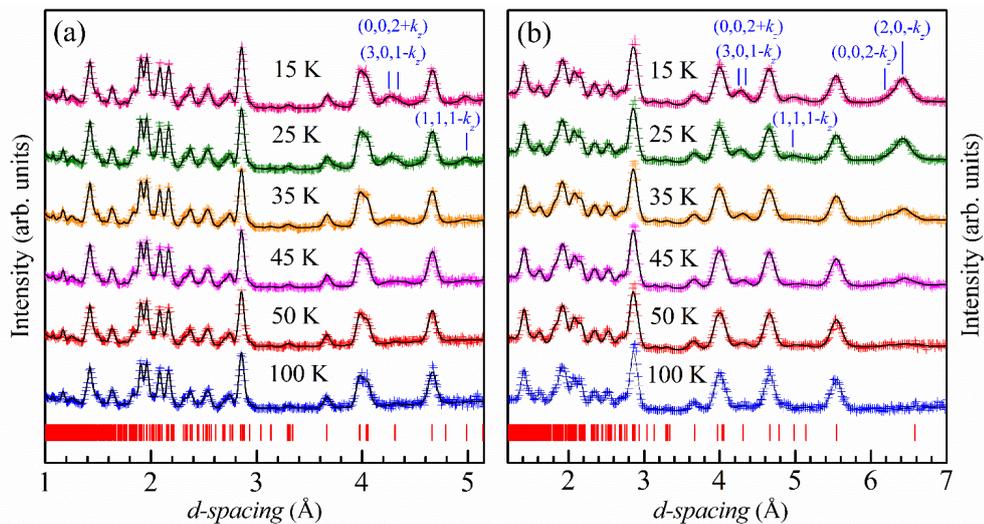
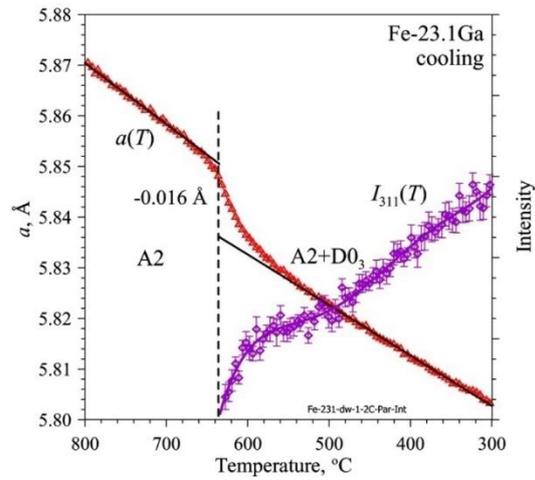
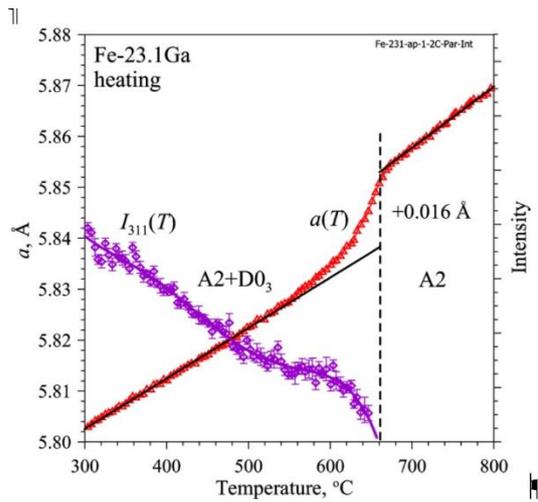
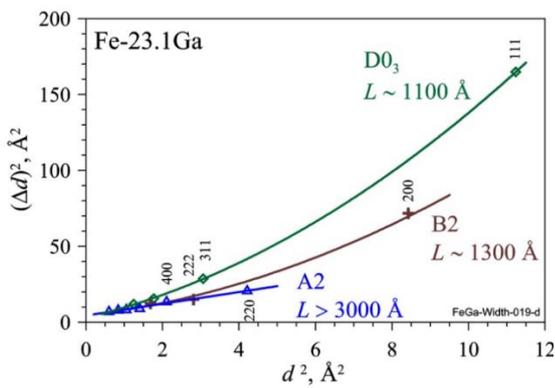
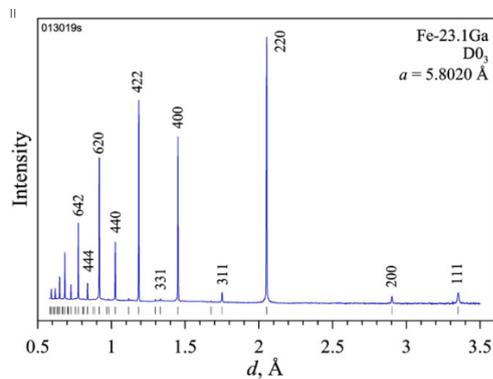


Рис. 2. Нейтронные дифракционные спектры  $\text{BaYFeO}_4$  при различных температурах, измеренных при углах рассеяния  $2\theta = 90^\circ$  (a) и  $45.5^\circ$  (b) и обработанные по методу Ритвельда. Показаны экспериментальные точки и рассчитанные профили. Вертикальные штрихи внизу соответствуют рассчитанным положениям дифракционных пиков атомной структуры. Вверху также обозначены положения и приведены индексы наиболее интенсивных магнитных пиков.

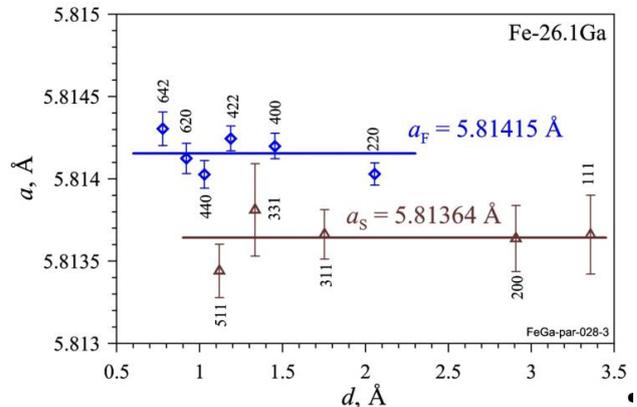
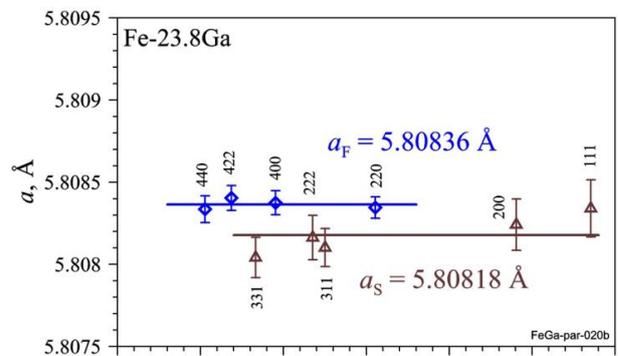
С помощью нейтронной дифракции высокой интенсивности и высокого разрешения (дифрактометр ФДВР) для сплавов  $\text{Fe-xAl}$  и  $\text{Fe-xGa}$  проведен анализ эффектов когерентного кластерного упорядочения в зависимости от концентрации Al или Ga и при фазовых переходах порядок-беспорядок при изменении температуры [3]. Формирование упорядоченной структуры приводит к уменьшению параметра элементарной ячейки и его скачкообразному изменению на величину  $\Delta a/a \approx 0.001$  (рис. 3). Из нейтронных дифракционных данных следует, что в определенном интервале содержания Al или Ga в сплаве возможно формирование особого типа микроструктуры, сочетающей объемные кластеры упорядоченной фазы, дисперсно внедренные в неупорядоченную или частично упорядоченную матрицу (рис. 3). Характерные размеры областей когерентного рассеяния в кластерах составляют несколько сотен Å, увеличиваясь при отжиге. Матрица и кластеры имеют высокую степень когерентности, проявляющуюся в соответствии параметров решетки с высокой точностью ( $\Delta a/a \leq 0.0001$ ) (рис.3). Искажения и, тем более, расщепления профилей дифракционных пиков при этом не наблюдается. Расщепления пиков, зарегистрированные в поверхностных слоях сплавов или в тонких лентах методами рентгеновской или электронной дифракции, связаны с формированием некогерентных двухфазных состояний. Различия параметров кристаллических решеток этих фаз соответствуют ожидаемым и превышают различия параметров фаз, образующих кластерную микроструктуру, в десятки раз. Это означает, что двухфазные состояния ( $A_2 + B_2$ ,  $A_2 + D0_3$ ,  $B_2 + D0_3$ ), наблюдаемые в поверхностном слое (рентгеновская или электронная дифракция) и в объеме (дифракция нейтронов) сплавов  $\text{Fe-Al}$  и  $\text{Fe-Ga}$  имеют совершенно разную природу и причины возникновения. Следовательно, предположения о возможной взаимосвязи повышенной магнитоэлектричности  $\text{Fe-Al}$  и  $\text{Fe-Ga}$  сплавов с наблюдаемыми в рентгеновских или электронных дифракционных экспериментах двухфазными состояниями не являются обоснованными.



a)



b)



c)

Рис. 3. а) Температурная зависимость параметра элементарной ячейки (левая шкала) и интенсивности сверхструктурного пика 311 (правая шкала) состава Fe-23.8Ga в ходе его нагрева (слева) и охлаждения (справа) со скоростью 2 °C/мин в области структурного перехода A2 + D0<sub>3</sub> → A2. Также показана линейная интерполяция экспериментальных точек в интервалах температур до и после фазового перехода. б) Дифракционный спектр (вверху) и построения Вильямсона-Холла (внизу) для ширин дифракционных пиков состава Fe-23.1Ga. Индексы Миллера приведены для фазы D0<sub>3</sub>, величины Δd умножены на 10<sup>3</sup>. в) Параметры элементарных ячеек матрицы (ромбы, a<sub>F</sub>) и кластеров (треугольники, a<sub>S</sub>) для составов Fe-23.8Ga и Fe-26.1Ga в состоянии “as cast”, определенные из положений отдельных (основных и сверхструктурных) дифракционных пиков. Для матрицы (фаза A2) указано удвоенное значение параметра.

Проведено исследование кристаллической структуры объемного образца закаленного сплава Fe-27Ga методом нейтронной и рентгеновской дифракции, с целью установления распределения фазового состава по объему материала [4]. Результаты нейтронного дифракционного эксперимента подтвердили, что объемная структура образца представляет собой полностью упорядоченную фазу D03. Применение рентгеновской дифракции с длительной временной экспозицией позволило прецизионно исследовать поверхностный слой, толщиной ~4-16  $\mu\text{m}$ , с различными методами подготовки поверхности. Полученные результаты подтвердили наличие упорядоченной фазы D03, а также выявили образование при нормальных условиях дополнительных фаз с менее упорядоченной структурой B2 и A2. Обнаружено, что соотношение и объемный вклад выявленных фаз зависит от длительности контакта сплава с воздушной атмосферой. Дополнительные фазы присутствуют в малом количестве, только в поверхностном слое, что было подтверждено использованием разных длин волн характеристического рентгеновского излучения. Полученные с высокой статистикой нейтронные и рентгеновские дифракционные данные позволяют также исключить в исследованном сплаве существование фазы m-D03 в дифракционно-значимых количествах, применяемой рядом исследователей для объяснения эффекта магнитострикции в Fe-Ga интерметаллидах.

Также исследована эволюция структурных фаз состава Fe-38.4Ga, содержащего интерметаллид  $\text{Fe}_{13}\text{Ga}_9$  (~70%) и разупорядоченную фазу A2 (или частично упорядоченную фазу B2) (~30%) с помощью нейтронной дифракции высокого разрешения и в режиме непрерывного сканирования по температуре [5]. Установлено, что при первом нагреве со скоростью 2  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$  фаза  $\text{Fe}_{13}\text{Ga}_9$  стабильна вплоть до  $T \approx 550$   $^{\circ}\text{C}$ , затем происходит переход в  $\alpha\text{-Fe}_6\text{Ga}_5$  и  $\text{L}_{12}$  фазы. С этой же температуры начинается переход типа беспорядок-порядок  $\text{A2} \rightarrow \text{B2}$ , завершающийся к  $T \approx 750$   $^{\circ}\text{C}$ . При охлаждении и втором цикле нагрева-охлаждения фаза  $\text{Fe}_{13}\text{Ga}_9$  не образуется. Выполнено уточнение некоторых структурных параметров выявленных фаз и показано, что значения температур фазовых переходов в сплаве зависят от его температурной предыстории.

Методом дифракции рентгеновских лучей (дифрактометр PANalytical Empyrean) и нейтронов (дифрактометр ФДВР) исследован процесс образования сигма-фазы на поверхности и в объеме образца сплава Fe-46Cr (рис. 4). Измерения на обоих дифрактометрах выполнялись в режиме реального времени в процессе быстрого (со скоростью 20  $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ) нагрева образца до заданной температуры и последующей выдержке при этой температуре. Кинетика формирования сигма-фазы описана в рамках модели Авраами. По данным нейтронных измерений, при 650 $^{\circ}\text{C}$  в течение 5 часов упорядоченная A2 фаза полностью переходит в сигма-фазу без образования каких-либо промежуточных фаз. При температуре 700 $^{\circ}\text{C}$  за 10 часов выдержки в сигма-фазу преобразуется ~0.64 фазы A2. При 700 $^{\circ}\text{C}$  практически весь регистрируемый процесс образования сигма-фазы, начиная с момента ее заметного роста происходит при постоянном параметре Авраами  $n \approx 2.00$ . Напротив, при 655 $^{\circ}\text{C}$  кинетический параметр  $n$  не является постоянным в ходе всего перехода, что говорит об изменениях механизма роста сигма-фазы в процессе ее формирования. В отличие от нейтронных дифракционных результатов, рентгеновские данные демонстрируют частичную и более медленную трансформацию A2 фазы в сигма-фазу. Интенсивности пиков сигма-фазы, измеренные спустя 5 часов выдержки при 655 $^{\circ}\text{C}$ , начинают уменьшаться, тогда как интенсивность пика (110) A2 фазы, наоборот, начинает вновь увеличиваться. Полученные результаты позволяют предположить, что в приповерхностных слоях образца в условиях вакуума постепенно формируется дефицит по хром, приводящий к изменениям в структуре фаз с последующей дестабилизацией сигма-фазы и обратной ее трансформации в кубическую фазу.

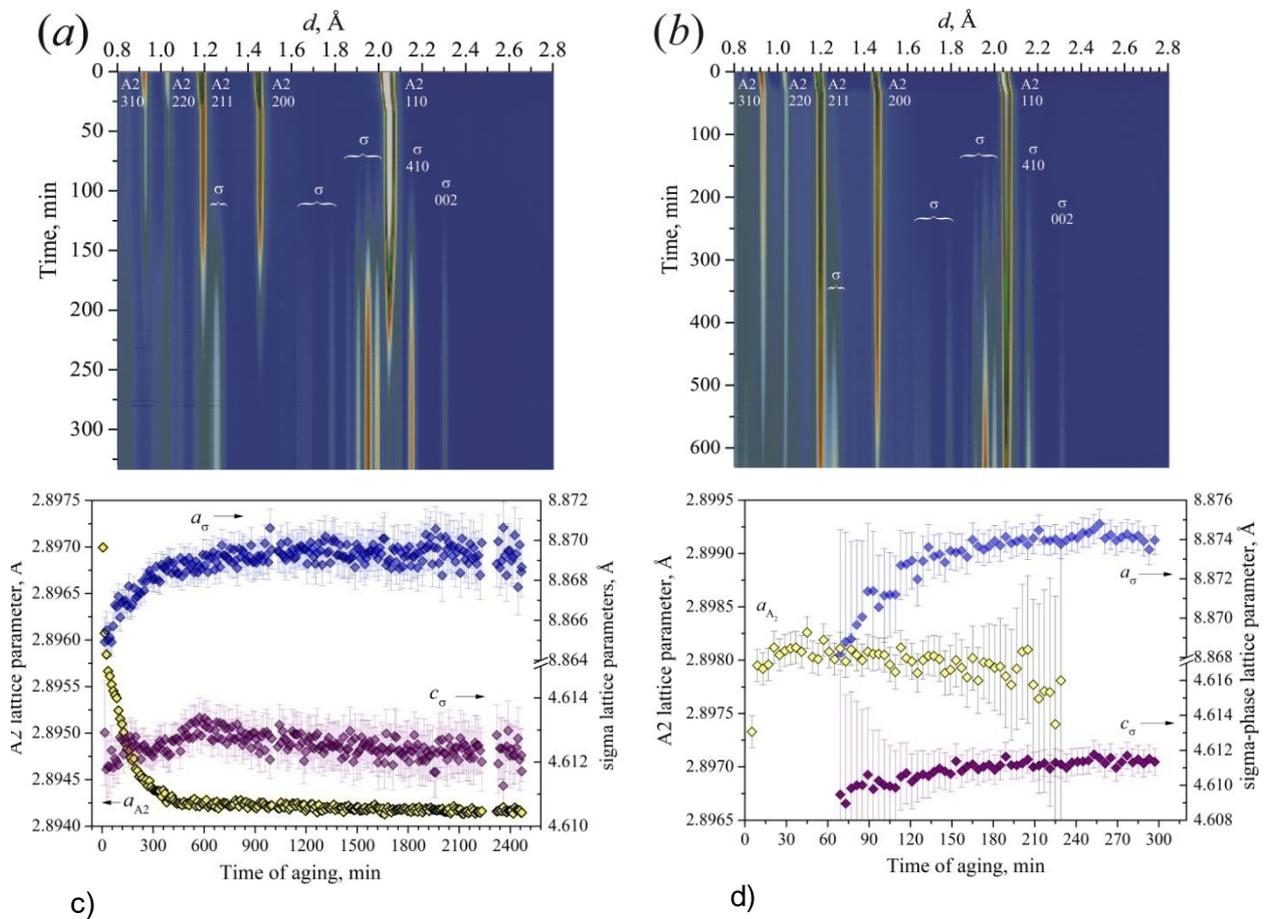


Рис. 4. 2D эволюция нейтронных дифракционных спектров при быстром нагреве и изотермической выдержке при 655°C (a) 700°C (b) сплава Fe–46Cr. Изменения параметров решетки A2 и сигма-фазы в ходе изотермической выдержки при 655°C по данным рентгеновской дифракции (c) и дифракции нейтронов (d).

Проведены исследования структуры и фазового состояния сплавов с эффектом памяти формы NiTiHf(Zr,V) и MnCu(Cr,Al,Ni) в широком диапазоне температур с помощью методов дифракции рентгеновского излучения и нейтронов. В основе данного эффекта, имеющего широкий спектр технологических применений, лежит обратимое термоупругое мартенситное превращение. Одной из актуальных задач является создание материалов, способных проявлять эффект памяти формы при повышенных температурах, с температурой начала обратного мартенситного превращения (ТМ) выше  $\approx 120^{\circ}\text{C}$ , обладающих высокой стабильностью характеристик, величиной возвращаемой деформации и др. Выбранные для исследований сплавы являются весьма перспективными в это отношении, однако их легирование различными элементами, а также процессы термомеханической обработки существенно влияют на фазовый состав, структуру, микроструктуру и характеристики термоупругого мартенситного превращения. Данные *in situ* нейтронной дифракции позволяют заключить, что сплав Ni50.3Ti29.7Hf10Zr10 при комнатной температуре содержит около 10% остаточного аустенита, который лишь частично упорядочен. Присутствие остаточного аустенита, не участвующего в мартенситном превращении, ухудшает характеристики материала. При росте температуры с началом обратного мартенситного превращения доля аустенита и степень его упорядочения растут, и при температурах выше  $175^{\circ}\text{C}$  материал представляет собой практически полностью упорядоченный аустенит. Интересно, что эффект наблюдается только в сплаве, содержащем Zr. По данным рентгеновской дифракции исследован фазовый состав сплава (Ni50Ti30Hf20)V5 в зависимости от режима термообработки. Во всех изученных образцах присутствуют моноклинный мартенсит B19' и гексагональная фаза Лавеса. На рентгенограммах образцов, прошедших термообработку, присутствует единственный непроиндексированный широкий дифракционный пик, который может указывать на формирование частиц H-фазы.

In situ нейтронные дифракционные эксперименты позволили уточнить температуры магнитного превращения в сплаве Mn-10Cu-4Cr. При нагреве в течение 8 ч. при 440°C превращение происходит при  $150.7 \pm 0.4^\circ\text{C}$ , при охлаждении – при  $128.7 \pm 1.0^\circ\text{C}$ . Это на  $\sim 20^\circ\text{C}$  ниже, чем в бинарном Mn-13at.%Cu, а температурный гистерезис наоборот больше на  $\approx 7^\circ\text{C}$ . Тетрагональное искажение в тройном сплаве также выше, чем в бинарном Mn-13at.%Cu, и достигает значений  $1-c/a \approx 0.05$  при комнатной температуре. В отличие от бинарного сплава, в котором тетрагональное искажение пропорционально квадрату параметра дальнего магнитного порядка, в Mn-10Cu-4Cr тетрагональное искажение при фазовом переходе увеличивается скачком. Возможными причинами этого эффекта в тройном сплаве могут быть изменение микроструктуры материала по сравнению с двойным сплавом, изменение фазового состава (выпадение большого количества  $\alpha\text{-Mn}$ ) либо влияние магнитного момента хрома на магнитное взаимодействие [6,7].

Продолжены комплексные исследования образцов твердого раствора стронциевых гексаферритов  $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$  ( $x = 0.1; 0.6 \text{ и } 1.2$ ) [8]. Методами нейтронной дифракции исследованы их структурные особенности в интервале температур от 1.5 К до 300 К (рис. 5, а и б). Сравнение кристаллической структуры стронциевых гексаферритов в рамках centrosymmetric ( $P6_3/mmc$ ) и noncentrosymmetric ( $P6_3mc$ ) пространственной групп указывает на различную степень искажения ( $S_{(\text{FeO}_6)}$ ) соседних кислородных полиэдров (рис.5, с и d). Установлено наличие anomalously low thermal expansion parameters of the unit cell in the temperature range from 1.5 K to 300 K (рис.5, e), что может быть обусловлено сменой режима взаимных вращений и наклонов кислородных полиэдров по аналогии со сложными перовскитоподобными оксидами. В образцах  $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$  ( $x = 0.1; 0.6 \text{ и } 1.2$ ) обнаружено возникновение спонтанной поляризации (рис. 5, f), что противоречит описанию его кристаллической структуры в рамках общепринятой centrosymmetric пространственной группы  $P6_3/mmc$  (№ 194). Сам механизм возникновения спонтанной поляризации объяснен как результат несоразмерного искажения соседних кислородных полиэдров вследствие нарушения инверсионной симметрии кристаллической структуры стронциевых гексаферритов.

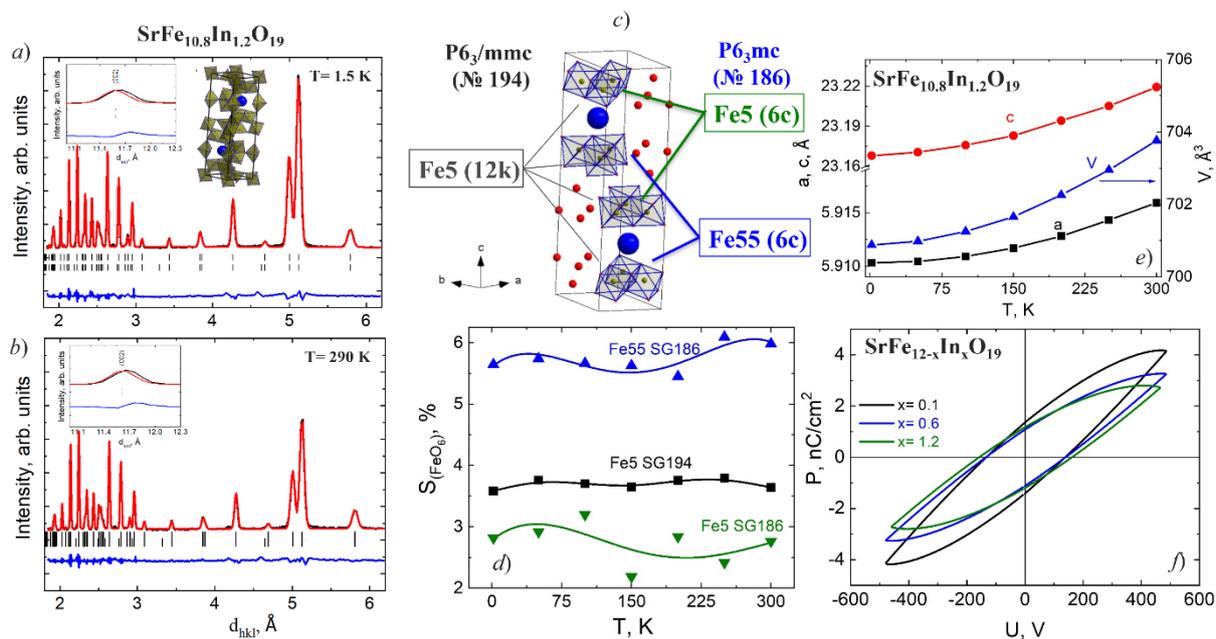


Рис. 5. Нейтронограммы поликристаллического образца  $\text{SrFe}_{10.8}\text{In}_{1.2}\text{O}_{19}$  измеренные на дифрактометре G 4-1 (LLB,  $\lambda = 2.426 \text{ \AA}$ ) при  $T = 1.5$  – (а) и  $290 \text{ K}$  – (б) и уточненные методом Ритвельда; схематическое изображение кислородных полиэдров – (с) и различная степень их искажения – (d) в случае centrosymmetric ( $P6_3/mmc$ ) и noncentrosymmetric ( $P6_3mc$ ) элементарной ячейки; температурная зависимость параметров элементарной ячейки образца  $\text{SrFe}_{10.8}\text{In}_{1.2}\text{O}_{19}$  – (е); полевая зависимость электрической поляризации – (f) образцов  $\text{SrFe}_{12-x}\text{In}_x\text{O}_{19}$  ( $x = 0.1; 0.6 \text{ и } 1.2$ ) измеренная при комнатной температуре.

Проведены исследования кристаллической и магнитной структуры соединений на основе  $\text{Li}(\text{Ni},\text{Co})\text{PO}_4$  ( $x = 0.1 - 0.5$ ) методом нейтронной дифракции в диапазоне температур 5 - 25 К (дифрактометр ДРВ), рис. 6 [9]. Соединения  $\text{LiNiPO}_4$  и  $\text{LiCoPO}_4$  демонстрируют магнитные фазовые переходы типа порядок-порядок и порядок-беспорядок при близких значениях температуры, что вызывает фундаментальный интерес к изучению физических свойств смешанных составов  $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ . Кристаллическая структура составов  $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$  описывается орторомбической структурой оливина (пространственная группа  $Pnma$ ), в которой ионы Li занимают позицию 4a (0; 0; 0), ионы Ni, Co и P занимают позиции 4c (x; 0.25; z), а ионы O расположены в двух позициях: 4c и 8d (x; y; z). Для описания магнитных структур соединений был проведен симметричный анализ базисных функций с волновым вектором  $\mathbf{k} = 0$ . Наилучшее описание нейтрограмм  $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$  достигается для АФМ упорядочения ионов Ni/Co вдоль осей  $b$  и  $a$  в рамках двух неприводимых представлений  $T_{6.2}$  и  $T_{2.1}$ , соответственно.

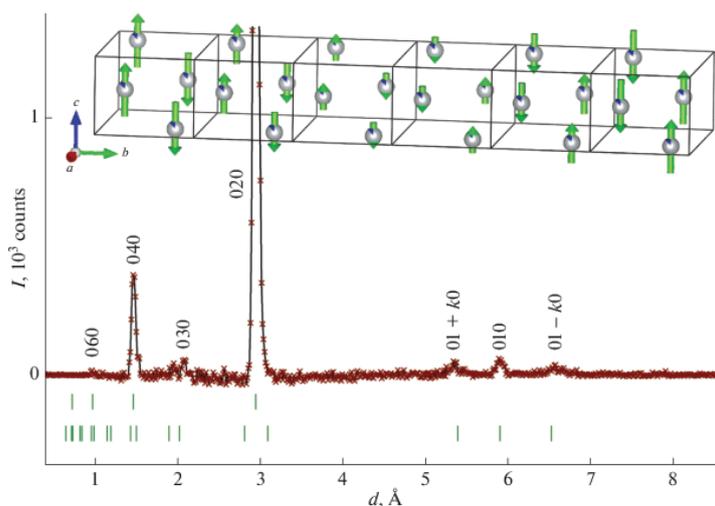


Рис. 6. Фрагмент нейтронограммы поликристаллического образца  $\text{Li}(\text{Ni},\text{Co})\text{PO}_4$  уточненный по методу Ритвельда. Показаны экспериментальные точки и вычисленный профиль. Вертикальные штрихи – рассчитанные положения дифракционных пиков, соответствующие (сверху вниз): атомной и магнитной структурам. Во вкладке приведена модель магнитного упорядочения ионов Ni/Co.

Продолжены исследования катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов и начаты исследования катодных материалов для натрий-ионных аккумуляторов. В частности, начато масштабное изучение влияния механического помола различной интенсивности на структурные и электрохимические свойства катодных материалов на основе литий-никель-марганец-кобальтового оксида. выявлено анизотропное изменение морфологии частиц NMC в процессе перемолла, нелинейная зависимость уменьшения размера частиц от времени механического воздействия в планетарной мельнице. В пределах полученных ошибок изменения в кристаллической структуре не зафиксированы для всех изученных образцов NMC. Гальваностатическое циклирование при токах 0.1С показало, что воздействие механического помола уменьшает практические значения емкости исследуемых катодных материалов. Мощностные характеристики катодных материалов, подвергшихся измельчению, в настоящий момент исследуются. Начаты работы по изучению многоступенчатых структурных трансформаций в катодных материалах для натрий ионных аккумуляторов. Одновременно изучаются три системы: слоистые катодные материалы на основе Mn или Co (например  $\text{NaMnO}_2$ ), гексацианоферраты типа голубой или белой «глазури», халькогениды титана на основе  $\text{TiSe}_2$ . С помощью самостоятельно выполненных синтезов в ЛНФ, а также в результате совместных работ с исследовательскими организациями вне ОИЯИ получены все необходимые образцы. В настоящий момент проводятся электрохимические циклирования синтезированных образцов, совершенствуется технология изготовления работающих электрохимических сборок (подборка сепаратора, электролита, анодного материала) для проведения перепроверяемых

экспериментов по изучению емкостных и мощностных характеристик катодных материалов для НИА, а также проведения дифракционных экспериментов *in situ*.

## 1.2 Исследования магнитных жидкостей и наночастиц

С помощью малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния исследованы температурные эффекты (20–70°C) в отношении структуры агрегатов в водных магнитных жидкостях с так называемой двойной стабилизацией [10]. Синтез образцов осуществлялся на основе двухслойного покрытия поверхностно-активным веществом (додецилбензолсульфоновая кислота, ДБСК) магнитных наноматериалов (магнетит и кобальт-феррит), диспергированных в воду. Системы демонстрируют различную температурную чувствительность, коррелирующую с различным магнитным взаимодействием между наночастицами. Наблюдая изменения кривых малоуглового рассеяния, которые рассматриваются в рамках фрактальной концепции, обнаружена температурно-индуцированная перестройка в системе магнетит-2ДБСК-вода от развитых агрегатов (с цепочечной затравкой) к вытянутым цепочечным агрегатам (рис. 7).

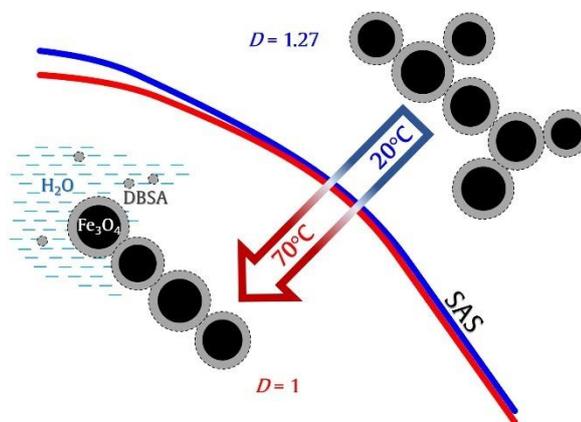


Рис. 7. Качественная иллюстрация температурного эффекта в отношении структуры кластеров магнитных наночастиц из изменения кривой рассеяния системой магнетит-2ДБСК-вода.

С помощью малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния исследована структурная организация магнитного текстиля, нанокompозитного материала, разрабатываемого для биокатализа, рис. 8. Наночастицы оксидов железа проявляют ферментативную активность и изучаются как основа искусственных ферментов. В частности, перспективным видится их внедрение в различные искусственные ткани. Так, для этой цели используется осаждение магнитных наночастиц на хлопчатобумажные изделия из магнитных жидкостей, регулируемое с помощью внешнего магнитного поля. В рамках комплексной характеристики рассмотрены наночастицы магнетита и их агрегаты, связанные на тканых хлопковых тканях, с использованием двух простых процедур модификации [11]. Одна модификация была основана на обработке текстиля магнитной жидкостью, стабилизированной хлорной кислотой, разбавленной метанолом, с последующей сушкой. Вторая процедура была основана на преобразовании сульфата двухвалентного железа с помощью микроволн при высоком pH с последующей сушкой. Подробно проанализированы структура и функциональные свойства модифицированных тканей. По результатам малоуглового рассеяния с использованием различных контрастных возможностей рентгеновского и нейтронного излучений был сделан вывод о различной структурной организации наночастиц в двух типах модифицированного текстиля. Каталитические свойства магнитного текстиля определялись по пероксидазоподобной активности по обесцвечиванию стандартного раствора кристаллического фиолетового с субстратом (сульфатная соль N) в присутствии перекиси водорода.

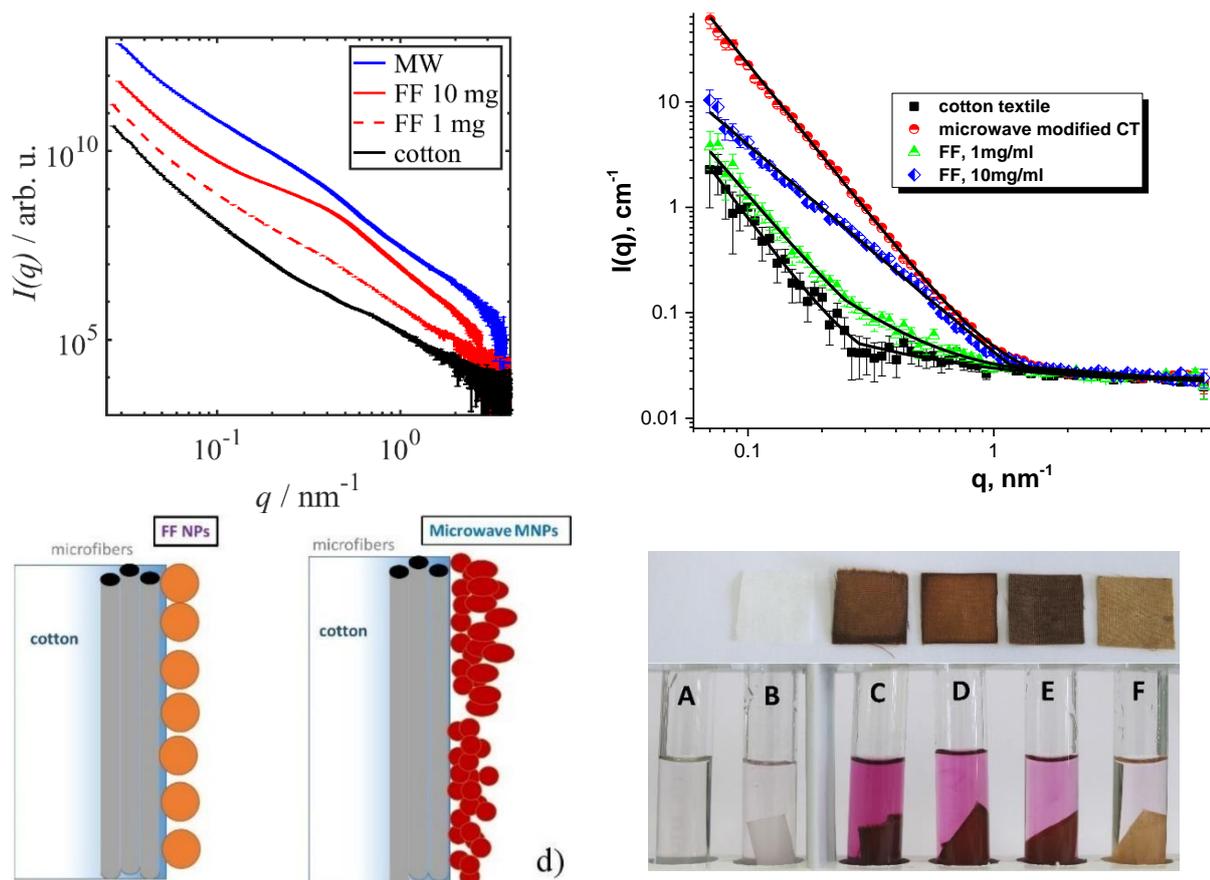


Рис. 8. Экспериментальные кривые малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния для исходного текстиля и нанокompозитного текстиля, модифицированного магнитными наночастицами с прямым осаждением магнетита из магнитной жидкости и сушкой (FF) и с микроволновым облучением при синтезе наночастиц в присутствии хлопчатобумажной ткани (MW). Показана принципиальная схема структурной организации в модифицированном нанотекстиле для двух способов осаждения. Продемонстрирована пероксидазоподобная активность магнитного текстиля в зависимости от содержания магнетита.

В группе НЕРА проводились исследования магнитных наночастиц типа ядро-оболочка на основе железа, которые, как известно, применяются в медицине для адресной доставки лекарств. В частности, исследовались физико-химические свойства наночастиц магнетита, иммобилизованных веществами, содержащих карборан и гадолиний, синтезированных для потенциального использования в нейтрон-захватной терапии рака [12].

### 1.3 Исследование углеродных наноматериалов

С помощью малоуглового рассеяния нейтронов продолжены структурные исследования наноалмазов (характерный размер частиц менее 10 нм). Практический интерес представляет наличие разветвленной ячеистой структуры внутри спекшихся агрегатов (агглютинатов) в порошках детонационных наноалмазов. Применение умеренных (до 1.5 ГПа) статических давлений позволило отделить вклады в малоугловое рассеяние от микро- и наноразмерных пор [13]. Показаны возможности управления фрактальной структурой пористой системы на наномасштабе путем применения статического давления (рис. 9). Определен тип фрактальных кластеров, образованных нанопорами. Подтверждена возможность механической деагрегации наноалмазных частиц при давлении 1.5 ГПа. Частичная рекомбинация пор в охваченном диапазоне давлений приводит к образованию линейных пор в отличие от разветвленной системы, характерной для исходных промышленных образцов. Такая модификация имеет определенные практические перспективы, связанные с загрузкой анизотропных добавок в композитные материалы на основе наноалмазов.

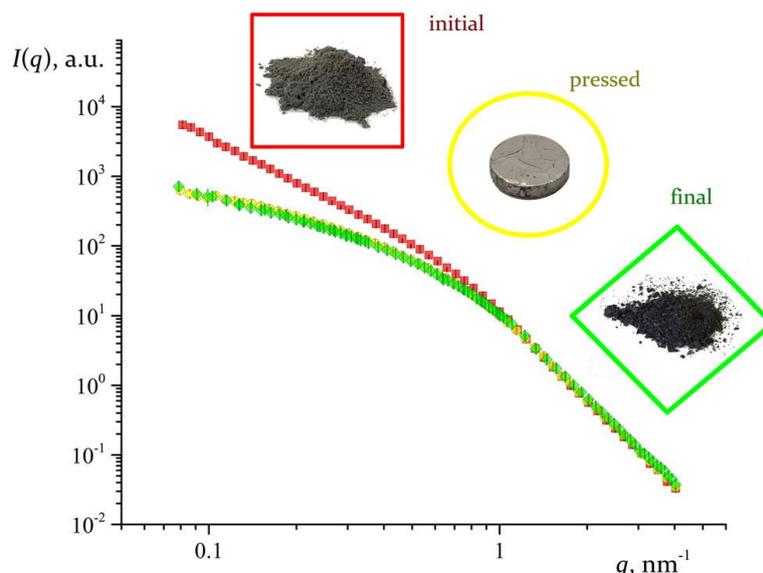


Рис. 9. Примеры кривых МУРН nanoалмазного порошка для трех состояний: начального, прессованного (1.5 ГПа; покрытие алюминиевой фольгой) и конечного (измельченные прессованные порошки).

Выполнено сравнение структурных особенностей двух перспективных систем для биомедицинских применений - водных дисперсий конъюгатов фуллерена  $C_{60}$  с аминокислотой лизином ( $C_{60}$ -Lys) и пиперазином ( $C_{60}$ -Pip) [14]. Биосовместимость обоих исследованных растворов фуллерена была подтверждена в широком диапазоне концентраций на основании отсутствия цитотоксичности в отношении клеточных линий A549, HepG2 и HeLa. В МУРН и ДСР исследованиях данных растворов фуллерена методами рассеяния и поглощения обнаружена разница в двухуровневой агрегации в зависимости от типа аминоконъюгата (получены разные размеры первичных и вторичных агрегатов, рис. 10). Результаты *ab initio* расчетов в данной работе дополнительно подтверждают экспериментально полученные мольные соотношения фуллерена и аминоконъюгата, а также используются для качественного объяснения характера распределения агрегатов фуллерена по размерам. Наноразмерные комплексы на основе  $C_{60}$  с низкой токсичностью планируется использовать в фармакологических (например, противоаллергических) разработках на основе фуллерен-аминокислотных и фуллерен-ароматических аминокислотных соединений.

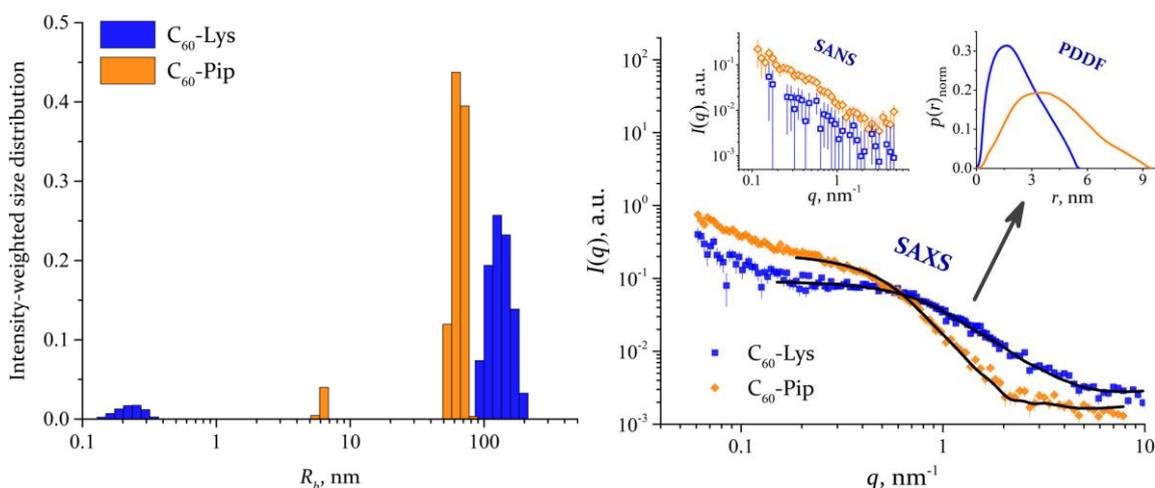


Рис. 10. Результаты динамического светорассеяния (слева) и малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей (справа) в отношении первичных и вторичных агрегатов в водных дисперсиях конъюгатов фуллерена  $C_{60}$  с аминокислотами  $C_{60}$ -Lys и  $C_{60}$ -Pip.

Нейтронная и рентгеновская рефлектометрия использовались в исследованиях пленок одностенных углеродных нанотрубок (ОСУНТ), перспективных для различных электрооптических

применений [15]. Их разработка на наномасштабе требует надежного метода бесконтактного, неинвазивного определения структурных свойств. Из полученных нормальных профилей плотности по глубине прослежен эффект уплотнения пленок одностенных углеродных нанотрубок под действием смачивания этанолом (рис. 11). На первом этапе исследованы углеродные пленки низкой плотности.

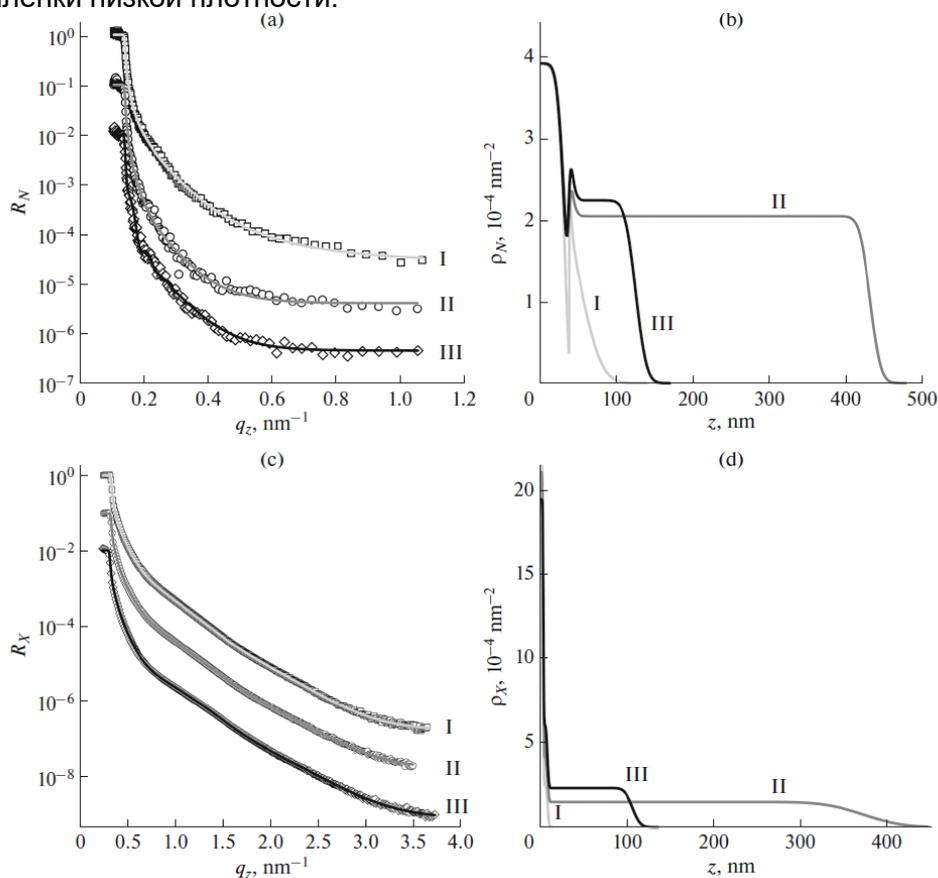


Рис. 11. (а, б) нейтронная и (с, д) рентгеновская рефлектометрия аэрозольных пленок ОСУНТ: (а, с) экспериментальные кривые зеркального отражения (точки) обработаны в рамках формализма Парратта (линии); (б, д) профили плотности длины рассеяния на границе раздела твердое тело-воздух: (I) стеклянная подложка, (II) исходная пленка ОСУНТ и (III) уплотненная пленка ОСУНТ.

#### 1.4 Исследование слоистых наноструктур

В последние годы резко возрос интерес к магнитным наноструктурам, содержащим редкоземельные металлы, мотивированный как большими значениями магнитных моментов редкоземельных атомов, так и сложностью их магнитной фазовой диаграммы в зависимости от температуры и приложенного магнитного поля. В числе редкоземельных магнетиков со сложной магнитной структурой можно выделить металлические Dy и Ho. Объемные Dy и Ho кристаллизуются в ГПУ (гексагональная плотная упаковка) фазу с параметрами кристаллической решетки  $a = 0.35903$  нм,  $c = 0.6475$  нм для Dy и  $a = 0.35773$  нм,  $c = 0.56158$  нм для Ho. В объемном Dy в интервале между температурой Кюри ( $T_C=85$  К) и температурой Нееля ( $T_N=178$  К) формируется длиннопериодическая геликоидальная магнитная структура, причем магнитные моменты Dy лежат в базисной плоскости, а период геликоида несоизмерим с параметром кристаллической решетки Dy, при приложении магнитного поля геликоидальное магнитное упорядочение может трансформироваться в геликоидально-веерное, веерное либо ферромагнитное упорядочение. В объемном Ho длиннопериодическое несоизмеримое геликоидальное магнитное упорядочение наблюдается между  $T_N=132$  К и  $T_C=18$  К, причем магнитные моменты также лежат в базисной плоскости. Ниже  $T=19$  К период геликоида в Ho становится соизмерим с параметром кристаллической решетки и перестает зависеть от температуры, а магнитные моменты Ho частично выходят из базисной плоскости, формируя соизмеримую конусообразную магнитную структуру. Следует отметить, что магнитная структура,

формирующаяся в тонких пленках и многослойных наноструктурах на основе редкоземельных гелимагнетиков, таких как Dy и Ho, проявляет интересные особенности, связанные с взаимным влиянием размерных эффектов и эпитаксиальных напряжений, не наблюдаемые в объемных материалах. В работе [16] изучена роль размерных эффектов в формировании магнитной структуры тонких пленок Dy и Ho в отсутствие эпитаксиальных напряжений. Было установлено, что в температурном диапазоне от температуры Нееля до температуры Кюри для объемных кристаллов Dy и от температуры Нееля до температуры фазового перехода в коническую фазу для Ho, температурные зависимости периода магнитной геликоиды в объеме и в тонкой пленке во многом идентичны. При более низких температурах в пленках Dy изменяется характер перехода в ферромагнитную фазу, а в пленках Ho подавляется переход в соизмеримую коническую фазу, что объясняется исключительно влиянием размерных эффектов (рис. 12).

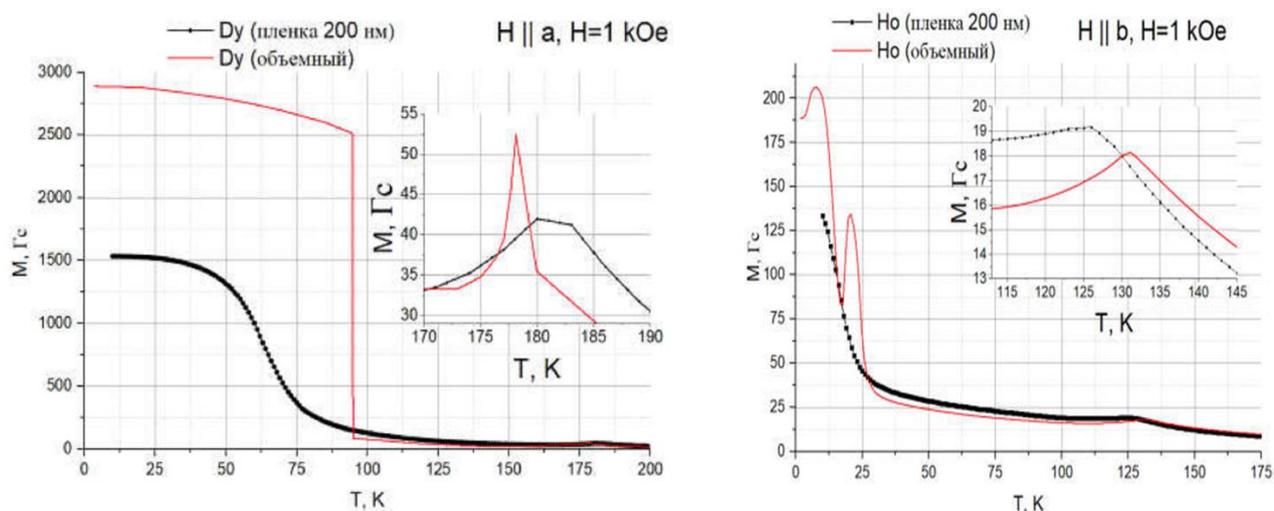


Рис. 12. Температурные зависимости намагниченности тонкой пленки и объемного кристалла Dy (слева) и Ho (справа) в магнитном поле 1 кЭ, приложенном вдоль оси легкого намагничивания.

### 1.5 Исследование биологических наносистем, липидных мембран и липидных комплексов

С помощью метода малоуглового рассеяния изучены морфологические изменения в модельных липидных мембранах, вызванные встраиванием амилоид-бета пептида [17]. Показано, что встраивание амилоид-бета пептида оказывает влияние как на структуру агрегатов, так и на внутреннюю структуру мембраны в целом и на ее толщину в частности. На рис. 13 представлены изменения толщины мембраны и размера агрегата для систем, сформированных из липидов димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) и дипальмитоилфосфатидилхолина (ДПФХ). Данные липиды отличаются так называемой температурой главного фазового перехода. Изменения толщины мембраны и размеров агрегатов представлены в зависимости от температурного сдвига температуры относительно температуры главного фазового перехода. Полученные зависимости свидетельствуют об унифицированном характере взаимодействия пептида с мембраной и подтверждены методом просвечивающей электронной микроскопии.

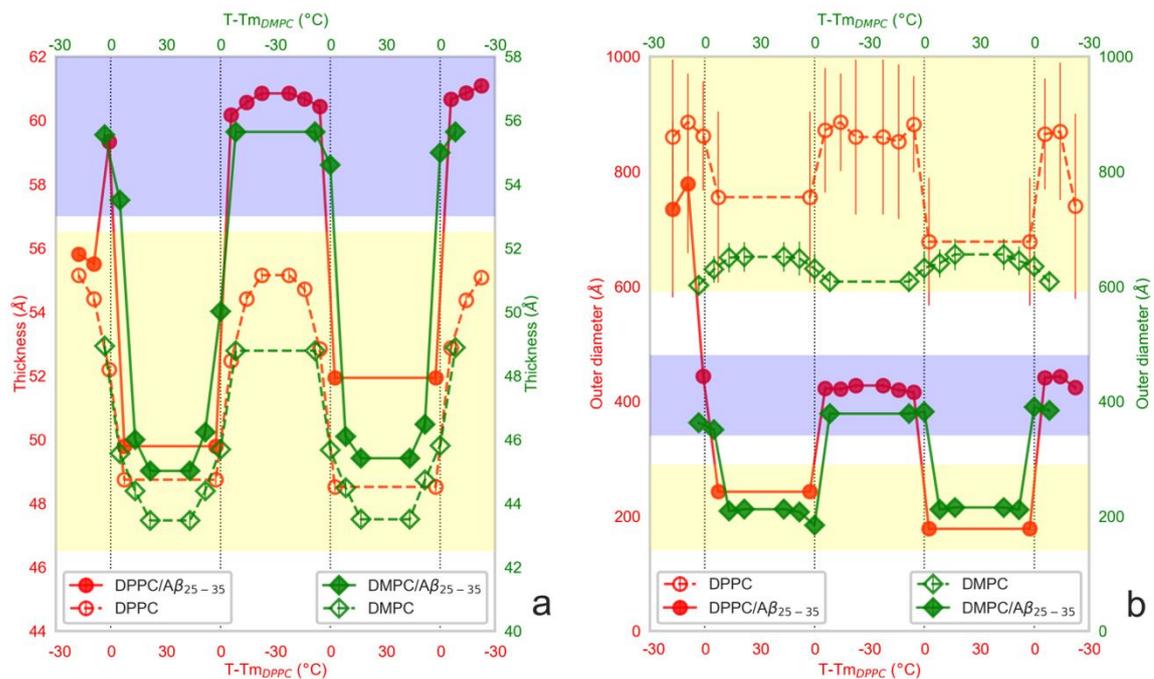


Рис. 13. Изменение толщины модельной мембраны (а) и размеров агрегатов (б) в зависимости от сдвига температуры относительно главного фазового перехода для ДМФХ(зеленые ромбы) и ДПФХ (красные круги) с добавлением и без добавления амилоид-бета пептида.

Двухкомпонентные системы (ДКС) отвечают за коммуникацию микроорганизмов с окружающей средой; они присутствуют почти во всех доменах и являются наиболее распространенными сигнальными системами в живой природе. Рецепторы ДКС, как правило, являются трансмембранными белками. Несмотря на широкий интерес научного сообщества к изучению ДКС, в настоящее время существующие результаты исследований ограничены описанием структуры фрагментов этих белков. Трудности в структурных исследованиях полноразмерных рецепторов ДКС связаны с большим размером и высокой динамичностью водорастворимой части трансмембранных рецепторов ДКС. С помощью малоуглового нейтронного рассеяния на спектрометре ЮМО была получена структура сенсора ДКС – полноразмерного фоторецепторного комплекса сенсорного родопсина с его родственным трансдюсером из экстремофильной археи *Natronomonas pharaonis* [18,19]. Активированный при воздействии света сенсорный родопсин II (*NpSRII*) индуцирует структурные и/или динамические изменения в трансдюсере (*NpHtrII*), которые преобразуются двумя HAMP-доменами и передаются вдоль цитоплазматического киназного модуля длиной 200 Å до крайней области цитоплазматической части *NpHtrII*. Активированная трансдюсером гистидинкиназа CheA (связанная с адаптерным белком CheW) подвергается автофосфорилированию и дополнительно переносит фосфатную группу в регуляторы ответа CheY или CheB. CheY влияет на смещение вращения жгутика, в то время как метилэстераза CheB наряду с метилтрансферазой CheR контролирует механизм адаптации. Общая схема молекулярного механизма передачи сигнала (рис. 14) предполагает последовательные динамические изменения в цитоплазматических доменах. Как хеморецепторы, так и трансдюсеры сенсорных родопсинов демонстрируют различную динамику в соседних модулях, что коррелирует с передачей сигнала вдоль цитоплазматического «стержня». Гомодимеры хеморецепторов (или комплексов родопсин-трансдюсер) в клеточной мембране образуют тримеры, составляющие функциональные единицы. Тримеры димеров образуют структурно-функциональную единицу при образовании сигнальных двумерных массивов – компактных мембранных супер-комплексов, отвечающих за усиление входящего сигнала. Представленная молекулярная модель гексамера (тримера димеров) построена с помощью комбинации методов малоуглового рассеяния и молекулярного

моделирования (рис. 14). Таким образом показано, что контакт между димерами *NpSRII/NpHtrII* в гексамере опосредован только цитоплазматическими частями, трансмембранные части димеров при этом не контактируют друг с другом, то есть имеет место "tripod"-образная модель, отличная от предложенных ранее в литературе "О"- и "Y"-образных моделей.

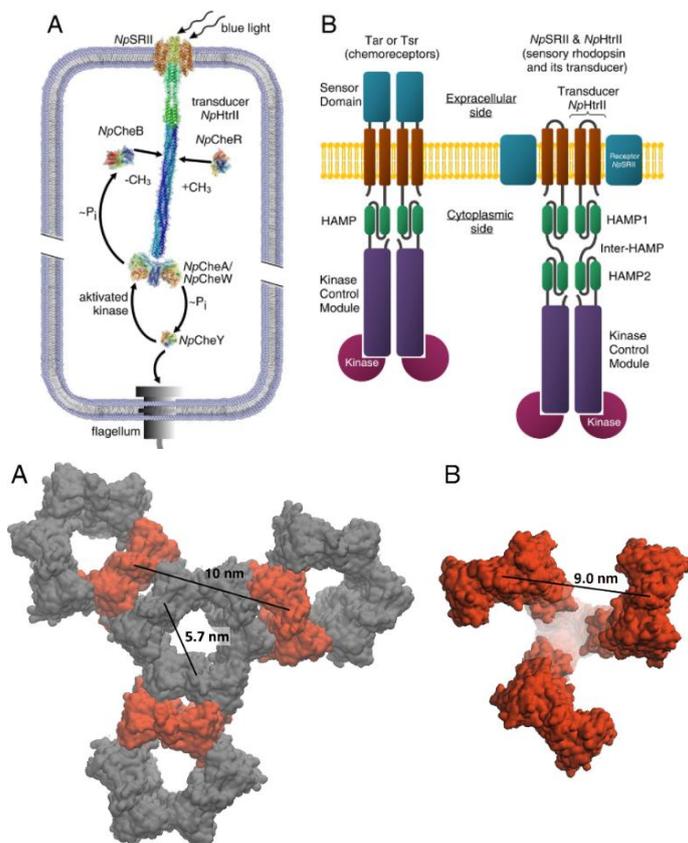


Рис. 14. Вверху: схема сигнального каскада (A) в случае двухкомпонентной системы отрицательного фототаксиса *Natronomonas pharaonis* и схема доменной архитектуры (B) димера хеморецепторов (Tar и Tsr в комплексе с киназами) из *E. coli* (слева) и димера фотосенсорного комплекса сенсорного родопсина II с его родственником трансдюсером *NpHtrII* из *N. pharaonis* (справа). Внизу: изображения трансмембранных доменов комплекса *NpSRII/NpHtrII*: (A) фрагмент гексагональной упаковки «О»-образных тримеров димеров; (B) изображение «tripod»-образного тримера димеров.

Исследовано влияние мелатонина и/или холестерина на структурные свойства модельного липидного бислоя, полученного из 1,2-диолеоил-глицеро-3-фосфохолина [20]. Эксперименты по нейтронной рефлектометрии (ГРЭИНС, ИБР-2), проведенные с мембранами, выявили изменения толщины липидного бислоя при введении дополнительных компонентов (рис. 15). Наличие холестерина приводит к увеличению толщины мембраны, в то время как в случае мелатонина наблюдался противоположный эффект. Полученные результаты хорошо согласуются с молекулярно-динамическим моделированием, которое предоставляет дополнительную информацию об организации компонентов в исследуемых системах, что указывает на механизм, лежащий в основе изменения толщины мембран вследствие добавления экспериментально холестерина и мелатонина. Холестерин и мелатонин преимущественно накапливаются в разных участках мембраны, вероятно, по-разному влияя на конформацию гидрофобных липидных частей и, в свою очередь, по-разному влияя на структуру всей мембраны.

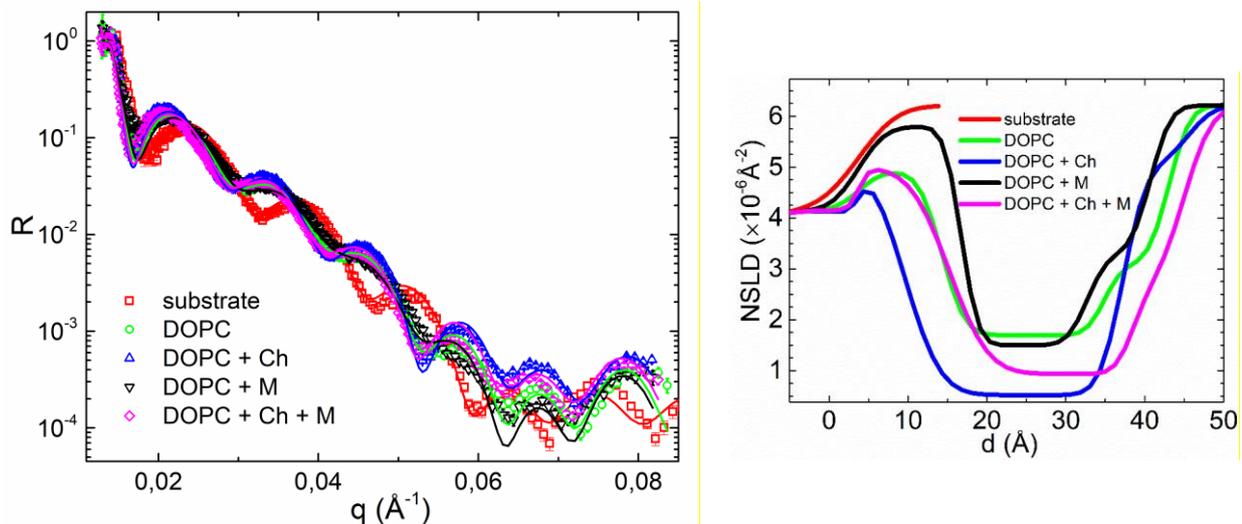


Рис. 15. Исследования влияния мелатонина и холестерина на структурные свойства модельного липидного бислоя. Слева – измерения методом нейтронных рефлектометрии, справа – полученные профили ПДР.

Проблема устойчивости болезнетворных микроорганизмов является одной из ключевых в мировом здравоохранении. Существующие антибиотики оказываются неэффективными в отношении новых бактериальных штаммов, появление новых препаратов происходит слишком медленно и человечество вплотную подошло к порогу, за которым возможен возврат в «доантибиотиковую эру» и превращение казавшихся побежденными инфекций в крайне опасные. Коллективом ученых из России, Румынии, Сербии, Польши и Чехии проведено исследование структурных и антимикробных свойств новых биосовместимых нанокомплексов, состоящих из липосом соевого лецитина, хитозана и наночастиц (НЧ) серебра/хлорида серебра [21,22], рис. 16. Важно отметить, что для уменьшения токсичности наночастиц в работе был применен «зеленый» синтез – получение НЧ из экстрактов растений. Морфологические (AFM, SEM) и структурные (SAXS, SANS) методы анализа подтвердили наноразмерный масштаб компонентов полученных биоконструктов. Присутствие гибридных Ag/AgCl НЧ, синтезированных из корневища куркумы или листьев винограда и мяты, было определено методами XRD и EDS. С помощью оптической спектроскопии (UV-Vis absorption и FTIR) и измерения дзета-потенциала были подтверждены образование стабильных биогридных нанокомплексов. Все перечисленные выше исследования были нацелены на разработку высокоэффективных биосовместимых комплексов, имеющих широкий потенциал применения в различных областях медицины. Интересно отметить, что полученные и исследованные материалы также имеют значительную активность против раковых клеток, которая подтверждена в данной работе в *in vitro* экспериментах с клетками HT-29 и HepG2. При этом наиболее высокую эффективность (и отсутствие гемолитической активности) продемонстрировали лишь композиты, имеющие в составе биоподобные липидные бислои.

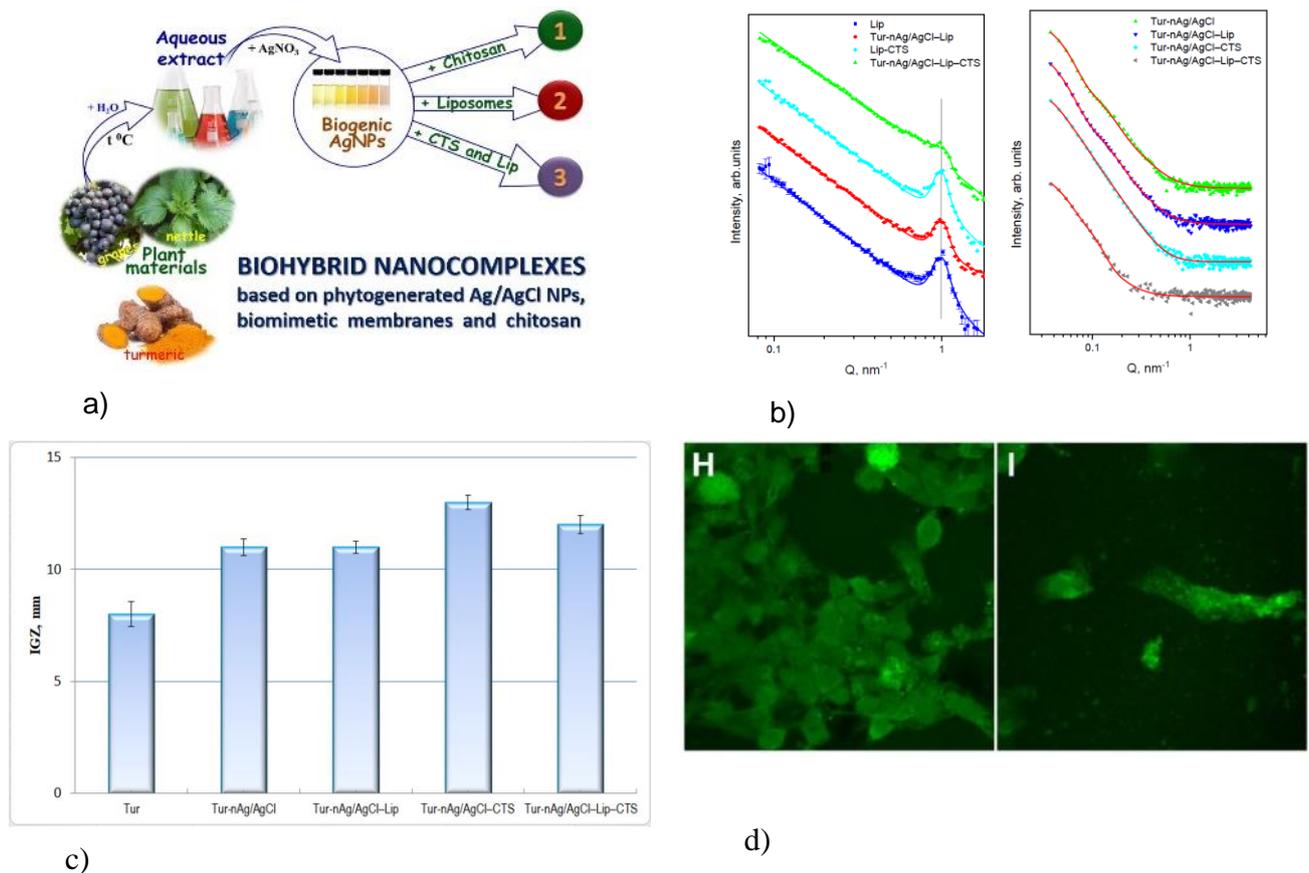


Рис. 16. а) Механизм формирования биогибридных наноконкомпексов. б) Кривые малоуглового рассеяния нейтронов (слева) и рентгеновских лучей (справа) на исследуемых образцах наноконкомпексов. в) Бицидные свойства исследуемых наноконкомпексов в отношении бактерий *Enterococcus faecalis*. д) Морфологические свойства исследуемых комплексов, полученные с помощью СЭМ в эпифлюоресцентной моде.

### 1.6. Исследование полимерных материалов

Методом нейтронной и рентгеновской рефлектометрии исследованы структурные особенности системы - полимерная щетка полиэтиленгликоля (ПЭГ,  $M_w=20$  кДа) на кремниевой подложке. Синтез выполнен из раствора методом «grafting to» с итоговым средним расстоянием между точками крепления к подложке  $D \sim 4.4$  нм. В качестве подложки использовался монокристалл кремния с нанесенными слоями титана (толщиной 5 нм) и кремния (толщиной 50 нм) методом вакуумного магнетронного напыления (Ltd Mirrotron, Венгрия). Методом сканирующей атомно-силовой микроскопии и рентгеновской рефлектометрии определена толщина однородного плотного слоя полимера ( $\sim 2$  нм) и значение приведенной плотности привязки полимерных молекул ( $\Sigma=4.4$  нм). Исследования методом нейтронной рефлектометрии (ГРЭИНС, ИБР-2) выполнены для полимерной щетки ПЭГ в  $D_2O$  и в растворе ДБСК 0.2 об. % (рис. 17) в специальной жидкостной ячейке. Из аппроксимации данных получены параметры высоты полимерной щетки  $h=6.6$  нм и шероховатости  $\sigma=1,3$  нм. После добавления ДБСК параметр высоты полимерной щетки увеличился до  $h=9.2$  нм ( $\sigma=1.7$  нм). Параметр приведенной плотности привязки полимерных цепей возрастает от 12.6 до 17.5 при добавлении ДБСК. Изменение высоты полимерной щетки ПЭГ объясняется кооперативным взаимодействием мицелл с цепочкой полимера, которое происходит в объеме раствора додецилбензолной кислоты в присутствии высокомолекулярного ПЭГ [23].

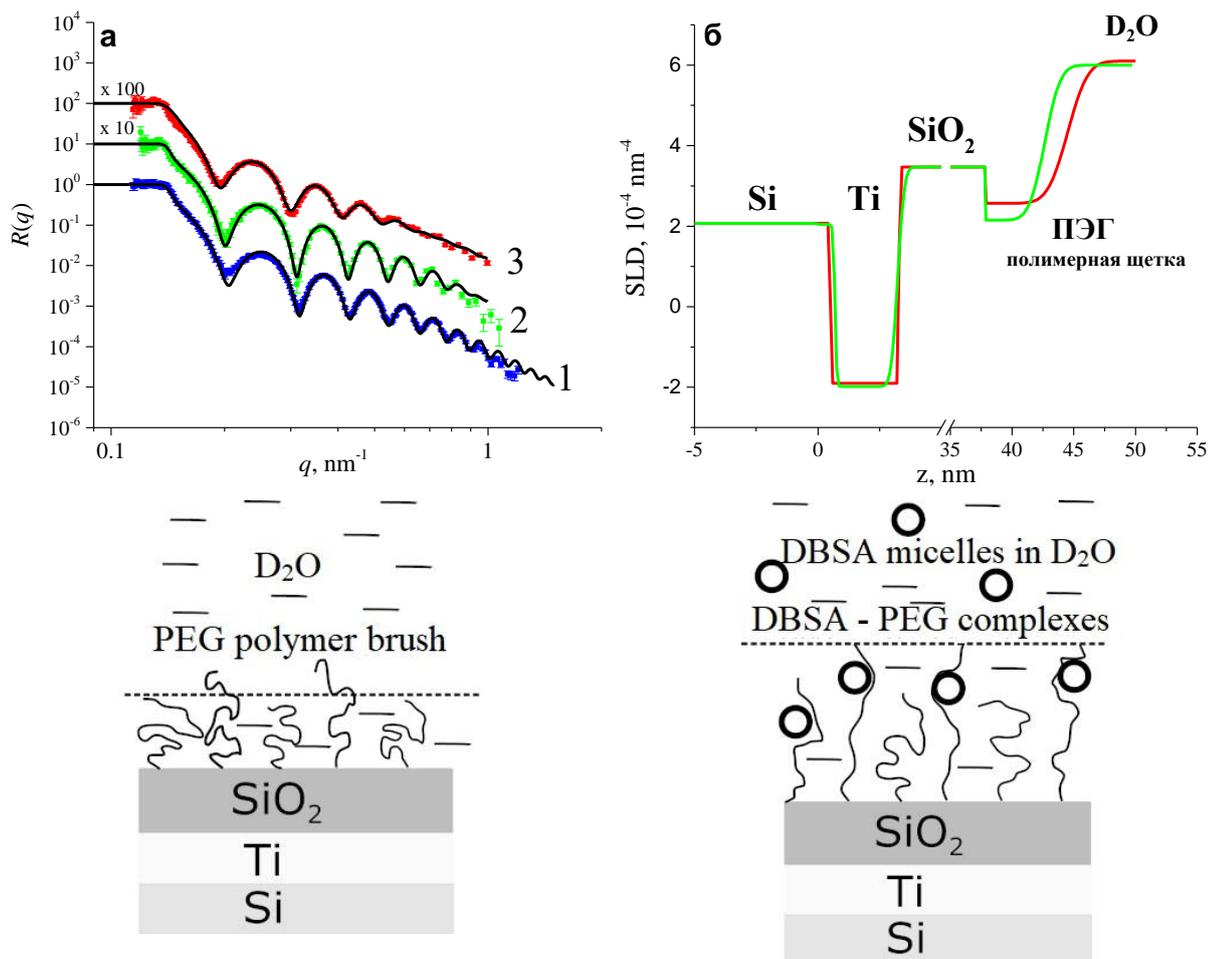


Рис. 17. Результаты нейтронной рефлектометрии для границы раздела «раствор ПАВ – оксид кремния»: **(а)** кривая отражения от подложки в жидкостной ячейке (1), системы полимерной щетки ПЭГ на подложке в жидкостной ячейке (2), при добавлении в жидкостную ячейку ДБСК 0.2 об. % (3), сплошными линиями изображены аппроксимирующие кривые; **(б)** восстановленные профили плотности длинны рассеяния согласно данным нейтронной рефлектометрии. Схематическое изображение слоев подложки с полимерной щеткой в тяжелой воде с образованием комплексов ПАВ-полимер.

Исследовано влияние водорастворимого мономера (акриламида) на структуру и реологические свойства гигантских червеобразных мицелл анионного ПАВ олеата калия при разном содержании солей. МУРН измерения на ЮМО (ИБР-2) в комплексе с комплементарными методами (реометрия, флуоресцентная и ЯМР-спектроскопия, тензометрия) позволили отследить характер изменения / сохранения структуры мицелл (рис. 18). Показано, что при низком содержании соли, когда червеобразные мицеллы являются линейными, акриламид вызывает их укорочение и превращение в сферические мицеллы в результате его включения в мицеллярную корону, что приводит к падению вязкости. При высоком содержании соли, обеспечивающем существование разветвленных червеобразных мицелл, мономер сначала запускает их переход в длинные линейные цепи, что увеличивает вязкоупругость, а затем - переход в стержни. Таким образом, влияние мономера на реологические свойства существенно различается для линейных и разветвленных мицелл [24]. Использование разветвленных мицелл позволяет сохранять большие червеобразные мицеллы при высоком содержании водорастворимого мономера, что благоприятно для их использования в качестве нанореакторов для синтеза сополимеров с высокой степенью блочности, дающих механически стойкие полимерные гели.

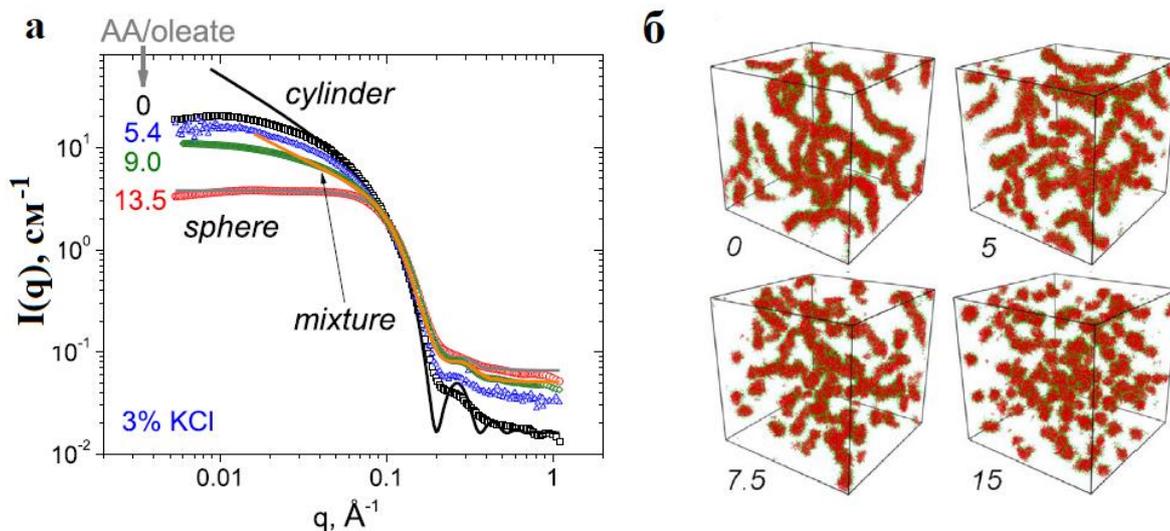


Рис. 18. Влияние акриламида на структуру червеобразных мицелл ПАВ. (а) Экспериментальные кривые МУРН для водных растворов, содержащих 5 об. % олеата калия и 3 об. % КСI при разном содержании акриламида при 20°C; (б) результаты моделирования методом молекулярной динамики для различных соотношений мономер/ПАВ.

### 1.7. Атомная и молекулярная динамика

В группе НЕРА проводились исследования динамических и структурных свойств ионных жидкостей и их смесей; биологически активных систем и молекулярно-ионных кристаллов; фармакологических препаратов; влияния углеродных нанопор малого диаметра на физико-химические свойства ионных жидкостей с помощью рассеяния нейтронов, спектроскопии ядерно-магнитного резонанса в условиях высоких гидростатических и механических давлений и других комплементарных методов. Проведен анализ фазовых диаграмм как функций температуры и давления для фармацевтических соединений и молекулярно-ионных кристаллов [25,26].

Проведены исследования соединений  $RB_6$  ( $R = La, Ce, Pr$  и  $Nd$ ) с помощью неупругого рассеяния нейтронов на спектрометре НЕРА. В процессе работы с соединением  $CeB_6$  наблюдалось необычное поведение магнитного отклика: уменьшение энергии перехода КЭП с повышением температуры, что потребовало дополнительных измерений температурной зависимости магнитного рассеяния. Проведён значительный объем работы по обработке и анализу полученных данных.

Начаты исследования мягких материалов в нанопористых матрицах, направленных на установление влияния пространственных ограничений на фазовые переходы и динамику мягкой материи по сравнению со свойствами в обычном объемном состоянии. Эффект удержания молекул в нанопористом пространстве представляет значительный интерес как с фундаментальной точки зрения, так и с практической точки зрения (особенно в аморфном и стеклообразном состояниях). Это связано с тем, что эффект нанограничения веществ приводит к появлению многих интересных свойств, которые отсутствуют в объемном состоянии. Как следует из теоретических и экспериментальных исследований, поведение веществ, заключенных в нанопорах, определяется пристеночными силами и размерностью системы. Размер нанопоры влияет на значение смещения температуры фазового перехода относительно величины в объемной форме, а тип нанопоры характеризует направление этого сдвига (в сторону более низких или более высоких температур). Проведены исследования динамики 8CFNB в нанопористой мембране (20 и 200 нм) с использованием неупругого рассеяния нейтронов (рис. 19), результаты которых требуют дальнейшей обработки.

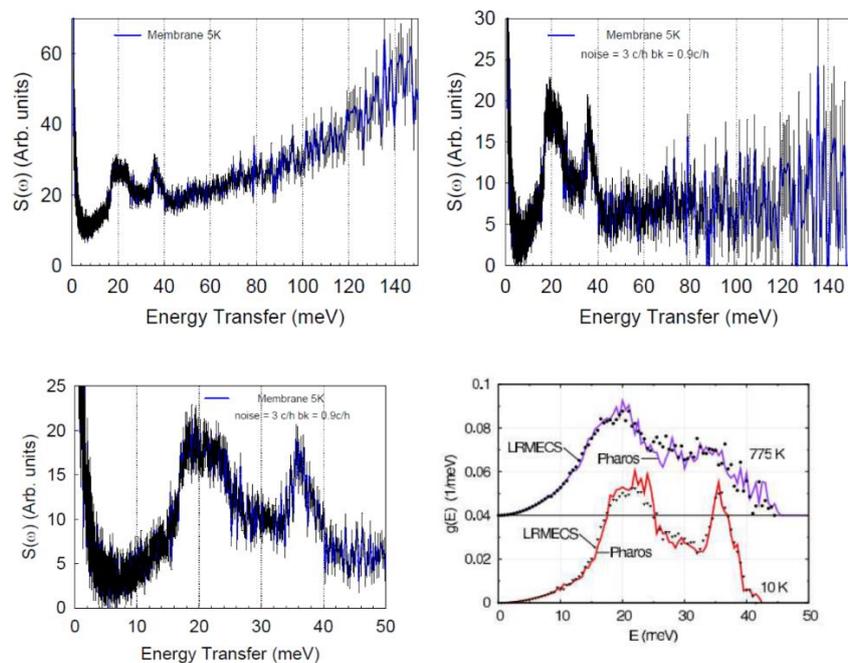


Рис. 19. Спектры неупругого рассеяния нейтронов на системе 8CFNB в нанопористой мембране.

### 1.8. Прикладные работы

Алюминиевые сплавы серии 2xxx широко используются во многих отраслях промышленности, особенно в авиакосмической, из-за их высокой механической прочности и небольшого веса. Однако при температурах выше 200 °С их механические характеристики ухудшаются из-за ускорения процессов выпадения вторичных фаз (преципитатов). Особым предметом интереса является ползучесть алюминия и его сплавов при различных температурах, а также распределение остаточных напряжений в материале после термообработки. Проведено исследование напряженного состояния цилиндрических образцов из алюминиевых сплавов 5083Al и 2014Al, изготовленных методом экструзии и подвергнутых закалке и последующему медленному охлаждению [27]. Сплав 5083Al не подвержен старению, тогда как сплав 2014Al хорошо упрочняется старением. Образцы сплава 5083Al нагревали при 530 °С в течение 3 ч. Один образец был подвергнут закалке в пресной воде для создания полей напряженного состояния, а другой был оставлен в печи для медленного охлаждения примерно на 24 часа, чтобы минимизировать остаточные напряжения. Два образца сплава 2014Al также были подвергнуты аналогичной термообработке с целью создания напряженного состояния в одном из них и почти релаксированного состояния во втором. Измерения текстуры проводились в CENIM на рентгеновском дифрактометре Bruker AXS D8, исследование остаточных напряжений в образцах из сплава 5083Al выполнены на нейтронном фурье-дифрактометре ФСД в ЛНФ ОИЯИ, в образцах из сплава 2014Al - на дифрактометре EDDI на источнике синхротронного излучения BESSY (Берлин, Германия). Для обработки экспериментальных данных использовался подход, основанный на многомасштабном анализе для расчета макронапряжений и микронапряжений в однофазном сплаве с использованием дифракционных данных и модели «композитный материал». По результатам текстурных измерений было установлено, что в результате экструзии в сплаве 5083Al образуется аксиальная текстура с компонентами  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  вдоль оси экструзии, которые плавно спадают от центра образца к его краю. Все основные дифракционные пики от сплава 5083Al в нейтронных спектрах индцировались в рамках ГЦК-структуры с пространственной группой  $Fm\bar{3}m$  и с параметром решетки  $a_0 \approx 4.07 \text{ \AA}$ . Параметры решетки сплава 5083Al после закалки и после медленного охлаждения были получены в результате профильного анализа измеренных дифракционных спектров по методу Ритвельда (рис. 20). Также проведена обработка отдельных дифракционных пиков (111), (200), (311) и (220) для обоих сплавов по методу наименьших квадратов (МНК) для определения их положений  $d_{hkl}$ .

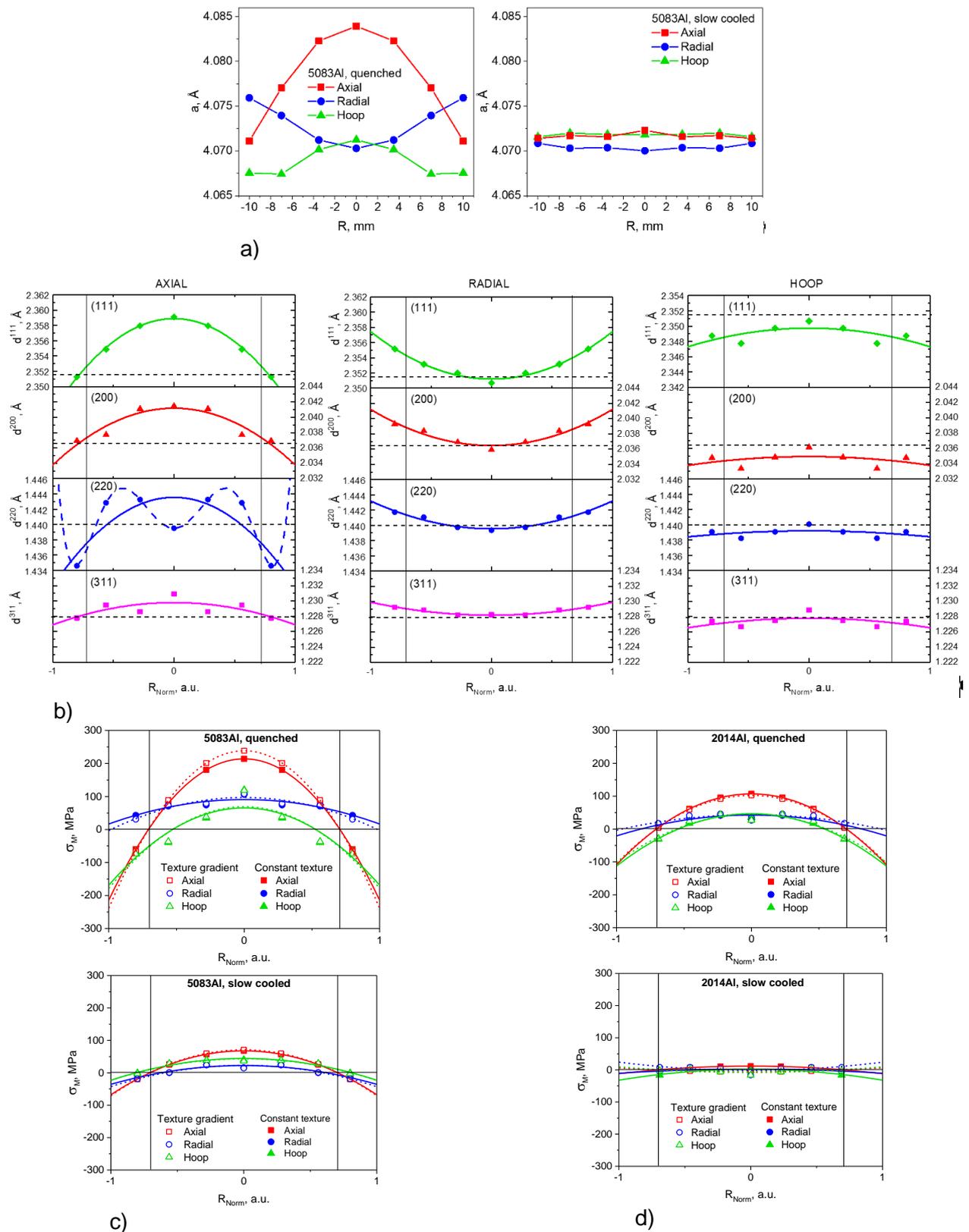
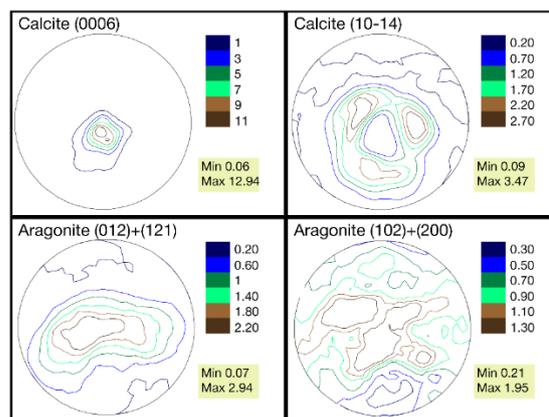
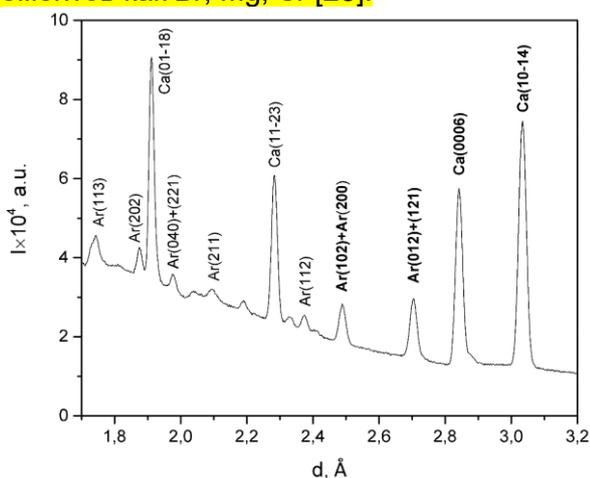


Рис. 20. а) Зависимость параметра решетки от радиуса для сплава 5083Al после закалки и медленного охлаждения для аксиальной, радиальной и тангенциальной компонент. б) Межплоскостные расстояния, полученные из аппроксимации отдельных дифракционных пиков нейтронных спектров, в зависимости от нормированного расстояния  $R_{Norm} = r/R$  до центров образцов из сплава 5083Al для аксиальной, радиальной и тангенциальной компонент деформации после закалки. в) Распределение компонент остаточных макронапряжений в образцах из сплава 5083Al (в) и 2014Al (д) по результатам обработки отдельных пиков после закалки и медленного охлаждения.

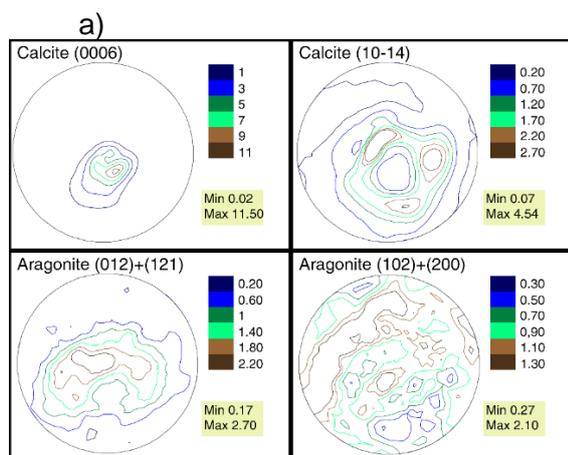
Для семейств зерен  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  (которые являются наиболее распространенными), наблюдается почти параболический профиль распределения  $d_{hkl}$  в аксиальном направлении (рис. 20), в частности, в закаленных образцах. Напротив, фактическая подгонка для пика (220), а также, вероятно, и для (311) значительно отличается от параболической. Такое распределение не может быть объяснено присутствием только макронапряжений, что позволяет предположить также наличие заметных микронапряжений, возникающих в процессе термообработки. Расчеты на основе генетического алгоритма для закаленного цилиндрического образца из сплава 5083Al показали, что остаточные микронапряжения могут варьироваться в значительных пределах: от -263 МПа до 301 МПа. Кроме того, в случае медленного охлаждения профили распределений для  $d_{hkl}$  не являются плоскими, что свидетельствует о наличии небольших остаточных макронапряжений, которые не релаксируют полностью в результате термообработки. Похожие параболические профили распределений наблюдаются и для сплава 2014Al, но при этом положения пика (220) не демонстрируют заметных отклонений от параболической зависимости (как в 5083Al), рис. 20. Погрешности определения напряжений не превышают  $\pm 20$  МПа. Видно, что в обоих сплавах для закаленных образцов распределение напряжений в зависимости от расстояния до центра образца носит параболический характер. При этом максимальная величина остаточного напряжения (аксиальная компонента) в закаленном образце для сплава 2014Al почти в 2 раза ниже, чем в сплаве 5083Al. Это различие полностью согласуется с результатами недавних исследований, в которых на основе расчетов по МКЭ установлено, что уровень остаточных макронапряжений зависит не только от термических и механических свойств сплавов, а также от параметров деформационного упрочнения материала и размеров (диаметров) цилиндрических образцов. Показано, что разница в остаточных напряжениях между внутренней и внешней областями увеличивается с увеличением расстояния, пройденного фронтом закалки (т.е. диаметра образца), и с уменьшением предела текучести. Образцы, подвергнутые медленному охлаждению, демонстрируют ненулевой уровень остаточных макронапряжений, которые обусловлены их неполной релаксацией в результате термообработки: 68 МПа для сплава 5083Al и 12 МПа для сплава 2014Al. Это несколько неожиданный результат, так как термообработка должна была привести к полной релаксации макронапряжений, который требует дальнейшего изучения и анализа. Учет градиента текстуры приводит к довольно заметному увеличению аксиальных остаточных напряжений в сплаве 5083Al после закалки (около 24 МПа) и практически не изменяет их после медленного охлаждения (разница около 3 МПа) (рис. 20). Для сплава 2014Al ситуация обратная: изменений после закалки нет (разница около 5 МПа), после медленного охлаждения разница заметна и составляет около 18 МПа. Дополнительно были проведены расчеты остаточных напряжений для сплава 5083Al по результатам обработки по методу Ритвельда в предположении однородной текстуры (рис. 20). В данном случае распределение напряжений также имело параболический профиль и полученные величины напряжений хорошо согласуются с результатами обработки отдельных пиков. После медленного охлаждения наблюдается практически полная релаксация остаточных напряжений в пределах  $\pm 10$  МПа.

Проведены исследования влияния элементного состава раковин двустворчатых моллюсков вида *Mytilus galloprovincialis*, обитающих в районе залива Салдана (Южная Африка), на их кристаллографическую текстуру. Содержание 23 элементов в раковинах этих моллюсков было определено с помощью нейтронно-активационного анализа. Анализировались раковины мидий, живущих в трех разных локациях (станциях). Как выяснилось по данным нейтронно-активационного анализа дикие мидии из залива Опасности, открытого для океанических вод, живут в стрессовых природных условиях и содержат большее количество большинства элементов по сравнению с мидиями, выращиваемыми в закрытых акваториях (Яхт-клуб Лангебана и Малая бухта) с антропогенными нагрузками. Измерения полных полюсных фигур проводились методом времяпролетной дифракции нейтронов на установке СКАТ. Для исследования выбирались створки раковин размером не менее 30 мм в длину и массой не менее 10 г. 3-4 створки были соединены двухкомпонентным клеем. Это было сделано для сбора материала, достаточного для проведения измерений. Затем приготовленный таким образом образец прикрепляли к стеклянному держателю и фиксировали в гониометре установки. Время измерения для каждого образца составляло 22 часа. Использовались либо только левые, либо только правые створки. Их изучали в целом, а не как фрагменты поверхности створок, как в

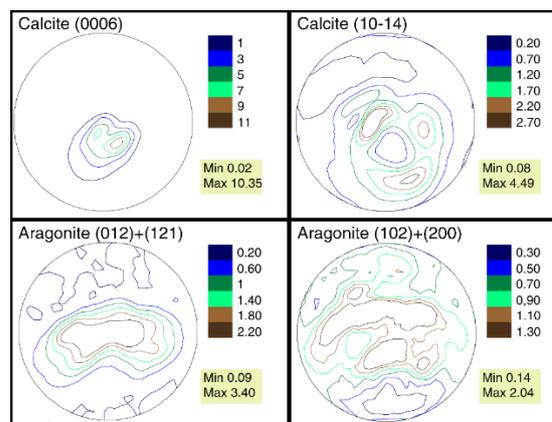
случае дифракции обратно рассеянных электронов или рентгеноструктурного анализа. Раковины состоят из двух минералогических фаз – кальцита и арагонита (рис. 21). Анализировались наиболее интенсивные дифракционные рефлексы, соответствующие кристаллографическим плоскостям с индексами Миллера (0006) и (10-14) для кальцита и (012)/(121) и (102)/(200) для арагонита. Было установлено, что даже значительные различия в концентрациях элементов между станциями не приводят к существенным изменениям кристаллографической текстуры раковин мидий из исследованных зон. Некоторые различия в максимальных значениях на полюсных фигурах находятся в диапазоне изменчивости, установленном для рода *Mytilus*. Тем не менее, есть некоторые количественные корреляции этих изменений с концентрацией таких элементов как Br, Mg, Sr [28].



b)



c)



d)

Рис. 21. Суммарный нейтронный дифракционный спектр, зарегистрированный для образца из раковин моллюска *Mytilus galloprovincialis* со станции 2, яхт-клуб Лангебана. Полюсные фигуры кальцита и арагонита в раковинах *Mytilus galloprovincialis* со станции 1, залив Опасности (b), со станции 2, яхт-клуб Лангебана (c), со станции 3, Малая бухта (d).

Проведены исследования стрессов, локализованных в группах гранул в сильно текстурированном монофазном сплаве магния (AZ31), рис. 22. Для прогнозирования пластической деформации сплава Mg и, в частности, для расчета процесса двойникования в высоко текстурированном сплаве Mg AZ31 была разработана самосогласованная модель упругопластической деформации. Также был предсказан процесс двойникования и рассчитана объемная доля твинов. В результате было получено очень хорошее соответствие между экспериментальными и теоретическими деформациями решетки и макроскопическими расчётами, расчётные параметры пластической деформации сравнивались с параметрами, непосредственно измеренными с помощью дифракции нейтронов на дифрактометре Эпсилон. Было обнаружено, что двойникование происходит, когда сила сжатия прилагается вдоль

направления прокатки, что приводит к значительному размягчению образца в начале пластической деформации образца. Напротив, образец остаётся очень твердым, когда сжимающая нагрузка приложена вдоль нормального направления, потому что в этом случае для большинства зерен не происходит двойникования.

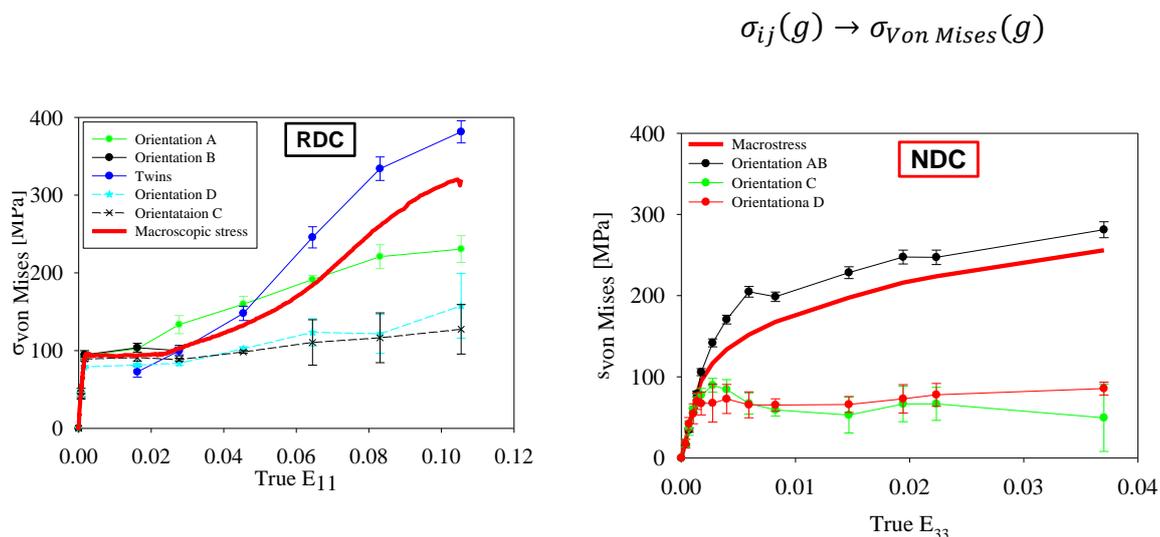
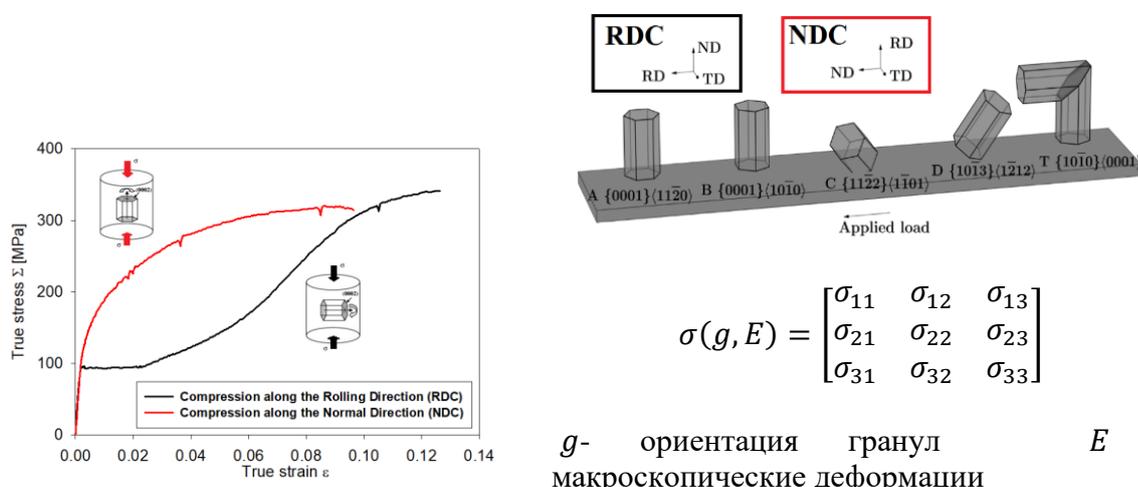


Рис. 22. Измеренная эволюция напряжения Фон Мизеса (Von Mises) для ориентаций (A, B, C, D, T–твины) в магниевом сплаве AZ31 во время испытания на сжатие вдоль направления прокатки (RDC) и нормального направления (NDC). Деформации решетки были измерены в 17 различных направлениях вектора рассеяния. Такие измерения позволили нам определить тензор напряжений для различной ориентации гранул во время *in situ* измерений на сжатие .

Химический состав и пространственное распределение фазовых компонентов древнегреческих культовых медных монет из крупного некрополя "Волна-1" и известных, как "оболы Харона", были детально исследованы с помощью методов нейтронной дифракции и томографии [29]. Именно такие монеты сопровождали умершего для платы Харону - перевозчику душ через реку Стикс, отделяющую мир мертвых от мира живых. Высокая проникающая способность и природа взаимодействия нейтронов с веществом позволили определить фазовый состав монет, а также разделить металлический сплав монет от материала патины. Результаты нейтронной томографии позволили частично восстановить элементы рисунков чеканки этих монет. Методом нейтронной дифракции определена относительная концентрация олова в бронзовом сплаве монет (рис. 23). Полученные нейтронные данные позволяют сделать некоторые выводы о происхождении найденных монет, а также об историческом периоде их денежного обращения в древнегреческих колониях.

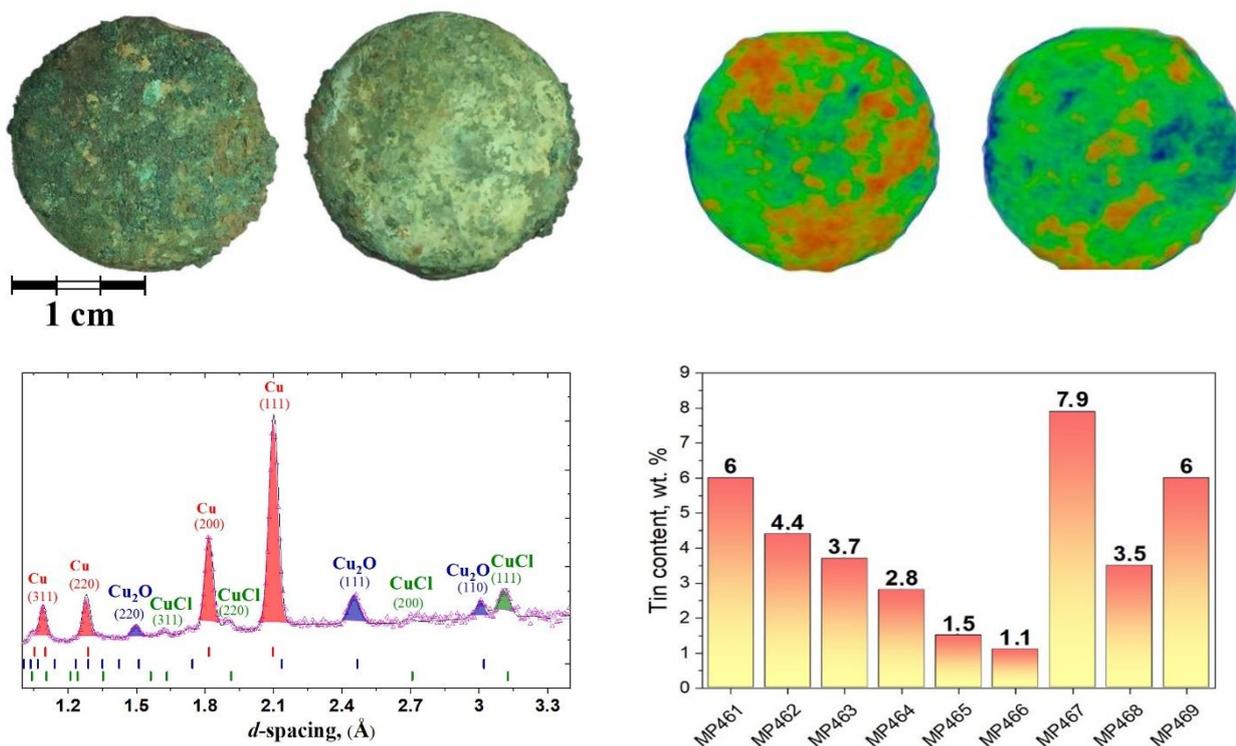


Рис. 23. Фотография и восстановленная из данных нейтронной томографии 3D модель одной из монет – оболы Харона. Выделены участки патины и коррозии в объеме исследуемой монеты. Представлены нейтронный дифракционный спектр монеты с идентификацией составляющих фазовых компонент, а также гистограмма относительного содержания олова в бронзовом сплаве исследуемых монет по данным нейтронной дифракции.

## 2. Методические результаты

На дифрактометре ФСД выполнен ряд работ в рамках развития установки. Новый фурье-прерыватель, изготовленный компанией Airbus Defence and Space, полностью интегрирован в систему управления экспериментом SONIX, установлен вакуумный клапан для фурье-прерывателя Airbus, а также подключены датчики для контроля вакуума в фурье-прерывателе и нейтронноводе. Для расширения возможностей по точному позиционированию образца установлена дополнительная платформа XY-перемещения 8MT200XY (Standa), рис. 24.



Рис. 24. а) Внешний вид платформы XY-перемещения 8MT200XY (Standa). б) Платформа XY-перемещения 8MT200XY, установленная во время эксперимента на ФСД.

Проведена значительная модернизация фурье-дифрактометра FSS. Выполнена замена старого прерывателя, которым была ранее укомплектована установка, на модернизированный фурье-прерыватель с дифрактометра ФСД с новой автоматизированной платформой

перемещения (рис. 25). Старый фурье-прерыватель имел ограничение по максимальной скорости вращения  $\Omega_{\max} = 2000$  об/мин, обусловленное его конструкцией. Его замена на прошедший модернизацию фурье-прерыватель со значительно большей максимальной скоростью вращения  $\Omega_{\max} = 6000$  об/мин, ранее использовавшийся на ФСД, позволила значительно увеличить разрешающую способность прибора. Установленный прерыватель смонтирован на платформе прецизионного перемещения, что позволяет при необходимости дистанционно вводить прерыватель в пучок и выводить из пучка и оперативно переключаться между режимами TOF (высокая светосила) и RTOF (высокое разрешение).

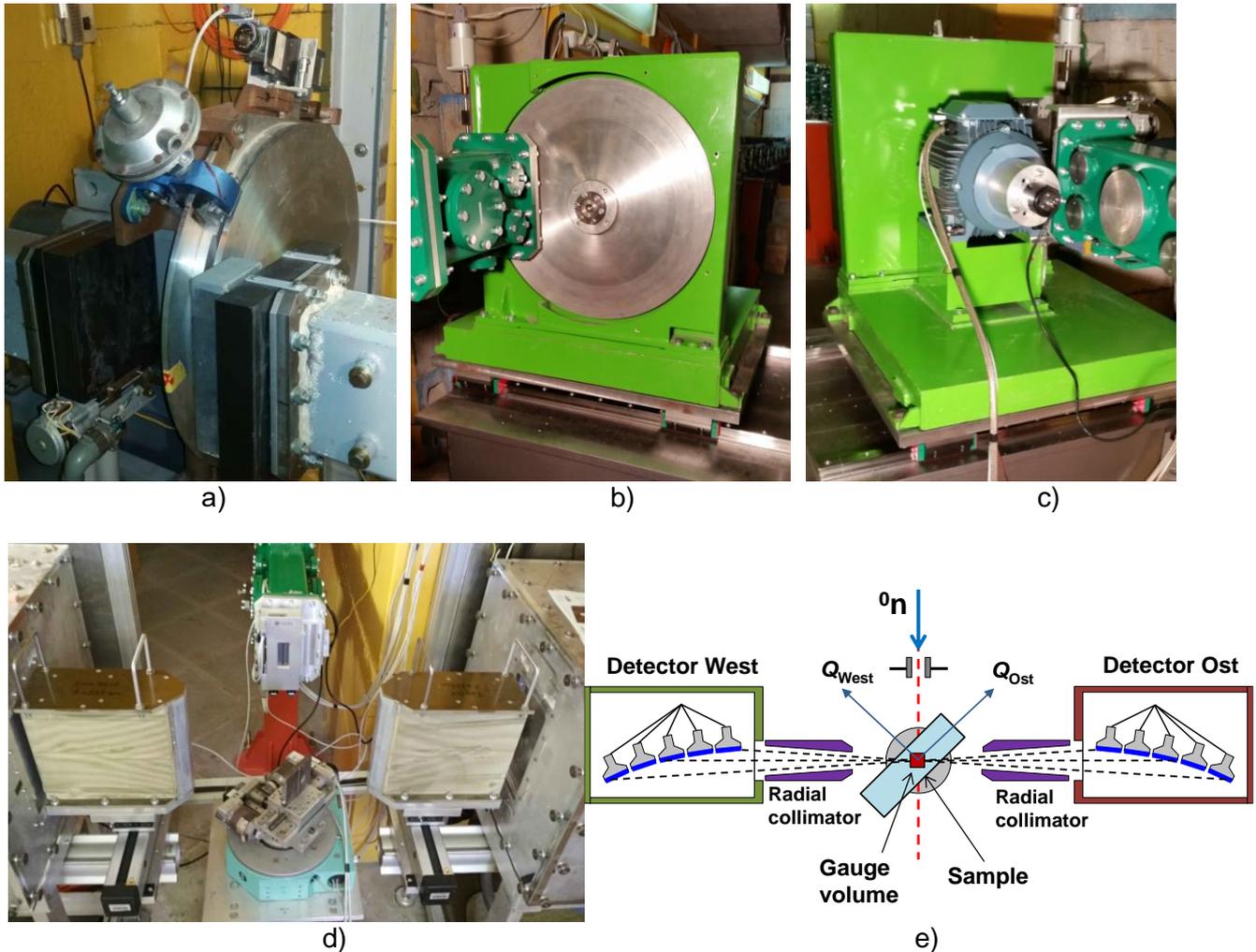


Рис. 25. а) Старый фурье-прерыватель FSS, установленный в штатном положении в разрыве старого зеркального нейтроновода. Новый фурье-прерыватель FSS: б) вид спереди, защитный кожух диска снят; в) вид сзади. д) Место образца на дифрактометре FSS. Видны: окончание зеркального нейтроновода с диафрагмой, гониометр с исследуемым образцом, детекторы Ost и West с установленными перед ними радиальными коллиматорами на платформах перемещения. е) Схема эксперимента по изучению остаточных напряжений в объемном образце на FSS с помощью двух детекторов при углах рассеяния  $2\theta = \pm 90^\circ$ .

Результаты тестовых дифракционных экспериментов на стандартном образце железа показали, что после замены фурье-прерывателя разрешающая способность FSS значительно улучшилась из-за уменьшения временной компоненты функции разрешения (рис. 26). При этом фактор выигрыша для полной функции разрешения FSS достигает значений 2.6 при  $d_{hkl} = 0.5 \text{ \AA}$  и 1.19 при  $d_{hkl} = 2.5 \text{ \AA}$  при увеличении максимальной скорости прерывателя с 2000 об/мин до 6000 об/мин. При необходимости перед детекторами Ost и West могут устанавливаться радиальные коллиматоры с фокусным расстоянием  $F = 230$  мм и с пространственным разрешением 1 или 2

мм, обеспечивающие выделение малого рассеивающего объема в глубине исследуемого образца (рис. 25). Радиальные коллиматоры установлены на платформах перемещения, которые позволяют дистанционно вводить их в рассеянный пучок и выводить из пучка, что позволяет формировать необходимым образом рассеянный пучок нейтронов в эксперименте. - радиальные коллиматоры установлены на модули перемещения для ввода/вывода из пучка. Реализовано удаленное управление перемещениями обоих коллиматоров из скриптов SONIX.

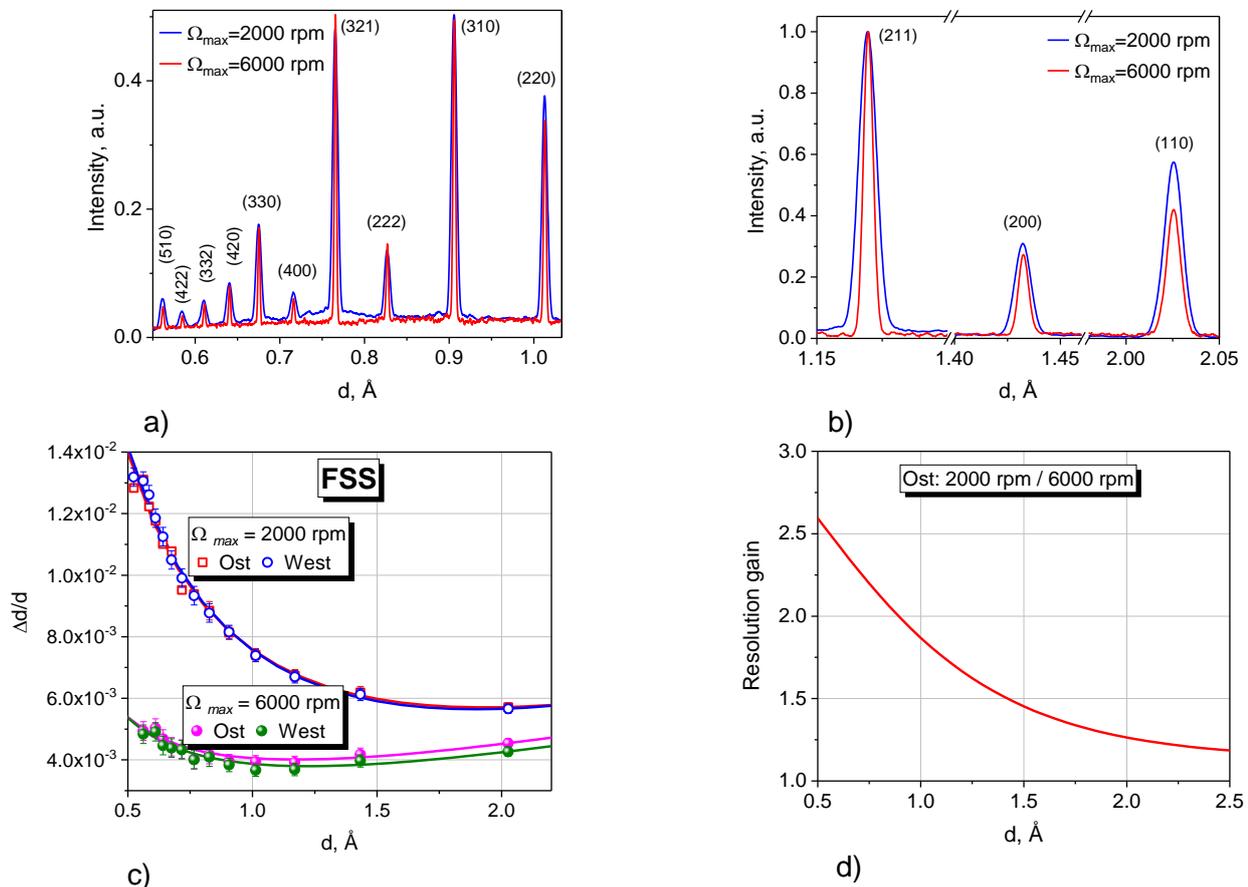


Рис. 26. Сравнение дифракционных RTOF спектров высокого разрешения, измеренных на стандартном образце железа со старым ( $\Omega_{max} = 2000$  об/мин) и новым ( $\Omega_{max} = 6000$  об/мин) фурье-прерывателями,  $d_{hkl} = 0.55 \div 1.033$  Å (a),  $d_{hkl} = 1.15 \div 2.05$  Å (b). Сравнение функций разрешения  $\Delta d/d$ , измеренных на стандартном образце железа со старым ( $\Omega_{max} = 2000$  об/мин) и новым ( $\Omega_{max} = 6000$  об/мин) прерывателями (c). Фактор выигрыша для функции разрешения  $\Delta d/d$  FSS при увеличении макс. скорости прерывателя с 2000 об/мин до 6000 об/мин (d).

Завершены основные работы по созданию метода изотоп-идентифицирующей рефлектометрии нейтронов. В методе используется наряду с регистрацией нейтронов регистрация вторичного излучения – заряженных частиц, гамма-квантов и нейтронов, испытавших переворот спина. Метод позволяет исследовать в слоистых структурах пространственный профиль (распределение) большого круга изотопов и магнитных элементов с разрешением 1 нм. Дальнейшее развитие экспериментальной техники позволит как расширить круг изотопов, так и увеличить пространственное разрешение до атомного уровня (один ангстрем). В качестве вторичного излучения также предполагается в дальнейшем регистрировать осколки деления ядер, что позволит проводить исследования изотопов из актинидного ряда элементов.

На канале №10 реактора ИБР-2 проведены работы по разделению защиты каналов 10А и 10Б в экспериментальном зале для возможности реализации независимых работ по модернизации и установке нового оборудования на рефлектометре ГРЭИНС (10Б) и комбинированной станции по малоугловому рассеянию/нейтронной радиографии с холодными нейтронами (10А). Разработан и изготовлен первый вариант ячейки с контролем температуры

(диапазон 25°-150°C) и влажности (диапазон 10-99%) для измерений на рефлектометре ГРЭИНС (рис. 27).

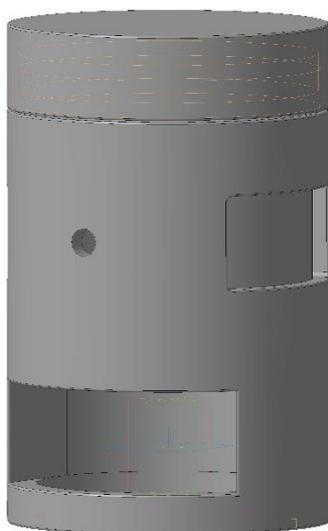


Рис. 27. Схема основной части ячейки с контролем температуры и влажности (дополнительные элементы – ТЭН, термоизоляция, контроллеры  $T$  и  $\phi$ , ванночки с солевыми растворами).

Проведены методические работы по модификации поверхности кристаллов кремния с целью создания оксидных слоев (гидрофобных и гидрофильных) с регулируемой толщиной методом высокотемпературного отжига. Проведена характеристика слоев методами АСМ, нейтронной и рентгеновской рефлектометрии (рис. 28). Данная процедура использована для модификации кремниевых подложек в экспериментах по нейтронной рефлектометрии на установке ГРЭИНС.

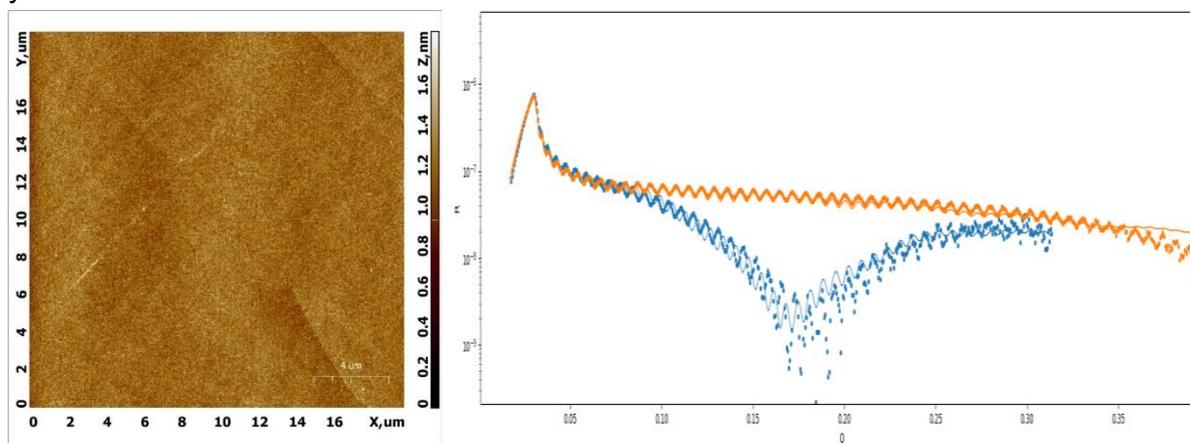


Рис. 28. Создание оксидных слоев на кремниевых подложках. Слева – АСМ снимок поверхности, демонстрирующий малую шероховатость слоя. Справа – пример измерений методом рентгеновской рефлектометрии: оранжевый цвет – подложка с гидрофобным оксидным слоем (толщина ~80 нм), синий цвет – подложка с оксидным слоем и нанесенным монослоем DMPC.

В группе ФДВР проводится разработка нового оборудования для изучения материалов в режиме *in situ/operando*. В настоящий момент созданы и тестируются электрохимические ячейки для синхротронных экспериментов с возможностью контроля температуры посредством жидкого теплоносителя (рис. 29).

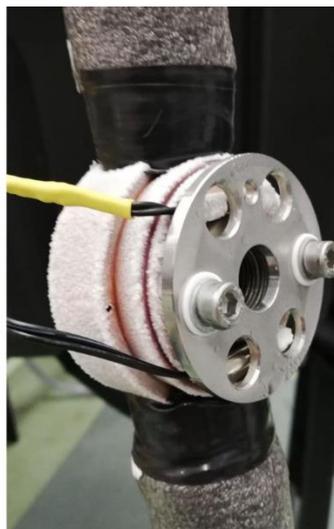
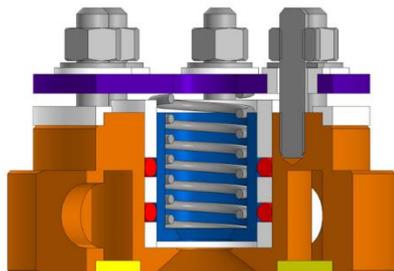


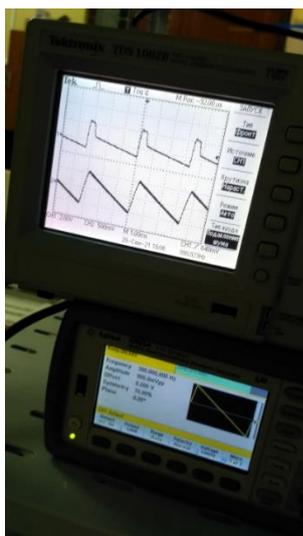
Рис. 29. Разработанная электрохимическая ячейка для дифракционных и малоугловых исследований электродных материалов при заданных температурных условиях на синхротронных источниках.

В рамках проекта создания установки спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (SESANS) с линейно растущими магнитными полями на 9-ом канале реактора ИБР-2 были проведены работы по модернизации питающей электроники для спиновых ротаторов (рис.30). Основу электроники составляет связка из генератора пилообразных импульсов и мощного усилителя сигнала, увеличивающего ток до требуемых значений. На данном этапе спроектирован и создан вариант исполнения усилителя с более высоким КПД в сравнении с предыдущей реализацией. Проведены предварительные оценки качества линейности усиленных сигналов с токами высокой амплитуды, полученных с помощью модернизированного усилителя. Спроектирована эффективная система охлаждения спиновых ротаторов и питающей электроники, включающая в себя возможность точного регулирования потоком охладителя. В качестве охлаждающего чиллера применяется установка фирмы Deltatherm RKV 2.5.

(a)



(b)



(c)



Рис. 30. Оборудование для опции SESANS на установке РЕФЛЕКС. а) Модернизированный усилитель мощности; б) Оценка качества усиленного сигнала с помощью модернизированного усилителя; в) Охлаждающая установка RKV 2.5, организующая отвод тепла от систем питающей электроники и спиновых ротаторов.

В сотрудничестве с НИЦ КИ ПИЯФ выполнены работы по испытанию модели радиочастотного адиабатического флиппера для установки спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов SESANS на реакторе ПИК [30]. Пространственное расщепление нейтронных волн в полевой конфигурации с радиочастотными флипперами происходит за счет поглощения/испускания виртуального фотона энергии радиочастотным полем катушек, настроенных на резонанс с ларморовской прецессией спина нейтрона. Испытания конструкции флиппера (рис. 31) показали высокую эффективность переворота спина, до 0.975 (в точке настройки  $\lambda = 2.2 \text{ \AA}$ ), для широкого диапазона частот полей магнита прецессии. В то же время, если в диапазоне частот от 150 до 365 кГц эффективность сохраняется для длинноволновых нейтронов, для диапазона частот 1 - 2 МГц обнаруживается снижение в длинноволновой части спектра. По результатам испытаний проведена модернизация конструкции флиппера.

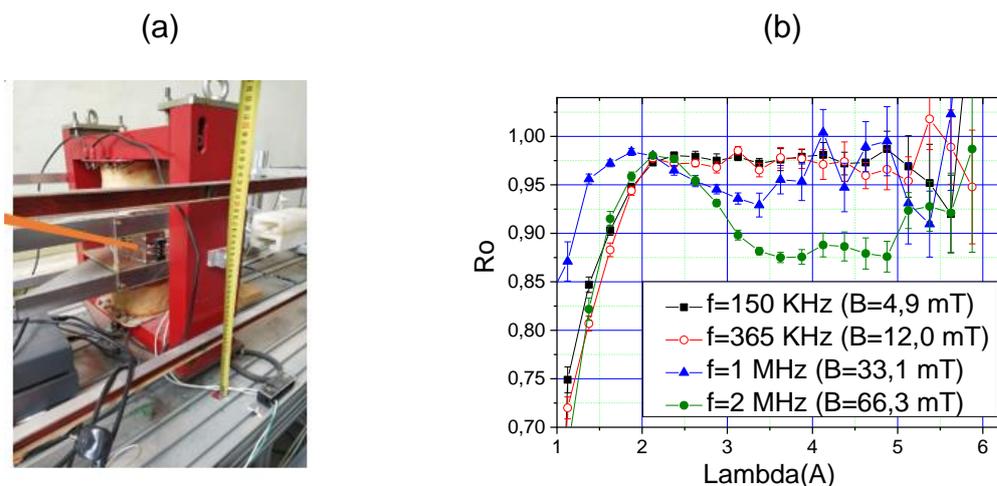


Рис. 31. (а) Фото магнита прецессии с радиочастотным флиппером (отмечен стрелкой) на установке SESANS реактора ПИК (НИЦ КИ ПИЯФ). (б) Измеренные (установка РЕФЛЕКС) зависимости вероятности переворота спина нейтрона в радиочастотном флиппере от длины волны нейтрона при разных рабочих частотах.

Продолжено исследование плоских нейтронных волноводов, преобразующих обычный коллимированный пучок нейтронов в узкий расходящийся микропучок, выходящий из торца волноводного слоя представляют. Данные волноводы представляют собой трёхслойные структуры с плотностью длины рассеяния (ПДР) нейтронов в виде потенциальной ямы. Узкий микропучок нейтронов шириной порядка нескольких микрометров может использоваться для исследования локально неоднородных микроструктур с высоким пространственным разрешением (рис. 32). Измерения проведены на времяпролётном рефлектометре РЕМУР. Длина волны нейтронов для микропучка резонанса порядка  $n=0$  и угла скольжения падающего пучка  $0.211^\circ$  равна  $2.5 \text{ \AA}$ . Исследована волноводная структура  $\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}(20 \text{ нм})/\text{Cu}(150)/\text{Ni}_{67}\text{Cu}_{33}(50)//\text{Si}$ (подложка). Сплав  $\text{Ni}(67 \text{ ат. \%}) \text{Cu}(33 \text{ ат. \%})$  является немагнитным при комнатной температуре и обладает высоким значением ПДР. Установлено, что ширина микропучка на месте образца зависит от расходимости микропучка и расстояния от волновода до образца. Полученные экспериментальные результаты показали, что расходимость микропучка увеличивается с ростом расходимости падающего пучка. При экстраполяции прямой линии к нулевой расходимости падающего пучка получено значение, которое соответствует расчётному значению вклада дифракции Фраунгофера вместе с пространственным разрешением позиционно-чувствительного детектора (ПЧД). Сделан вывод, что увеличение расходимости микропучка связано с увеличением спектральной ширины резонансов внутри волновода.

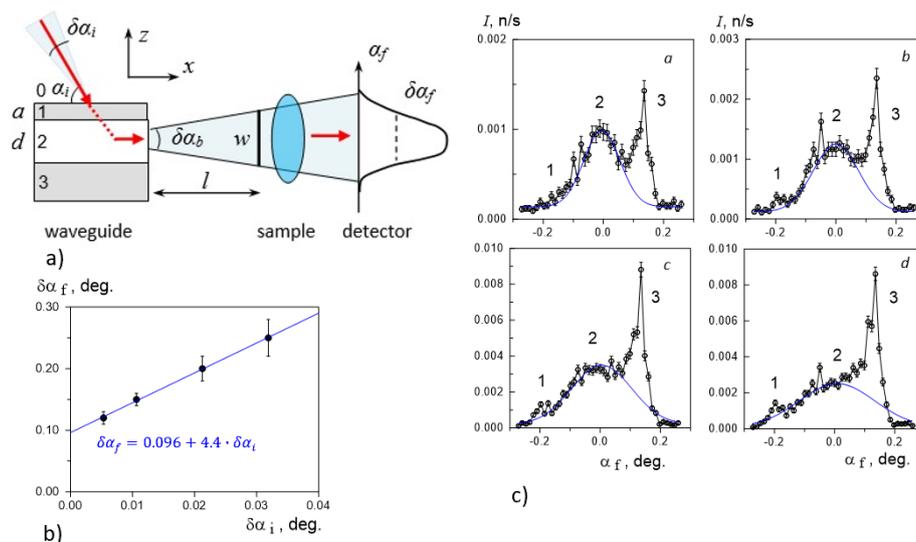


Рис. 32. а) Схема эксперимента по исследованию плоских нейтронных волноводов. б) Зависимость расходимости микропучка от расходимости падающего пучка. в) Зависимость угловой расходимости микропучка (FWHM) от расходимости падающего пучка.

## Литература

1. D.P. Kozlenko, O.N. Lis, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, N.M. Belozerova, B.N. Savenko "Spin induced negative thermal expansion and spin-phonon coupling in van der Waals material CrBr<sub>3</sub>", npj Quantum materials 6: 19 (2021).
2. N.T. Dang, D.P. Kozlenko, R.P. Madhogaria, D.T. Khan, L.T.P. Thao, S.E. Kichanov, B.N. Savenko, A.V. Rutkauskas, N. Tran, T.L. Phan, L.H. Khiem, T. A. Tran, and M.H. Phan "Spin-glass induced ferroelectricity in BaYFeO<sub>4</sub>: A high magnetic field study", Phys. Rev. Materials 5, 044407 (2021).
3. A.M. Balagurov, I.A. Bobrikov, S.V. Sumnikov, I.S. Golovin "Coherent cluster ordering in Fe-xAl and Fe-xGa alloys", Journal of Alloys and Compounds 895, 162540 (2021).
4. S.V. Sumnikov, I.A. Bobrikov, A.M. Balagurov, I.S. Golovin "Bulk vs. surface structural phases in Fe-27Ga alloy", J. Appl. Cryst. (2021), submitted.
5. T.N. Vershinina, Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Boev A.O., A.M. Balagurov, Mohamed A.K., Golovin I.S. "Structure evolution of as-cast metastable Fe-38Ga alloy towards equilibrium", Journal of Alloys and Compounds 889, 161782 (2022).
6. L.Y. Sun, Sumnikov S.V., Islamov A.Kh., Vasin R.N., Bobrikov I.A., Balagurov A.M., Cheng W.C., Churyumov A.Y., Golovin I.S. "Spinodal decomposition influence of austenite on martensitic transition in a Mn-13 at.%Cu alloy", Journal of Alloys and Compounds 853, 157061 (2021).
7. L. Sun, Vasin R.N., Islamov A.K., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Balagurov A.M., Guo W., Cheng W.C., Golovin I.S. "Spinodal decomposition in ternary Mn-Cu-Cr alloy and its influence on martensitic transition temperatures", Journal of Alloys and Compounds 884, 161082 (2021).
8. V.A. Turchenko, Trukhanov S.V., Kostishin V.G., Damay F., Porcher F., Klygach D.S., Vakhitov M.G., Lyakhov D., Michels D., Bozzo B., Fina I., Almessiere M.A. "Features of structure, magnetic state and electrodynamic performance of SrFe<sub>12-x</sub>In<sub>x</sub>O<sub>19</sub>" Scientific Reports 11(1), 18342(1-14) (2021).
9. М.А. Семкин, Урусова Н.В., Хосер А., Бескровный А.И., Пирогов А.Н. «Магнитные структуры кристалла LiNi<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>PO<sub>4</sub>», Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования "Magnetic structures of the LiNi<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>PO<sub>4</sub> crystal" J. of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques 15(5), 890-895 (2021).
10. O.V. Tomchuk, Avdeev M.V., Aksenov V.L., Shulenina A.V., Ivankov O.I., Ryukhtin V., Vékás L., Bulavin L.A., Temperature-dependent fractal structure of particle clusters in aqueous ferrofluids by small-angle scattering, Col. Surf. A 613, 126090 (2021).

11. I.Safarik, Prochazkova, J., Schroer, M.A., Garamus V.M., Kopcansky P., Timko M., Rajnak M., Karpets M., Ivankov O.I., Avdeev M.V., Petrenko V.I., Bulavin, L., Pospiskova, K., Cotton Textile/Iron Oxide Nanozyme Composites with Peroxidase-like Activity: Preparation, Characterization, and Application, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 13, 23627–23637 (2021).
12. I.V. Korolkov, A.V. Zibert, L.I. Lissovskaya, K. Ludzik, M. Anisovich, A.L. Kozlovskiy, A.E. Shumskaya, M. Vasilyeva, D.I. Shlimas, M. Jażdżewska, B. Marciniak, R. Kontek, D. Chudoba, M.V. Zdorovets “Boron and Gadolinium Loaded Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Nanocarriers for Potential Application in Neutron Capture Therapy”, *International Journal of Molecular Sciences* 22 (16), 8687 (2021).
13. O.V.Tomchuk, Avdeev M.V., Aksenov V.L., Ivankov O.I., Len A., Turchenko V.A., Zabulonov Y.L., Bulavin L.A., Regulation of nanoporous structure of detonation nanodiamond powders by pressure: SANS study, *Proc. ACNS 2021, Fuller. Nanotub. Carbon Nanostr.* (2021) in press.
14. A.A.Tomchuk, Voiteshenko I.S., Shershakova N.N., Andreev S.M., Turetskiy E.A., Khaitov M.R., Ivankov O.I., Tropin T.V., Tomchuk O.V., Avdeev M.V., “Comparative structural study of C<sub>60</sub>-lysine and C<sub>60</sub>-piperazine biocompatible aqueous solutions”, *Proc. ACNS 2021, Fuller. Nanot. Carbon Nanostructures*, (2021) in press.
15. O.V.Tomchuk, Krasnikov D.V., Kosiachkin Y.N., Ilatovskii D.A., Avdeev M.V., Nasibulin A.G., “Specular reflectometry studies of alcohol-induced densification for thin films of single-walled carbon nanotubes”, *Proc. CMR@IBR-2 2020, J. Surf. Investigation* 15 (2021) 773-776.
16. D.I. Devyaterikov, V.V. Proglyado, V.D. Zhaketov, Yu.V. Nikitenko, O.A. Kondrat’ev, E.M. Pashaev, I.A. Subbotin, V.I. Zverev, E.A. Kravtsov, V.V. Ustinov “Influence of Dimensional Effects on the Curie Temperature of Dy and Ho Thin Films”, *Physics of Metals and Metallography* 122, No. 5, pp. 465-471 (2021).
17. O.I.Ivankov, Murugova T.N., Ermakova E.V. Kondela T., Badreeva D., Hrubovčák P., Soloviov D.V., Tsarenko A., Rogachev A.V., Kuklin A.I., Kučerka N. “Amyloid-beta peptide (25–35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes” *Sci Rep* 11, 21990 (2021).
18. Y.L.Ryzhykau, Orekhov P.S., Rulev M.I. et al. “Molecular model of a sensor of two-component signaling system”, *Sci Rep* 11, 10774 (2021).
19. Y.L.Ryzhykau, Vlasov A.V., Orekhov P.S., Rulev M.I., Rogachev A.V., Vlasova A.D., Kazantsev A.S., Verteletskiy D.P., Skoi V.V., Brennich M.E., Pernot P., Murugova T.N., Gordeliy V.I. & Kuklin A.I. “Ambiguities in and completeness of SAS data analysis of membrane proteins: the case of the sensory rhodopsin II–transducer complex”, *Acta Cryst. D* 77, 1386-1400 (2021).
20. P.Hrubovčák, Dushanov E., Kondela T., Tomchuk O., Kholmurodov K., Kučerka N., Reflectometry and molecular dynamics study of the impact of cholesterol and melatonin on model lipid membranes, *Eur. Biophys. J.* 50, 1025-1035 (2021).
21. M.-E.Barbinta-Patrascu, Gorshkova, Y.; Ungureanu, C.; Badea, N.; Bokuchava, G.; Lazea-Stoyanova, A.; Bacalum, M.; Zhigunov, A.; Petrovič, S. Characterization and Antitumoral Activity of Biohybrids Based on Turmeric and Silver/Silver Chloride Nanoparticles. *Materials* 14, 4726 (2021).
22. Y.Gorshkova, Barbinta-Patrascu, M.-E.; Bokuchava,G.; Badea, N.; Ungureanu, C.; Lazea-Stoyanova, A.; Răileanu, M.;Bacalum, M.; Turchenko, V.; Zhigunov, A.; et al. Biological Performances of Plasmonic Biohybrids Based on Phyto-Silver/Silver Chloride Nanoparticles. *Nanomaterials*, 11, 1811 (2021).
23. O.P.Artykulnyi, Avdeev M.M., Kosiachkin Y.M., Petrenko V.I., Safarik I., Bulavin L.A., Neutron investigation of interaction between anionic surfactant micelles and poly(ethylene glycol) polymer brush system, *Nucl. Phys. Atom. Energy* 22, 149-156 (2021).
24. A.S.Ospennikov, Gavrilov A.A., Artykulnyi O.P., Kuklin A.I., Novikov V.V., Shibaev A.V., Philippova O.E., Transformations of wormlike surfactant micelles induced by a water-soluble monomer, *J. Col. Interface Sci.* 602, 590-601 (2021).
25. Ł. Hetmanczyk, E.A. Goremychkin, J. Waliszewski, M.V. Vener, P. Lipkowski, P.M. Tolstoy, A. Filarowski “Spectroscopic Identification of Hydrogen Bond Vibrations and Quasi-Isostructural Polymorphism in N-Salicylideneaniline” *Molecules* 26, 5043 (2021).
26. A. Dadej, A. Woźniak-Braszak, P. Bilski, H. Piotrowska-Kempisty, M. Józkowiak, M. Geszke-Moritz, M. Moritz, D. Dadej, A. Jelińska “Modification of the Release of Poorly Soluble Sulindac with the APTES-Modified SBA-15 Mesoporous Silica” *Pharmaceutics* 13, 1693 (2021).

27. L. Millán, G. Bokuchava, R. Fernández, I. Papushkin, G. González-Doncel "Further insights on the stress equilibrium method to investigate macroscopic residual stress fields: case of Aluminum alloys cylinders", *J. of Alloys and Compounds* 861, 158506 (2021).
28. P.Nekhoroshkov, Zinicovscaia I., Nikolayev D., Lychagina T., Pakhnevich A., Yushin N., Bezuidenhout J. "Effect of the elemental content of shells of the bivalve mollusks (*Mytilus galloprovincialis*) from Saldanha Bay (South Africa) on their crystallographic texture", *Biology* 10(11), 1093 (2021).
29. B.Bakirov, Saprykina I., Kichanov S., Mimokhod R., Sudarev N., Kozlenko D. "Phase Composition and Its Spatial Distribution in Antique Copper Coins: Neutron Tomography and Diffraction Studies", *Journal of Imaging* 7, 129 (2021).
30. L.A. Axelrod, V. Kraan, D. Zhokhov, A. A. Sumbatyan, A. V. Nagorny, V.V. Tarnavich, Yu.O. Chetverikov "Current status of construction of the SESANS instrument at the PIK reactor", *Proc. RNIKS-2021, J. Surf. Investigation* (2021) submitted.

## Публикации

### 1. Atomic and magnetic structures (diffraction)

1. Andrianov A. VI., Mendive-Tapia E., Beskrovnyi A. I., Staunton J. B. "Collapse of the region of magnetic phase diagram of the elemental terbium under strain-induced Lifshitz transition" *PhysRev B* 104, 174435 (2021).
2. Annamalai K., Radha R., Kichanov S.E., Navaneethan M., Balakumar S. "Ice Bath Assisted BiMn<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (Mullite) Phase Synthesis, Structural and Compositional Analysis under Different Bi Concentration", *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 10, 6 (2021) 061001.
3. Balagurov A.M., D.Yu. Chernyshov, A.A. Bosak, I.A. Bobrikov, S.V. Sumnikov, I.S. Golovin "In-grain phase separation and structural ordering in Fe-Ga alloys seen from reciprocal space" *Intermetallics* 128 (2021) 107016 (1-4).
4. Balagurov A.M., I.A. Bobrikov, S.V. Sumnikov, I.S. Golovin, Coherent cluster ordering in Fe-xAl and Fe-xGa alloys, *Journal of Alloys and Compounds* (2021) 895, 162540.
5. Belozerova N.M., Kichanov S.E., Jiráček Z., Kozlenko D.P., Kaman O., Lukin E.V., Savenko B.N. "The crystal and magnetic structure of nanostructured manganite La<sub>0.53</sub>Sr<sub>0.47</sub>MnO<sub>3</sub> at high pressure", *Materials Chemistry and Physics*, 262 (2021) 124310.
6. Burzo E., Vlaic P., Kozlenko D. P., and Rutkauskas A.V. «Exchange interactions in rare-earth-transition metal compounds» *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 15 (3) (2021) 520-526.
7. Burzo E., Vlaic P., Kozlenko D. P., Rutkauskas A.V. «High-pressure neutron diffraction study of RCo<sub>2</sub> compounds» *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 160 (2022) 110330.
8. Clementyev E.S., D.A.Serebrennikov, V.V.Sikolenko "Metal matrix composites based on valence-unstable system", *IOP Conf.Ser.:Mater.Sci.Eng.* 1100 (2021), 012040.
9. Coak M.J., Jarvis D.M., Hamidov H., Wildes A.R., Paddison J.A.M., Liu C., Haines C.R.S., Dang N.T., Kichanov S. E., Savenko B. N., Lee S., Kratochvílová M., Klotz S., Hansen T. C., Kozlenko D. P., Park Je-G., Saxena S.S. "Emergent Magnetic Phases in Pressure-Tuned van der Waals Antiferromagnet FePS<sub>3</sub>" *Physical Review X*, 11 (2021) 011024.
10. Dang N.T., Rutkauskas A.V., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Nguyen H.H., Tran N., Lee M.Y., Lee B.W., Phan T.L., Khiem L.H., Nghia N.X., Thao L.T.P., Tran T.A., Lieu N.T.T., Khan D.T., "Strong Impact of Cr Doping on Structural and Magnetic Properties of Bi<sub>0.5</sub>La<sub>0.5</sub>Fe<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>O<sub>3-δ</sub>", *Journal of Electronic Materials*, 50, 3 (2021) 1340-1348.
11. Darwish M.A., Abosheisha H.F., Morchenko A.T., Kostishyn V.G., Turchenko V.A., Trukhanova E.L., Astapovich K.A., Trukhanov A.V. "Impact of the Zr-substitution on phase composition, structure, magnetic, and microwave properties of the BaM hexaferrite" *Ceramics International* 47(12) (2021) 16752–16761.
12. Darwish M.A., Afifi A.I., Abd El-Hameed A.S., Abosheisha H.F., Henaish A.M.A., Salogub D., Morchenko A.T., Kostishyn V.G., Turchenko V.A., Trukhanov A.V. "Can hexaferrite composites be used as a new artificial material for antenna applications?" *Ceramics International* 47(2) (2021) 2615–2623.
13. Darwish M.A., Morchenko A.T., Abosheisha H.F., Kostishyn V.G., Turchenko V.A., Almessiere M.A., Slimani Y., Baykal A., Trukhanov A.V. "Impact of the exfoliated graphite on magnetic and microwave properties of the hexaferrite-based composites" *J. of Alloys and Compounds*, 878 (2021) 160397(1-10).

14. El-Sayed S., Hashhash A., Refai H. S., Rutkauskas A. V., Baleidy W. S., Lis O. N., Hassen A. «The detailed studies of the structural and magnetic properties of hexaferrites  $Ba_{1-x}Sr_xFe_{12}O_{19}$  for  $0.0 \leq x \leq 0.75$ », *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32 (2021) 10977-10990.
15. Feyngenson M, D.Y.Novoselov, M.A.Mazannikova, D.M.Korotin, V.Bushinsky, D.Karpinsky, M.Hanfland, A.Sazonov, S.Savvin, F.Porcher, R.Svetogorov, A.Veligzhanin, S.Tiutiunnikov, S.Arumugan and V.Sikolenko "Pressure-induced structural and magnetic phase transitions in  $La_{0.75}Ba_{0.25}CoO_{2.9}$  studied with scattering methods and first-principle calculations" *Phys.Rev B* 104 (2021).
16. Golosova N.O., Kozlenko D.P., Lukin E.V., Kichanov S.E., Savenko B.N., 'High pressure effects on the crystal and magnetic structure of 160Gd metal', *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 540 (2021) 168485.
17. Golovin I.S., V.V. Palacheva, A.K. Mohamed, J. Cifre, L.Yu. Dubov, N.Yu. Samoylova, A.M. Balagurov "Mechanical spectroscopy of atomic ordering in Fe-(16-21)Ga-RE alloys". *J. Alloy and Comp.* 864 (2021) 158819 (1-14).
18. Golovin I.S., V.V. Palacheva, A.K. Mohamed, J. Cifre, L.Yu. Dubov, N.Yu. Samoylova, A.M. Balagurov "Mechanical spectroscopy of atomic ordering in Fe-(23-38)Ga-RE alloys". *J. Alloy and Comp.* 874 (2021) 158882 (1-13).
19. Hongliang Wang , Xinzhi Liu, Kai Sun, Xiaobai Ma, Hao Guo, I.A. Bobrikov, Yu Sui, Qingyuan Liu, Yuanhua Xia, Xiping Chen, Zheng-Yao Li , Lijie Hao , Yuntao Liu, Dongfeng Chen "Competition of ferromagnetism and antiferromagnetism in Mn-doped orthorhombic  $YCrO_3$ " *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 535 (2021) 168022.
20. Ivanshina O., Zuba I., Sumnikov S.V., Nubiyev A., Pawlukoja A. "L-Tryptophan Metal-Organic Frameworks Based on Transition Metals: Preparation, Characterization and Application for Ruthenium 3+ Ions Sorption" *AIP Conference Proceedings* 2377 (2021) 020001(1-5).
21. Jabarov S.H., Ismayilova N.A., Kozlenko D.P., Mammadov T.G., Mamedov N.T., Orudzhev H.S., Kichanov S.E., Mikailzade F.A., Kasumova E.K., Dang N.T. "Structural and elastic properties of  $TlInSe_2$  at high pressure", *Solid State Sciences*, 111, (2021) 106343.
22. Kalanda, N., Karpinsky, D., Bobrikov, I. et al. «Interrelation among superstructural ordering, oxygen nonstoichiometry and lattice strain of double perovskite  $Sr_2FeMoO_6-\delta$  materials» *J Mater Sci* 56 (2021) 11698–11710.
23. Karpinsky D.V., M.V.Silibin, D.V.Zhaludkevich, S.I.Latushka, A.V.Sysa, V.V.Sikolenko, A.L.Zhaludkevich, V.A.Khomchenko, A.Franz, K.Mazeika, D.Baltrunas, A.Kareiva "Magnetic properties of  $BiFeO_3$ - $BaTiO_3$  ceramics in the morphotropic phase boundary: a role of crystal structure and structural parameters" *J.Mag.Mag.Mat.* 539 (2021).
24. Karpinsky Dmitry V., Maxim V. Silibin, Dmitry V. Zhaludkevich, Siarhei I. Latushka, Vadim V. Sikolenko, Daniel M. Többens, Denis Sheptyakov, Vladimir A.Khomchenko and Alexei A. Belik "Crystal and Magnetic Structure Transitions in  $BiMnO_{3+\delta}$  Ceramics Driven by Cation Vacancies and Temperature" *Materials* 14 (2021), 5805.
25. Kozlenko D.P., Dang N.T., Madhogaria R.P., Thao L.T.P., Kichanov S.E., Tran N., Khan D.T., Truong-Tho N., Phan T.L., Lee B.W., Savenko B.N., Rutkauskas A.V., Khiem L.H., Nguyen H.B., Tran T.A., Kmječ T., Kohout J., Chlan V., Phan M.H. "Competing magnetic states in multiferroic  $BaYFeO_4$ : A high magnetic field study", *Physical Review Materials*, 5 (2021) 044407.
26. Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Lukin E.V., Savenko B.N. "High-Pressure Neutron Diffraction Study of the Crystal and Magnetic Structure of Materials at the Pulsed Reactor IBR-2: Current Opportunities and Prospects" *Crystallography Reports*, 66, 2 (2021) 303-313.
27. Kozlenko D.P., Lis O.N., Kichanov S.E., Lukin E.V., Belozeroва N.M., Savenko B.N. "Spin-induced negative thermal expansion and spin–phonon coupling in van der Waals material  $CrBr_3$ ", *npj Quantum Materials*, 6 (2021) 19.
28. Kozlenko D.P., Yushankhai V. Yu., Hayn R., Richter M., Golosova N.O., Kichanov S.E., Lukin E.V., Savenko B.N. "Pressure-induced structural transition and antiferromagnetism in elemental terbium", *Physical Review Materials*, 5, 3 (2021) 034402.
29. Leineweber A., H. Becker, A. Boev, I.A. Bobrikov, A.M. Balagurov, I.S. Golovin "Fe<sub>13</sub>Ga<sub>9</sub> intermetallic in bcc-base Fe-Ga alloy" *Intermetallics* 131 (2021) 107059 (1-8).
30. Lis O.N., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Belozeroва N.M., Lukin E.V., Balakumar S., Savenko B.N. "Pressure-induced structural phase transitions in bismuth tungstate  $Bi_2WO_6$ ", *Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*, 77 (2021) 488-494.
31. Lushnikov S. A., T. V. Filippova, Ivan Bobrikov, Phase Transformations of a  $CeCo_3$ -Based Intermetallic Hydride at Temperatures from 200 to 950°C, *Inorganic Materials* 57(8) (2021) 775-780.
32. Meng Sun, Anatoly Balagurov, Ivan Bobrikov, Xianping Wang, Wen Wen, I.S. Golovin, Qianfeng Fang "High damping in Fe-Ga-La alloys: Phenomenological model for magneto-mechanical hysteresis damping and experiment" *Journal of Materials Science & Technology* 72 (2021) 69-80.
33. Pavluchina O.O., V.V. Sokolovskiy, M.V. Matyunina, M.A. Zagrebin, O.N. Miroshkina, D.R. Baigutlin, V.D. Buchelnikov, A.K. Mohamed, V.V. Palacheva, V.A. Palachev, A.M. Balagurov, I.S. Golovin "Phase transitions in Fe-(23-24)Ga alloys: experimental results and modelling" *J. Alloy and Comp.* 885 (2021) 160917 (1-10).

34. Sun L., Vasin R.N., Islamov A.K., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Balagurov A.M., Guo W., Cheng W.C., Golovin I.S. «Spinodal decomposition in ternary Mn-Cu-Cr alloy and its influence on martensitic transition temperatures» *Journal of Alloys and Compounds*. 884 (2021) 161082.
35. Sun L.Y., Sumnikov S.V., Islamov A.Kh., Vasin R.N., Bobrikov I.A., Balagurov A.M., Cheng W.C., Churyumov A.Y., Golovin I.S. Spinodal decomposition influence of austenite on martensitic transition in a Mn-13 at.%Cu alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. (2021) 853, 157061.
36. Trukhanov A.V., Darwish K.A., Salem M.M., Hemeda O.M., Abdel Ati M.I., Darwish M.A., Kaniukov E.Y., Podgornaya S.V., Turchenko V.A., Tishkevich D.I., Zubar T.I., Astapovich K.A., Kostishyn V.G., Trukhanov S.V. "Impact of the heat treatment conditions on crystal structure, morphology and magnetic properties evolution in BaM nanohexaferrites" *J. of Alloys and Compounds* 866 (2021) 158961(1-12).
37. Trukhanov A.V., Turchenko V.A., Kostishin V.G., Damay F Porcher., F., Lupu N., Bozzo B., Fina I., Polosan S., Silibin M.V., Salem M.M., Tishkevich D.I., Trukhanov S.V. "The origin of the dual ferroic properties in quasi-centrosymmetrical SrFe<sub>12-x</sub>In<sub>x</sub>O<sub>19</sub> hexaferrites" *J. of Alloys and Compounds*, 886 (2021) 161249(1-9).
38. Trukhanov S.V., Zubar T.I., Turchenko V.A., Trukhanov An.V., KmječT., Kohout J., Matzui L., Yakovenko O., Vinnik D.A., Starikov A.Yu., Zhivulin V.E., Sombra A.S. B., Zhou D., Jotania R.B., Singh C., Trukhanov A.V. "Exploration of crystal structure, magnetic and dielectric properties of titanium-barium hexaferrites" *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, 272 (2021) 115345(1-11).
39. Turchenko V., Kostishin V.G., Trukhanov S., Damay F., Balasoju M., Bozzo B., Fina I., Burkhovetsky V.V., Polosan S., Zdorovets M.V., Kozlovskiy A.L., Astapovich K.A., Trukhanov A., Structural features, magnetic and ferroelectric properties of SrFe<sub>10.8</sub>In<sub>1.2</sub>O<sub>19</sub> compound, *Materials Research Bulletin* 138 (2021) 111236.
40. Turchenko V.A., Trukhanov S.V., Kostishin V.G., Damay F., Porcher F., Klygach D.S., Vakhitov M.G., Lyakhov D., Michels D., Bozzo B., Fina I., Almessiere M.A. "Features of structure, magnetic state and electrodynamic performance of SrFe<sub>12-x</sub>In<sub>x</sub>O<sub>19</sub>" *Scientific Reports*, 11(1) (2021) 18342(1-14).
41. Vershinina T.N., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Boev A.O., A.M. Balagurov, Mohamed A.K., Golovin I.S. «Crystal structure and phase composition evolution during heat treatment of Fe-45Ga alloy» *Intermetallics* 131 (2021) (1–5), 107110.
42. Vershinina T.N., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Boev A.O., A.M. Balagurov, Mohamed A.K., Golovin I.S. «Structure evolution of as-cast metastable Fe-38Ga alloy towards equilibrium» *Journal of Alloys and Compounds*, 889 (2022) 161782.
43. Vershinina T.N., Ivanov M.B., Rimsha P.B., «The effect of carbon on phase composition and microstructure of cermets based on Mo<sub>2</sub>NiB<sub>2</sub> boride» *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 100 (2021) 105650.
44. Vinnik D.A., Starikov A.Y., Zhivulin V.E., Astapovich K.A., Turchenko V.A., Zubar T.I., Trukhanov S.V., Kohout J., KmječT., Yakovenko O., Matzui L., Sombra A.S.B., Zhou D., Jotania R.B., Singh C., Trukhanov A.V. "Structure and magnetodielectric properties of titanium substituted barium hexaferrites" *Ceramics International* 47(12) (2021) 17293–17306.
45. Vinnik D.A., Starikov A.Y., Zhivulin V.E., Astapovich K.A., Turchenko V.A., Zubar T.I., Trukhanov S.V., Kohout J., KmječT., Yakovenko O., Matzui L., Sombra A.S.B., Zhou D., Jotania R. B., Singh Ch., Yang Y., Trukhanov A.V. "Changes in the Structure, Magnetization, and Resistivity of BaFe<sub>12-x</sub>Ti<sub>x</sub>O<sub>19</sub>" *ACS Applied Electronic Materials* 3(4) (2021) 1583–1593.
46. Vinnik D.A., Zhivulin V.E., Sherstyuk D.P., Starikov A.Y., Zezyulina P.A., Gudkova S.A., Zherebtsov D.A., Rozanov K.N., Trukhanov S.V., Astapovich K.A., Turchenko V.A., Sombra A.S.B., Zhou D., Jotania R.B., Singh C., Trukhanov A.V. "Electromagnetic properties of zinc–nickel ferrites in the frequency range of 0.05–10 GHz" *Materials Today Chemistry* 20 (2021) 100460(1-10).
47. Vinnik D.A., Zhivulin V.E., Uchaev D.A., Gudkova S.A., Zhivulin D.E., Starikov A. Yu., Trukhanov S.V., Turchenko V.A., Zubar T.I., Gavrilova T.P., Eremina R.M., Fadeev E., Lähderanta E., Sombra A.S.B., Zhou D., Jotania R.B., Turchenko V.A., Singh C., Trukhanov A.V. "Effect of titanium substitution and temperature variation on structure and magnetic state of barium hexaferrites" *J. of Alloys and Compounds* 859 (2021) 158365(1-9).
48. Wei Z., Liedienov N.A., Li Q., Pashchenko A.V., Xu W., Turchenko V.A., Yuan M., Fesych I.V., Levchenko G.G. "Influence of post-annealing, defect chemistry and high pressure on the magnetocaloric effect of non-stoichiometric La<sub>0.8-x</sub>K<sub>0.2</sub>Mn<sub>1+x</sub>O<sub>3</sub> compounds" *Ceramics International*, 47(17) (2021) 24553–24563.
49. Балагуров А.М., И.С.Головин "Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe-Ga, Fe-Al)" *УФН* 191(7) (2021) 738-759. A.M. Balagurov, I.S. Golovin "Neutron scattering in studies of Fe-based functional alloys (Fe-Ga, Fe-Al)" *Physics - Uspekhi* 64 (2021) (7) 702-721.
50. Бобриков И.А., Гапон И.В., Авдеев М.В., "Рассеяние нейтронов в исследованиях материалов и переходных процессов в литиевых накопителях энергии на импульсном реакторе ИБР-2", *ЭЧАЯ* (2021) принято в печать. (Bobrikov I.A., Gapon I.V., Avdeev M.V., Neutron scattering in studies of materials and transient processes in lithium energy storage devices at the IBR-2 pulsed reactor, *Phys. Part. Nucl.* (2021), accepted for publication)
51. Костишин В.Г., Коровушкин В.В., Исаев И.М., Миронович А.Ю., Труханов С.В., Турченко В.А., Астапович К.А., Труханов А.В. "Особенности катионного распределения и магнитных свойств гексаферритов

- BaFe<sub>12-x</sub>Y<sub>x</sub>O<sub>19</sub>” Физика Твёрдого Тела 63 (2021) 229 - 236. “Features of the Cation Distribution and Magnetic Properties of BaFe<sub>12-x</sub>Y<sub>x</sub>O<sub>19</sub> Hexaferrites” *Physics of the Solid State* 63(2) (2021) 253–260.
52. Римский Г. С., Янушкевич К. И., Руткаускас А. В. «Кристаллическая структура и магнитные характеристики твердых растворов Ni<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>MnSb». *Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-технических наук*, 66 (3) (2021) 263–269.
  53. Римский Г.С., Янушкевич К.И., Белозорева Н.М., Козленко Д.П., Руткаускас А.В. «Кристаллическая структура и магнитные характеристики твердых растворов Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>NiG». *ФТТ* 63 (3) (2021) 393-399.
  54. Семкин М.А., Урусова Н.В., Хосер А., Бескровный А.И., Пирогов А.Н. «Магнитные структуры кристалла LiNi<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>PO<sub>4</sub>» *Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования* “Magnetic structures of the LiNi<sub>0.9</sub>Co<sub>0.1</sub>PO<sub>4</sub> crystal” *J. of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 15(5) (2021) 890-895.
  55. Сиколенко В.В., А.Н.Чобот, М.В.Бушинский, Д.В.Желудкевич, С.И.Латушко, Г.М.Чобот, Б.Н.Савенко, Д.В.Карпинский. "Кристаллическая структура и орбитальное упорядочение в керамических составах BiMnO<sub>3+δ</sub> (0 < δ < 0.14)" *Поверхность*, ноябрь 2021.

## 2. Nanostructured materials (small-angle scattering and diffraction)

56. Abdel-Aal, S.K., Beskrovnyi, A.I., Ionov, A.M., Mozhchil, R.N., Abdel-Rahman, A.S. “Structure Investigation by Neutron Diffraction and X-Ray Diffraction of Graphene Nanocomposite CuO-rGO Prepared by Low-Cost Method” *Physica Status Solidi (A) Applications and Materials Science* 218(12) (2021) 2100138(1-9).
57. Bălășoiu M., Bunoiu M., Chirigiu L.M.E., Bica I., Electrical Devices Based on Hybrid Magnetorheological Suspensions: Realization, Phenomenological Modeling and Technical Characteristics, *Romanian Journal of Physics* 66 (2021) 604.
58. Bulavin L.A., Tomchuk O.V., Nagornyi A.V., Soloviov D.V., “High-pressure reorganization of the fractal pore structure in detonation nanodiamond powders”, *Ukr. J. Phys.*, 66 (2021) 635-639.
59. Bunoiu O. M., Vlase G., Bica I., Balasoiu M., Pascu G., Vlase T., Study of thermal stability of some magnetorheological elastomers, *Romanian Reports in Physics* 73(2) (2021) 503.
60. Chudoba D., M. Jażdżewska, K. Łudzik, S. Wołoszczuk, E. Juszyńska-Gałązka, M. Kościński, „Description of Release Process of Doxorubicin from Modified Carbon Nanotubes”, *International Journal of Molecular Sciences*, 2021, 22 (21), 12003.
61. Dadej A., A. Woźniak-Braszak, P. Bilski, H. Piotrowska-Kempisty, M. Józkowiak, M. Geszke-Moritz, M. Moritz, D. Dadej, A. Jelińska “Modification of the Release of Poorly Soluble Sulindac with the APTES-Modified SBA-15 Mesoporous Silica” *Pharmaceutics*, 2021, 13, 1693.
62. Dadej A., A. Woźniak-Braszak, P. Bilski, H. Piotrowska-Kempisty, M. Józkowiak, A. Pawełczyk, D. Dadej, D. Łażewska, A. Jelińska “Improved solubility of lornoxicam by inclusion into SBA-15: comparison of loading methods” *European Journal of Pharmaceutical Sciences* – sent for publication.
63. Dadej A., A. Woźniak-Braszak, P. Bilski, H. Piotrowska-Kempisty, M. Józkowiak, D. Dadej, M. Mrotek, A. Jelińska “Preparation, characterization, release and cytotoxicity studies of phenylbutazone loaded APTES-modified SBA-15 mesoporous material” *Pharmaceutics* – sent for publication.
64. Elnikova L.V., Ozerin A.N., Shevchenko V.G., Nedorezova P.M., Ponomarenko A.T., Skoi V.V., Kuklin A.I. “Spatial structure and aggregation of carbon allotrope nanofillers in isotactic polypropylene composites studied by small-angle neutron scattering” *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, (2021) 1-10.
65. Ianăși, C., Ianăși, P., Negrea, A., Ciopec, M., Ivankov, O. I., Kuklin, A. I., ... & Putz, A. M. (2021). Effects of catalysts on structural and adsorptive properties of iron oxide-silica nanocomposites. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 38(2), 292-305.
66. Khamova T., Kopitsa G., Nikolaev A., Kovalenko A., Panova G., Udalova O., Zhuravleva A., Gorshkova Yu., Chelibanov V., Chelibanov I., Baranchikov A., Tsvigun N., Pipich V., Shilova O., "The structure and properties of TiO<sub>2</sub> nanopowders for use in agricultural technologies" *Biointerface Research in Applied Chemistry*, Volume 11, Issue 4 (2021) 12285 – 12300.
67. Korolkov I.V., A.V. Zibert, L.I. Lissovskaya, K. Ludzik, M. Anisovich, A.L. Kozlovskiy, A.E. Shumskaya, M. Vasilyeva, D.I. Shlimas, M. Jażdżewska, B. Marciniak, R. Kontek, D. Chudoba, M.V. Zdorovets, “Boron and Gadolinium Loaded Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Nanocarriers for Potential Application in Neutron Capture Therapy”, *International Journal of Molecular Sciences*, 2021, 22 (16), 8687.
68. Kulvelis Yu. V., M. K. Rabchinskii, A. T. Dideikinb A. D. Trofimuk, A. V. Shvidchenko, D. A. Kirilenko, M. V. Gudkov, and A. I. Kuklin. Small-Angle Neutron Scattering Study of Graphene-Nanodiamond Composites for Biosensor and Electronic Applications. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, Vol. 15, No. 5, pp. 896–898.
69. Larichev, Y.V., Ivankov O.I., Study of Supported Metal Catalysts by the Methods of the Small-Angle Scattering of Neutrons and X-rays. *Journal of Surface Investigation*, 2021. 15(5): p. 903-907.

70. Melenev P.V., Ryzhkov A.V., Balasoiu M., Simulation of magneto-mechanical response of ferrogel samples with various polymer structure, *Soft Materials* (2021); published online; doi.org/10.1080/1539445X.2021.1998119.
71. Mirzayev M.N., Abdurakhimov B.A., Demir E., Donkov A.A., Popov E., Tashmetov M. Yu., Genov I.G., Thabette T.T., Siemek K., Krezhov K., Mamedov F., Mirzayeva D.M., Bulavin M.V., Turchenko V.A., Thang T.X., Abdurakhmonov T.Z., Horodek P. "Investigation of the formation of defects under fast neutrons and gamma irradiation in 3C–SiC nano powder" *Physica B: Condensed Matter*. 611 (2021) 412842(1-7).
72. Naberezhnov A. A., S. A. Borisov, A. V. Fokin, A. Kh. Islamov, A. I. Kuklin, Yu. A. Kumzerov, SANS studies of nanostructured low-melting metals at room temperature, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2020, Volume 11, Issue 6, 690–697.
73. Nabiyev A. A., Olejniczak A., Islamov A. Kh., Pawlukojs A., Ivankov O. I., Balasoiu M., Zhigunov A., Nuriyev M. A., Guliyev F. M., Soloviov D. V., Azhibekov A. K., Doroshkevich A. S., Ivanshina O. Yu., Kuklin A. I. "Composite Films of HDPE with SiO<sub>2</sub> and ZrO<sub>2</sub> Nanoparticles: The Structure and Interfacial Effects" *Nanomaterials* 11(10) (2021) 2673(1-20).
74. Nabiyev A.A.; Olejniczak A.; Islamov A.K.; Pawlukojs A.; Ivankov O.I.; Balasoiu M.; Zhigunov A.; Nuriyev M.A.; Guliyev F.M.; Soloviov D.V.; Azhibekov A.K.; Doroshkevich A.S.; Ivanshina O.Y.; Kuklin A.I. Composite Films of HDPE with SiO<sub>2</sub> and ZrO<sub>2</sub> Nanoparticles: The Structure and Interfacial Effects. *Nanomaterials* 11 (2021) 2673.
75. Putz, A.-M., Ciopec M., Negrea A., Grad O., Ianăși C., Ivankov O.I., Milanović M., Stijepović I., Almásy L., Comparison of Structure and Adsorption Properties of Mesoporous Silica Functionalized with Aminopropyl Groups by the Co-Condensation and the Post Grafting Methods. *Materials*, 2021. 14(3): p. 628.
76. Rzaev R.F., Dashdemirov A.O., Akhundzada H.V., Popov E., Mirzayeva D.M., Mirzayev M.N. "Surface binding energy and erosion coefficient on the nano yttrium oxide under ionization irradiation" *International Journal of Modern Physics B* 35(27) (2021) 2150309(1-4).
77. Siemek K., P. Horodek, V.A. Skuratov, J. Waliszewski, A. Sohatsky, "Positron annihilation studies of irradiation induced defects in nanostructured titanium", *Vacuum*, 2021, 190, 110282.
78. Tatarinova A.A., Doroshkevich A.S., Ivanshina O.Y., Pestov O.S., Balasoiu M., Gladyshev P.P., Development of Siloxane Coating with Oxide Fillers for Kesteritic (CZTS) Photovoltaic Systems, *Energies* 14(8) (2021) 2142.
79. Tomchuk O.V., Avdeev M.V., Aksenov V.L., Ivankov O.I., Len A., Turchenko V.A., Zabulonov Y.L., Bulavin L.A. "Regulation of nanoporous structure of detonation nanodiamond powders by pressure: SANS study" *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*. – – 2021. – [in press] <https://doi.org/10.1080/1536383X.2021.1964478>
80. Vorob'ev S. I., Balasoiu M., Buzatu D., Duginov V. N., Getalov A. L., Gritsaj K. I., Komarov E. N., Kotov S. A., Stan C. and Scherbakov G. V., mSR-Study of a 3%CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoparticle Concentration Ferrofluid, *Magnetochemistry* 7 (2021) 104(1-12).
81. Zuba I., Drwal A., Drwal K., Pawlukojs A. "Comparison study of ruthenium sorption on Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@MnO<sub>2</sub> in hydrochloric and nitric acid" *J. of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 327 (2021) 891-896.
82. Zuba I., Pawlukojs A., Waliszewski J., Ivanshina O. "Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@MnO<sub>2</sub> inorganic magnetic sorbent: Preparation, characterization and application for Ru(III) ions sorption", *Separation Science and Technology* <https://doi.org/10.1080/01496395.2021.1965168>.
83. Zubar T., Grabchikov S., Kotelnikova Аю, Kaniukov E., Kutuzau M., Leistner K., Nielsch K., Vershinina T., Tishkevich D., Kanafyev O., Kozlovskiy A., Zdorovets M., Fedosyuk V., Trukhanov A. «Efficiency of magnetostatic protection using nanostructured permalloy shielding coatings depending on their microstructure» *Nanomaterials* 11 (2021) 634.
84. Ельникова Л.В., Озерин А.Н., Шевченко В.Г., Недорезова П.М., Палазник О.М., Пономаренко А.Т., Ской В.В., Куклин, А.И. "Образование узлов из углеродных нанотрубок в матрице изотактического полипропилена по результатам малоуглового рассеяния нейтронов и численного моделирования на решетке" *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, (9) (2021) 3-8. "Formation of Knots of Carbon Nanotubes in Isotactic Polypropylene Matrix due to the Results of Small-Angle Neutron Scattering and Lattice Numerical Simulation" *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 15(5) (2021) 885-889.

### 3. Soft matter, liquids, glasses (small angle scattering, diffraction and reflectometry)

85. Angelova A., Angelov B., Drechsler M., Bizien T., Gorshkova Yu.E., Deng Yu. "Plasmalogen-based liquid crystalline multiphase structures involving docosapentaenoyl (DPA) derivatives inspired by biological cubic membranes" *Frontiers in Cell and Developmental Biology*, V 09 Art No 617984 (2021).
86. Artykulnyi O.P., Avdeev M.M., Kosiachkin Y.M., Petrenko V.I., Safarik I., Bulavin L.A., "Neutron investigation of interaction between anionic surfactant micelles and poly(ethylene glycol) polymer brush system", *Nucl. Phys. Atom. Energy*, 22(2) (2021) 149-156.

87. Badreeva D.R., Hrubovčák P., Dushanov E.B., Ermakova E.V., Ivankov O.I., Kondela T., Kuklin A.I., Kurakin S.A., Murugova T.N., Skoi V.V., Soloviov D.V., Kholmurodov Kh.T., Kučerka N., "Neutrons and molecular simulations: scrutinizing the neural membranes damage caused by amyloid beta peptide", *JINR news*, 15.02.2021.
88. Balejčíková L., Saksl K., Kováč J., Martel A., Garamus V.M., Avdeev M.V., Petrenko V.I., Almásy L., Kopčanský P., The impact of redox, hydrolysis and dehydration chemistry on the structural and magnetic properties of magnetoferritin prepared in variable thermal conditions, *Molecules* 26 (2021) 6960. DOI:10.3390/molecules26226960.
89. Barbinta-Patrascu M.E., Gorshkova Yu., Ungureanu C., Badea N., Bokuchava G., Lazea-Stoyanova A., Bacalum M., Zhigunov A., Petrovič S. "Antitumoral activity of biohybrids based on turmeric and silver/silver chloride nanoparticles" *Materials*, 14 (2021) 4726.
90. Chilom C.G., Sandu N., Iftimie S., Balasoiu M., Rogachev A., Orelovich O., Stolyar S., Interactions of Chemically Synthesized Ferrihydrite Nanoparticles with Human Serum Transferrin: Insights from Fluorescence Spectroscopic Studies, *International Journal of Molecular Sciences* 22(13) (2021) 7034.
91. Gorshkova Y., Barbinta-Patrascu M.-E., Bokuchava G., Badea N., Ungureanu C., Lazea-Stoyanova A., Răileanu M., Bacalum M., Turchenko V.A., Zhigunov A., Juszyńska-Gałązka E. "Biological performances of plasmonic biohybrids based on phyto-silver/silver chloride nanoparticles" *Nanomaterials*, 11(7) (2021) 1811(1-25).
92. Ivankov O., Murugova T.N., Ermakova E.V., Kondela T., Badreeva D.R., Hrubovčák P., Soloviov D., Tsarenko A., Rogachev A., Kuklin A.I., Kučerka N. "Amyloid-beta peptide (25-35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes" *Scientific Reports* 11 (2021) 21990(1-9).
93. Ivankov O.I., Murugova T.N., Ermakova E.V. Kondela T., Badreeva D., Hrubovčák P., Soloviov D.V., Tsarenko A., Rogachev A.V., Kuklin A.I., Kučerka N. "Amyloid-beta peptide (25–35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes" *Sci Rep* 11 (2021) 21990. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-01347-7>.
94. Kondela T., Dushanov E., Vorobyeva M., Mamatkulov K., Drollee E., Soloviov D., Hrubovčák P., Kholmurodo Kh., Arzumanyan G., Leonenko Z., Kučerka N. "Investigating the competitive effects of cholesterol and melatonin in model lipid membranes" *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes* 1863(9) (2021) 183651(1-11).
95. Kučerka N., Ermakova E., Dushanov E., Kholmurodov Kh. T., Kurakin S., Želinská K., Uhríková D. "Cation-zwitterionic lipid interactions are affected by the lateral area per lipid" *Langmuir* 37(1) (2021) 278–288.
96. Kyzyma O.A., Mchedlov-Petrosyan N.O., Al-Shuuchi Y.T.M., Tropin T.V., Ivankov O.I., Kriklya N.N., Gromovoy T.Yu., Kryshtal A.P., Zhigunov A.N., Korosteleva E.A., Shekhovtsov S.V., Garamus V.M., Bulavin L.A., "Diluted and concentrated organosols of fullerene C<sub>60</sub> in the toluene–acetonitrile solvent system as studied by diverse experimental methods", *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures*, 29 (4) (2021) 315-330.
97. Lebedev, V.T., Kulvelis Y.V., Török G., Ivankov O.I., Polotskaya G.A., Vinogradova L.V., Vul A.Y., Primachenko O.N., Marinenko E.A., Odínokov A.S., Structure of Diffusion Polymer Membranes for Molecular and Ionic Transport. *Journal of Surface Investigation*, 2021. 15(5): p. 939-946.
98. Lombardo D., Kiselev M.A., Pasqua L., Pellicane G., Calandra P. "Smart Nanostructured Materials: From Molecular Self-Assembly to Advanced Applications" *J. of Nanomaterials* 2021 (2021) 6482857(1-2).
99. Lombardo D., Pasqua L., Kiselev M.A. "Evolution of the concept of force in modern nanoscience: the perspectives of the experimental learning in research and teaching programs" *Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti. Classe di Scienze Fische, Matematiche e Naturali (AAPP)* 94(2) (2021) A4(1-24).
100. Marina V., Atamas A., Tsarenko A., Rogachev A., Guskov A. "Cation Transporters of *Candida albicans* — New Targets to Fight Candidiasis?" *Biomolecules* 11 (4), (2021) 584.
101. Molchanov V.S., A.I. Kuklin, A.S. Orekhov, N.A. Arkharova, O.E. Philippova. Temporally persistent networks of long-lived mixed wormlike micelles of zwitterionic and anionic surfactants. *Journal of Molecular Liquids*, vol.342, 15 November 2021, 116955
102. Ospennikov A.S., Gavrilov A.A., Artykulnyi O.P., Kuklin A.I., Novikov V.V., Shibaev A.V., Philippova O.E., "Transformations of wormlike surfactant micelles induced by a water-soluble monomer", *J. Colloid Interface Sci.*, 602 (2021) 590-601.
103. Ryzhykau Y.L., Orekhov P.S., Rulev M.I. et al. "Molecular model of a sensor of two-component signaling system" *Sci Rep* 11, (2021) 10774. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-89613-6>.
104. Ryzhykau Y.L., Vlasov A.V., Orekhov P.S., Rulev M.I., Rogachev A.V., Vlasova A.D., Kazantsev A.S., Verteletskiy D.P., Skoi V.V., Brennich M.E., Pernot P., Murugova T.N., Gordeliy V.I. & Kuklin A.I. "Ambiguities in and completeness of SAS data analysis of membrane proteins: the case of the sensory rhodopsin II–transducer complex" *Acta Cryst. D77* (2021) 1386-1400. <https://doi.org/10.1107/S2059798321009542>.
105. Safarik, I., Prochazkova, J., Schroer, M.A., Garamus V.M., Kopčanský P., Timko M., Rajnak M., Karpets M., Ivankov O.I., Avdeev M.V., Petrenko V.I., Bulavin, L., Pospiskova, K., Cotton Textile/Iron Oxide Nanozyme Composites with Peroxidase-like Activity: Preparation, Characterization, and Application, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 13(20) (2021) 23627–23637.
106. Shatalina E. I., V. S. Molchanov, A. I. Kuklin, and O. E. Philippova. Effect of the Charge of a Small Amount of a Cosurfactant on the Viscoelasticity of Zwitterionic Wormlike Micelles. *Journal of Surface Investigation: X-ray*,

- Synchrotron and Neutron Techniques, 2021, Vol. 15, No. 5, pp. 914–919. © Pleiades Publishing, Ltd., 2021. Russian Text © The Author(s), 2021, published in *Poverkhnost'*, 2021, No. 9, pp. 25–31.
107. Tomchuk A.A., Voiteshenko I.S., Shershakova N.N., Andreev S.M., Turetskiy E.A., Khaitov M.R., Ivankov O.I., Tropin T.V., Tomchuk O.V., Avdeev M.V., "Comparative structural study of C<sub>60</sub>-lysine and C<sub>60</sub>-piperazine biocompatible aqueous solutions", *Fuller. Nanot. Carbon Nanostructures*, (2021).
  108. Tomchuk O.V., Avdeev M.V., Aksenov V.L., Shulenina A.V., Ivankov O.I., Ryukhtin V., Vékás L., Bulavin L.A., "Temperature-dependent fractal structure of particle clusters in aqueous ferrofluids by small-angle scattering", *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp.*, 613 (2021) 126090.
  109. Tomchuk O.V., Bulavin L.A., Avdeev M.V., "Isoscaterring point in SANS contrast variation study of aqueous magnetic fluids", *Soft Mater.* (2021) (in press).
  110. Varaksa T., Bukhdruker S., Grabovec I., Marin E., Kavaleuski A., Gusach A., Kovalev K., Maslov I., Luginina A., Zabelskii D., Astashkin R., Shevtsov M., Smolskaya S., Kavaleuskaya A., Shabunya P., Baranovsky A., Dolgopalets V., Charnou Yu., Savachka A., Litvinovskaya R., Hurski A., Shevchenko E., Rogachev A., Mishin A., Gordeliy V., Gabrielian A., E. Hurt D., Nikonenko B., Majorov K., Apt A., Rosenthal A., Gilep A., Borshchevskiy V., Strushkevich N. "Metabolic Fate of Human Immunoactive Sterols in Mycobacterium tuberculosis" *Journal of Molecular Biology*, Volume 433, Issue 4 (2021) 166763.
  111. Vasilenko, T., Kirillov, A., Islamov, A., Doroshkevich, A. Study of hierarchical structure of fossil coals by small-angle scattering of thermal neutrons. *Fuel*, 2021, 292, 120304.
  112. Vus K., Tarabara U., Danylenko I., Pirko Ya., Krupodorova T., Yemets A., Blume Ya., Turchenko V., Klymchuk D., Smertenko P., Zhytniakivska O., Trusova V., Petrushenko S., Bogatyrenko S., Gorbenko G. "Silver nanoparticles as inhibitors of insulin amyloid formation: A fluorescence study" *J. of Molecular Liquids* [accepted for publication].
  113. Yapryntsev A.D., Baranchikov A.E., Churakov A.V., Kopitsa G.P., Silvestrova A.A., Golikova M.V., Ivanova O.S., Gorshkova Yu.E., Ivanov V.K. "First amorphous and crystalline yttrium lactate: synthesis and structural features" *RSC Advances*, 11 (2021) 30195–30205.
  114. Zabelskii Dmitrii, Natalia Dmitrieva, Oleksandr Volkov, Vitaly Shevchenko, Kirill Kovalev, Taras Balandin, Dmytro Soloviov, Roman Astashkin, Egor Zinovev, Alexey Alekseev, Ekaterina Round, Vitaly Polovinkin, Igor Chizhov, Andrey Rogachev, Ivan Okhrimenko, Valentin Borshchevskiy, Vladimir Chupin, Georg Büldt, Natalia Yutin, Ernst Bamberg, Eugene Koonin, Valentin Gordeliy. Structure-based insights into evolution of rhodopsins. *Commun Biol* 4, 821 (2021).
  115. Забродская Я. А., Ю. Е. Горшкова, А.-П. С. Шурыгина, А. В. Бродская, Д. Е. Бобков, А. Н. Горшков, А. Б. Бондаренко, Д. В. Лебедев, В. В. Егоров. «Модельная система для изучения транспорта противовирусного препарата». *Кристаллография*, 2021, том 66, № 6, с. 902–912.
  116. Киселев М.А., Селяков Д.Н. "Исследование структуры бислоя димиристоилфосфатидилхолина методом нейтронной рефлектометрии" *Поверхность. 4* (2021) 19-24. Investigation of the Structure of a Dimyristoyl Phosphatidylcholine Bilayer via Neutron Reflectometry. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, Vol. 15, No. 2, pp. 327–331.
  117. Криставчук О. В., Сохацкий А.С., Козловский В.И., Ской В.В., Куклин А.И., Трофимов В.В., Апель П.Ю. "Структурные характеристики и ионный состав коллоидного раствора наночастиц серебра, полученного методом электроискрового разряда в воде" *Коллоидный журнал*, 83(4) (2021) 423-435. "Structural Characteristics and Ionic Composition of a Colloidal Solution of Silver Nanoparticles Obtained by Electrical-Spark Discharge in Water" *Colloid Journal*, 83(4) (2021) 448-460. "Structural Characteristics and Ionic Composition of a Colloidal Solution of Silver Nanoparticles Obtained by Electrical-Spark Discharge in Water" *Colloid, J* 83 (2021) 448–460.
  118. Куракин С.А., Ермакова Е.В., Иванов О.И., Смердова С.Г., Кучерка Н. "Влияние двухвалентных ионов на структуру бислоев в везикулах димиристоилфосфатидилхолина" *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* 3 (2021) 3–13. "The Effect of Divalent Ions on the Structure of Bilayers in the Dimyristoylphosphatidylcholine Vesicles" *J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 15(2) (2021) 211–220.
  119. Нагорный А.В., Авдеев М.В., Иванов А.И., Шлапа Ю.Ю., Солопан С.А., Нагорная Т.В., Шуленина А.В., Забулонов Ю.Л., Белоус А.Г., Булавин Л.А., "Структурная стабильность дисперсий магнитных наночастиц в водных растворах полисорбата-80», *Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 8 (2021) 3-9. (Nagornyi A.V., Avdeev M.V., Ivankov O.I., Belous, A.G., Bulavin, L.A., "Structural Stability of Dispersions of Magnetic Nanoparticles in Aqueous Solutions of Polysorbate-80", *J. Surf. Investig.: X-ray Synchrotron Neutron Tech.*, 15(4) (2021) 781–786).
  120. Тропин Т.В., Аksenov В.Л., Шмельцер Ю.В.П., "Кинетические процессы в растворах фуллеренов", *ЭЧАЯ*, 52 (2) (2021) 615-644 (Tropin T.V., Aksenov V.L., Schmelzer J.W.P., "Kinetic Processes in Fullerene Solutions" *Phys. Part. Nucl.* 52 (2) (2021) 315-329).
  121. Шибаяев А.В., Муравлев Д.А., Ской В.В., Рогачев А.В., Куклин А.И., Филиппова О.Е. "Структура взаимопроникающих сеток полисахарида ксантана и червеобразных мицелл поверхностно-активного вещества" *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, (9) (2021) 19-24.

“Structure of Interpenetrating Networks of Xanthan Polysaccharide and Wormlike Surfactant Micelles” *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 15(5) (2021) 908-913.

122. Schmelzer J.W.P., Tropin T.V. “Theory of Crystal Nucleation of Glass-forming Liquids: Some New Developments”, *Int. J. Appl. Glass Sci.* (2021) accepted.

#### 4. Thin films and interfaces (reflectometry, polarized neutrons, other)

123. Devyaterikov D.I., E.A. Kravtsov, V.V. Proglyado, V.D. Zhaketov, Yu. V. Nikitenko. Investigation of Helimagnetism in Dy and Ho Thin Films by Neutron Reflectometry. // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, Vol. 15, No. 3, pp. 542-548, 2021.
124. Devyaterikov D.I., V.V. Proglyado, V.D. Zhaketov, Yu.V. Nikitenko, O.A. Kondrat'ev, E.M. Pashaev, I.A. Subbotin, V.I. Zverev, E.A. Kravtsov, V.V. Ustinov. Influence of Dimensional Effects on the Curie Temperature of Dy and Ho Thin Films. // *Physics of Metals and Metallography*, Vol. 122, No. 5, pp. 465-471, 2021.
125. Hrubovčák P., Dushanov E., Kondela T., Tomchuk O., Kholmurodov K., Kučerka N. “Reflectometry and molecular dynamics study of the impact of cholesterol and melatonin on model lipid membranes” *Eur. Biophys. J.* 50 (2021) 1025–1035.
126. Tomchuk O.V., Krasnikov D.V., Kosiachkin Y.N., Ilatovskii D.A., Avdeev M.V., Nasibulin A.G., “Specular reflectometry studies of alcohol-induced densification for thin films of single-walled carbon nanotubes”, *J. Surf. Investig.: X-ray Synchrotron Neutron Tech.*, 15 (2021) 773-776.
127. Tropin T.V., Karpets M.L., Kosiachkin Ye., Aksenov V.L., “X-ray reflectometry for comparison of structural organization of fullerenes C<sub>60</sub>/C<sub>70</sub> in polystyrene thin films”, *J. Surf. Investig.: X-ray Synchrotron Neutron Tech.*, 15 (4) (2021) 768-772.
128. Tropin T.V., Karpets M.L., Kosiachkin Ye., Gorshkova Y.E., Gapon I.V., Aksenov V.L., “Evaluation of fullerenes C<sub>60</sub>/C<sub>70</sub> layers in polystyrene thin films by neutron and X-ray reflectometry”, *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures*, 29 (10) (2021) 819-824.
129. Косячкин Е.Н., Гапон И. В., Рулев А.А., Ушакова Е.Е., Меркель Д., Булавин Л.А., Авдеев М.В., Иткис Д.М., “Экспериментальные аспекты структурных исследований электрохимических границ раздела с жидкими электролитами посредством нейтронной рефлектометрии”, *Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 8 (2021) 10-15. (Kosiachkin Y.N., Gapon I.V., Rulev A.A., Ushakova E.E., Merkel D., Bulavin L.A., Avdeev M.V., Itkis D.M., “Structural Studies of Electrochemical Interfaces with Liquid Electrolytes Using Neutron Reflectometry: Experimental Aspects”, *J. Surf. Investig: X-ray Synchrotron Neutron Tech.*, 15(4) (2021) 787-792.).

#### 5. Atomic and molecular dynamics (inelastic scattering)

130. Hetmańczyk J., Hetmańczyk Ł., Nowicka-Scheibe J., Pawlukojć A., Maurin J. K., Schilf W. “Structural, Thermal, and Vibrational Properties of N,N-Dimethylglycine–Chloranilic Acid - A New Co-crystal Based on an Aliphatic Amino Acid” *Materials* 14 (2021) 3292(1-31).
131. Hetmanczyk Ł., E.A. Goremychkin, J. Waliszewski, M.V. Vener, P. Lipkowski, P.M. Tolstoy, A. Filarowski, “Spectroscopic Identification of Hydrogen Bond Vibrations and Quasi-Isostructural Polymorphism in N-Salicylideneaniline” *Molecules*, 2021, 26, 5043.
132. Malkin B. Z., E. A. Goremychkin, K. Siemensmeyer, S. Gabani, K. Flachbart, M. Rajvnaк, A. L. Khoroshilov, K. M. Krasikov, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, N. E. Sluchanko, “Crystal field potential and short-range order effects in inelastic neutron scattering, magnetization and heat capacity of the cage-glass compound HoB<sub>12</sub>” *Phys. Rev. B* 2021, 104, 134436.
133. Osiecka-Drewniak N., E. Juszyńska-Gałązka, W. Zając, D. Chudoba, “The role of hydrogen bonds and conformational motions in the properties of the ethosuximide drug as seen through spectroscopic characterization”, *J. Mol. Liq.* (under review).
134. Pawlukojć A., Hetmańczyk J., Hetmańczyk Ł., Nowicka-Scheibe J., Maurin J. K., Schilf W., Trzybiński D., Woźniak K. “Evidence of low temperature phase transition in 2,6-dimethylpyrazine - picric acid cocrystal by means of temperature dependent investigations: X-ray, DSC and IR” *J. of Molecular Structure* 1228 (2021) 129432(1-14).

#### 6. Applied studies (texture, stresses, geological materials, cultural heritage)

135. Abdurakhimov B.A., Kichanov S.E., Talmatchi C., Kozlenko D.P., Talmatchi G., Belozeroва N.M., Bălăşoiu M., Belc M.C. “Studies of ancient pottery fragments from Dobrudja region of Romania using neutron diffraction, tomography and Raman spectroscopy”, *Journal of Archaeological Science: Reports*, 35 (2021) 102755.

136. Bakirov B., Saprykina I., Kichanov S., Mimokhod R., Sudarev N., Kozlenko D. "Phase Composition and Its Spatial Distribution in Antique Copper Coins: Neutron Tomography and Diffraction Studies", *Journal of Imaging*, 7 (2021) 129.
137. Carro-Sevillano G., R. Fernández, G. Bokuchava, L. Millán, G. González-Doncel, Residual stress distribution after quenching treatment obtained from diffraction experiments and simulation by finite element method, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, Vol. 15, No. 3, pp. 537-541.
138. Chudoba D., K. Łudzik, M. Jażdżewska, "Carbon fibres as potential bone implants with controlled doxorubicin release", *Scientific Reports*(under review).
139. Demir E., Mirzayev M.N., Popov E.P., Horodek P., Genov I.G., Siemek K., Mirzayeva D.M., Turchenko V.A., Bulavin M., Beskrovnyi A.I., Valizade A.H., Akhundzada H.V., Karaaslan S.I. "Effects of high-energetic <sup>3</sup>He ion irradiation on tungsten-based composites" *Vacuum* 184 (2021) 109934(1-7).
140. El Abd A., Taman M., Kichanov S.E., Hamad E., Nazarov K.M. "Implementation of capillary penetration coefficient on water sorptivity for porous building materials: An experimental study", *Construction and Building Materials*, 298 (2021) 123758.
141. Keppler R., Vasin R., Stripp M., Lokajicek T., Petruzalek M., Froitzheim N. «Elastic anisotropies of deformed upper crustal rocks in the Alps» *Solid Earth* 12 (2021) 2303-2326.
142. Kułacz K., J. Waliszewski, Sh. Bai, L. Ren, H. Niu, K. Orzechowski "Changes in structural and dielectric properties of nontronite caused by heating", *Applied Clay Science* 2021, 202, 105952.
143. Lokajíček T., Vasin R., Svitek T., Petružálek M., Kotrlý M., Turková I., Onysko R., Wenk H.R. «Intrinsic elastic anisotropy of Westerly granite observed by ultrasound measurements, microstructural investigations, and neutron diffraction» *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 126 (2021) e2020JB020878.
144. Millán L., G. Bokuchava, J.I. Hidalgo, R., Fernández, G. Kronberger, P. Halodova, A. Sáez, I. Papushkin, O. Garnica, J. Lanchares, G. González-Doncel, Study of microscopic residual stresses in an extruded aluminium alloy sample after thermal treatment, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, Vol. 15, No. 4, pp. 763-767.
145. Millán L., G. Bokuchava, R. Fernández, I. Papushkin, G. González-Doncel, Further insights on the stress equilibrium method to investigate macroscopic residual stress fields: case of aluminum alloys cylinders, *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, Vol. 861, 158506.
146. Nazarov K.M., Mukhametuly B., Kichanov S.E., Zholdybayev T.K., Shaimerdenov A.A., Karakozov K.B., Dyussambayev D.S., Aitkulov M.T., Yerdauletov M., Napolskiy P., Kenessarín M., Kalymkhan E.K., Imamverdiyev N.A., Jabarov S.H. "Non-destructive analysis of materials by neutron imaging at the TITAN facility", *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials*, 5, 1 (2021) 61-14.
147. Raju S.V., Vasin R.N., Godwal B.K., Jeanloz R., Wenk H.-R., Saxena S.K. «Deformation of binary and boron-doped Ni<sub>3</sub>Al alloys at high pressures studied with synchrotron x-ray diffraction» *Journal of Applied Physics* 129 (2021) 225101.
148. Shen J., Zeng Zh., Nematollahi M., Schell N., Maawad E., Vasin R.N., Safaei K., Poorganji B., Elahinia M., Oliveira J.P. «In-situ synchrotron X-ray diffraction analysis of the elastic behaviour of martensite and H-phase in a NiTiHf high temperature shape memory alloy fabricated by laser powder bed fusion» *Additive Manufacturing Letters*. 1 (2021) 100003.
149. Zel I. Yu., Kenessarín M., Kichanov S.E., Balasoju M., Kozlenko D.P., Nazarov K., Nicu M., Ionascu L., Dragolici A.C., Dragolici F. "Spatial distribution of graphite in cement materials used for radioactive waste conditioning: An approach to analysis of neutron tomography data", *Cement and Concrete Composites*, 119 (2021) 103993.
150. Zel I. Yu., Petružálek M., Lokajíček T., Ivankina T.I., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Porosnicu I., Schnabl P., Pruner P., Duliu O.G. "Assessment of structural, magnetic, and P-wave velocity anisotropy of two biotite gneisses from X-ray and neutron tomography", *Tectonophysics*, 812 (2021) 228925.
151. Кузьминых С. В., Сапрыкина И. А., Кичанов С. Е., Медникова М. Б. "Комплексное изучение боевого топора абашевской культуры из Мало-Кизильского селища" *Краткие сообщения Института археологии*, 262. (2021) 44.

## 7. Instruments and Methods

152. Abdurakhimov B.A., Tashmetov M.Yu., Yuldashev B.S., Kichanov S.E., Lukin E.V., Kozlenko D.P., Kulikov S.A., Shvetsov V.N., Ismatov N.B., Saidov A.R., Normurodov A.B., Rutkauskas A.V. "New neutron imaging facility at the WWR-SM reactor: Design and first results", *NIMA*, 989 (2021) 164959.
153. Kaisheva Darina, Gizo Bokuchava, Igor Papushkin, Stefan Valkov, Maria Ormanova, Peter Petrov, Comparative neutron diffraction study of residual stresses, arising after electron beam welding of various steels, *Proc. of International Scientific Conference "UNITECH 2021", 19-20 November 2021, Gabrovo, Bulgaria.* <https://unitech.tugab.bg> (accepted).

154. Kucerakova M., J. Rohlicek, S. Vratislav, D. Nikolayev, T. Lychagina, L. Kalvoda, K. Douda "Texture study of sinanodonta woodiana shells by X-ray diffraction, Journal of Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 15 (2021) 640–643.
155. Kučeráková M., Rohlicek J., Vratislav S., Jarosova M., Kalvoda L., Lychagina T., Nikolayev D., Douda K. "Texture and element concentration of the freshwater shells from the Unionidae family collected in the Czech Republic by X-ray, neutron and electron diffraction", Crystals 11 (2021), 1483.
156. Nazarov K.M., Mukhametuly B., Kichanov S.E., Zholdybayev T.K., Shaimerdenov A.A., Karakozov K.B., Dyussambayev D.S., Aitkulov M.T., Yerdauletov M., Napolskiy P., Kenessarín M., Kalymkhan E.K., Imamverdiyev N.A., Jabarov S.H., "Non-destructive analysis of materials by neutron imaging at the TITAN facility", Eurasian J. Phys. Funct. Mater., 5 (1) (2021) 6-14.
157. Nekhoroshkov P., Zinicovscaia I., Nikolayev D., Lychagina T., Pakhnevich A., Yushin N., Bezuidenhout J. "Effect of the elemental content of shells of the bivalve mollusks (*Mytilus galloprovincialis*) from Saldanha Bay (South Africa) on their crystallographic texture", Biology 10(11) (2021) 1093.
158. Podurets K.M., Kichanov S.E., Glazkov V.P., Kovalenko E.S., Murashev M.M., Kozlenko D.P., Lukin E.V., Yatsishina E.B. "Modern Methods of Neutron Radiography and Tomography in Studies of the Internal Structure of Objects", Crystallography Reports, 66, 2 (2021) 254-266.
159. Tomchuk O.V., "Stochastic fractal by deterministic algorithm: Introducing the Möbius fractal" AIP Conf. Proceed, 2377 (2021) 020002.
160. Аксельрод Л.А., В. Краан, Д. Жохов, А.А Сумбатян, А.В. Нагорный, В.В. Тарнавич, Ю.О. Четвериков, «Текущий статус строительства установки SESANS на реакторе ПИК» Поверхность (2021) направлена (L.A. Axelrod, V. Kraan, D. Zhokhov, A.A. Sumbatyan, A.V. Nagorny, V.V. Tarnavich, Yu.O. Chetverikov "Current status of the SESANS instrument at the PIK reactor", J. Surf. Investigation (2021) submitted.
161. Бокучава Г.Д., А.А. Круглов, И.В. Папушкин, В.В. Журавлев, Т.Б. Петухова, С.М. Мурашкевич, Л.А. Трунтова, Н.Д. Зернин, Нейтронный фурье-стресс-диффрактометр FSS на реакторе ИБР-2: результаты модернизации и перспективы дальнейшего развития, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022, (в печати). G.D. Bokuchava, A.A. Kruglov, I.V. Papushkin, V.V. Zhuravlev, T.B. Petukhova, S.M. Murashkevich, L.A. Truntova, N.D. Zernin, Neutron Fourier stress diffractometer FSS at the IBR-2 reactor: results of upgrade and further development prospects, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2022 (in print).
162. Жакетов В. Д., Храмо К., Петренко А. В., Хайдуков Ю. Н., Чик А., Копач Ю. Н., Гундорин Н. А., Никитенко Ю. В., Аксенов В. Л. Рефлектометр поляризованных нейтронов с регистрацией нейтронов и гамма – квантов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования 6 (2021) 10–24.
163. Кузьмин Е.С., Г.Д. Бокучава, И.Ю. Зимин, А.А. Круглов, Н.А. Кучинский, В.Л. Малышев, Монте-Карло-модель сцинтилляционного детектора нейтронов на основе литиевого стекла, Приборы и техника эксперимента, 2021, № 2, с. 25-31. E.S. Kuzmin, G.D. Bokuchava, I.Yu. Zimin, A.A. Kruglov, N.A. Kuchinskiy, V.L. Malyshev, A Monte Carlo Model of the Neutron Detector Based on Lithium-Glass Scintillator, Instruments and Experimental Techniques, 2021, Vol. 64, No. 2, pp. 195–201.
164. Куклин А.И., Иваньков А.И., Рогачев А.В., Соловьев Д.В., Исламов А.Х., Ской В.В., Ковалев Ю.С., Власов А.В., Рижиков Ю.Л., Соловьев А.Г., Горделий В.И. "Малоугловое рассеяние на импульсном источнике нейтронов ИБР-2: настоящее и будущее" Кристаллография, 66(2) (2021) 230-241. "Small-Angle Neutron Scattering at the Pulsed Reactor IBR-2: Current Status and Prospects" Crystallography Reports, 66(2) (2021) 231-241.
165. Пахневич А.В. Биоминеральный скелет *Acoscinopecten crassa* (Bryozoa, Cheilostomata) из маастрихта Германии, выявленный с помощью рентгеновской микротомографии, Палеонтологический журнал, 5 (2021) 58–65.
166. Пахневич А.В., Николаев Д.И., Лычагина Т.А. "Изменение кристаллографической текстуры раковин двустворчатых моллюсков во времени", Палеонтологический журнал, 6 (2021) 3-14. "Comparison of the Crystallographic Texture of the Recent, Fossil and Subfossil Shells of Bivalves" Paleontological Journal, 2021, Vol. 55, No. 6, pp. 589–599.
167. Федосеев М.Л., Петров С.Н., Николаев Д. И., Лычагина Т.А., Попов Е. П. "Методические аспекты исследования высокопрочной стали при помощи рентгеновской и нейтронной дифракции", подано в журнал «Вопросы материаловедения».

## Патенты

1. Заявка № 2021106446 на выдачу патента "Способ измерения вероятности поглощения нейтронов при их подбарьерном отражении от поверхности и структура для его осуществления", Никитенко Ю.В, получено положительное решение.

## Конференции

1. Авдеев М.В., Комплементарные нейтронные и синхротронные исследования литиевых накопителей энергии, Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Пленарный доклад.
2. Горемычкин Е.А. «Исследование сильно коррелированных электронных систем с помощью неупругого рассеяния нейтронов», Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС - 2021) 27 сентября – 7 октября 2021, Екатеринбург – пленарный доклад.
3. M. Balasoiu, D. Manaila-Maximean, C. P. Ganea, L. Frunza, V. Cîrcu, O. Danila, A. Barar, V. Loiko and A. Konkolovich, Liquid crystal composites and nanoparticles doping, TIM 20-21 Physics Conference, November 11th - 13th 2021, Timisoara, Romania (online), Plenary report.
4. Avdeev M.V., Ferrofluids at interfaces by neutron reflectometry, 4th International Summer School and Workshop: "Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure" (CMSMS-2021), 19–22 April 2021, Timisoara, Romania, invited report (online)
5. Avdeev M.V., Introduction to Neutron Reflectometry, 14th Central European Training School on Neutron Scattering, October 4 – 8, 2021, Budapest, Hungary, invited lecture (online).
6. Chudoba D.M. "Biomedical Applications Of Carbon-Based Nanomaterials" at International Meet & Expo on Graphene and Carbon Nanostructures (GRAPHENEMEET2021), November 01-02, 2021, Nice, France, online, invited talk.
7. Tropin T.V. Research in the Field of Condensed Matter Physics at the IBR-2 Reactor, Conference of JINR young scientists and specialists (AYSS-2021), 8-15 June 2021, Alushta, Invited lecture.
8. Tropin T.V., N. Jargalan, O.A. Kyzyma, Aksenov V.L., Deleg S. Fullerenes clusters growth in solutions: investigations and theoretical description, Annual Meeting of Mongolian Physical Society dedicated to 60<sup>th</sup> anniversary of the Institute of Physics and Technology, 18-19 November 2021, Ulaanbaatar, Mongolia, Invited talk (online).
9. Балагуров А.М. «Новые возможности дифракции нейтронов в анализе структуры и микроструктуры металлических сплавов», Рабочее совещание "Дифракция нейтронов - 2021", 8 – 10 июня 2021 года, г. Гатчина, приглашенный доклад.
10. Г.Д. Бокучава, "Нейтронная фурье-стресс-дифрактометрия по времени пролета на реакторе ИБР-2 для решения материаловедческих задач", Рабочее совещание "Дифракция нейтронов - 2021", 8 – 10 июня 2021 года, г. Гатчина, приглашенный доклад.
11. Авдеев М.В., Взаимодействие агрегатов в магнитных жидкостях, Научный семинар «Математическое и компьютерное моделирование свойств мягких магнитных материалов», Уральский математический центр УрФУ, 2–3 декабря 2021, Екатеринбург, РФ, приглашенный доклад (онлайн).
12. Вершинина Т.Н. "Эволюция структуры неравновесных Fe-Ga сплавов с высоким содержанием галлия при нагреве-охлаждении" Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021) 27 сентября – 1 октября, г. Екатеринбург, приглашенный доклад.
13. Киселев М.А. "Возможности малоуглового рассеяния нейтронов для исследования везикулярных систем". Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Приглашенный доклад.
14. Козленко Д.П. "Neutron diffraction at ultrahigh pressures at the IBR-2 pulsed reactor", Рабочее совещание "Дифракция нейтронов - 2021", 8 – 10 июня 2021 года, г. Гатчина, приглашенный доклад (online).
15. Козленко Д.П. "Комплекс нейтронных спектрометров реактора ИБР-2: современное состояние и перспективы", Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Приглашенный доклад (online).
16. Пахневич А.В. "Кристаллографическая текстура минералов в раковинах моллюсков из культурного слоя стоянок на о. Адак (Алеутские острова)", Второе международное рабочее совещание «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия», Казань, 16-20 октября 2021 г., приглашенный доклад
17. Пахневич А.В. "Рентгеновская микротомография палеонтологических музейных объектов, имеющих историческую ценность", Второе международное рабочее совещание «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия», Казань, 16-20 октября 2021 г., приглашенный доклад
18. Тропин Т.В, Карпец М.Л., Косячкин Е., Гапон И.В., Горшкова Ю.Е., Аksenov В.Л. Исследование структурной организации наночастиц в тонких пленках нанокомпозита полистирол-фуллерен,

Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Приглашенный доклад (онлайн).

19. Турченко В. А. “Структурные особенности и физические свойства гексаферритов М-типа” Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Приглашенный доклад.
20. “Clusterization aspects of fullerenes in polar solvents” JINR 65<sup>th</sup> Anniversary Conference «Ukraine-JINR Collaboration Prospect» September 6-10, 2021, Kharkiv, Ukraine / online, oral report.
21. Artikulnyi O.P. Formation of micelle-polymer complexes in the bulk of surfactant solution and interface of polymer brush system, International seminar “Neutron and Synchrotron radiation in Investigations of Condensed Matter”, 12-14 October 2021, Oral report (online).
22. Artykulnyi O.P., Petrenko V.I., Avdeev M.M., Shibaev A.V., Ivankov O.I., Bulavin L.A. Structure investigation of polymer – surfactant micelle aggregates, International workshop for young scientists “Functional materials for technical and biomedical applications”, 6–10 September 2021, Kharkiv, Ukraine, Oral report.
23. Bălășoiu M., Bunoiu M., Chirigiu L.M.E., Bica I., Electrical devices based on hybrid magnetorheological suspensions: Realization, phenomenological modeling and technical characteristics, 4<sup>th</sup> International Summer School and Workshop: Complex and Magnetic Soft Matter Systems, CMSMS 2021, 19 - 23 April 2021, Timisoara, Romania, Oral report
24. Belozerova N.M., Pressure Induced Polymorphic Phase Transition in Pharmaceutical Compounds, IUCr High-Pressure Workshop 2021, 01.02.2021 – 06.02.2021, Novosibirsk, Russian Federation, Oral report
25. Donkov A.A., Popov E., “Hydrogen and helium incorporated into vacancy clusters in graphene on copper, iron, tungsten substrate studied by positron annihilation”, Low-dimensional materials: Theory, Modeling, Experiment, International Conference, 12-17 July 2021 Dubna, Russia. Oral report.
26. Dyussebekova S., A study high pressure effect on the vibrational spectra of ranitidine hydrochloride. The XXV International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2021), 11-15 October 2021, Almaty, Kazakhstan, Oral talk
27. Gapon I.V., Kuzmenko M.O., Tropin T.V., Avdeev M.V. GRAINS reflectometer status and prospects, International workshop for young scientists “Functional materials for technical and biomedical applications”, 6–10 September 2021, Kharkiv, Ukraine, Oral report.
28. Gorshkova Yu.E. “Life sciences with neutrons at IBR-2 reactor”. Heinz Maier-Leibnitz-Zentrum (MLZ) conference « Neutrons for Life Sciences», 8–11 Jun 2021 (Online). Oral report.
29. I. Kalembe-Rec, “Texture development in the Friction Stir Welded Aluminum Alloy”, International Conference on Textures of Materials (ICOTOM-19), March 1- 4, 2021, Japan, Osaka, Oral report
30. Kholmurodov Kh.T. Structural Properties of Lipid Membranes: Experimental and Model Studies, The Third Virtual International Conference on Molecular Modeling and Spectroscopy (ICMMS-3), 15-16 September 2021, Cairo, Egypt.
31. Kosiachkin Ye.N., Avdeev M.V., Gapon I.V., Perenko V.I., Bulavin L.A. Reflectometry studies of planar interfaces for lithium power sources, 13<sup>th</sup> International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), September 24-30 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain, Oral report.
32. Kosiachkin Ye.N., Avdeev M.V., Gapon I.V., Petrenko V.I., Bulavin L.A. Neutron and X-ray reflectometry application in studies of planar interfaces for lithium power sources, International workshop for young scientists “Functional materials for technical and biomedical applications”, 6–10 September 2021, Kharkiv, Ukraine, Oral report.
33. Kuzmenko M.O., Gapon I.V., Maslova V.A., Gorshkova Yu., Avdeev M.V. New liquid-solid cell with silicone oxide for studying biological samples, International workshop for young scientists “Functional materials for technical and biomedical applications”, 6–10 September 2021, Kharkiv, Ukraine, Oral report.
34. Lis O.N., Pressure Effect on Crystal Structure Of Bismuth Tungstate Bi<sub>2</sub>WO<sub>6</sub>, IUCr High-Pressure Workshop 2021, 01.02.2021 – 06.02.2021, Novosibirsk, Russian Federation, Oral report
35. M. Kopyściański “Texture transformation during friction stir processing of the Al-Si cast alloys”, International Conference on Textures of Materials (ICOTOM-19), March 1- 4, 2021, Japan, Osaka, Oral report
36. Mirzayev M.N., Popov E., “Thermic and electrical analogy of b<sub>4</sub>c and bn under different irradiation” XXXI Международная конференция «Радиационной физики твердого тела» 05-10 июля 2021 г. Севастополь Россия. Устный доклад.
37. Nagorni A.V., Structural ordering of magnetic and non-magnetic nanoparticles in aqueous media by SANS, 4th International Summer School and Workshop "Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure", April 19 – 23, 2021, Timisoara, Romania, oral report (online)
38. Smirnova V. S., THE STUDY OF METAL ARTIFACTS OF SLAVIC POPULATIONS IN THE TERRITORY OF THE MOSCOW REGION BY NEUTRON TOMOGRAPHY AND DIFFRACTION METHODS, TIM 20-21 Physics Conference, November 11th - 13th 2021, Timisoara, Romania (online), Oral report
39. Tomchuk A.A., Avdeev M.V., Shershakova N.N., Turetskiy E.A., Andreev S.M., Khaitov M.R., Voitshenko I.S. Comparative structural and in vitro toxicity study of C<sub>60</sub>-lysine and C<sub>60</sub>-piperazine aqueous solutions for

- biomedical purposes, 15th International Conference "Advanced Carbon Nanostructures" (ACNS-2021), 28 June – 2 July 2021, Saint-Petersburg, Russia, Oral report (online).
40. Tomchuk O.V., Avdeev M.V. Isoscattering point in SANS contrast variation studies of magnetic fluids, 4th International Summer School and Workshop: "Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure" (CMSMS-2021), 19–22 April 2021, Timisoara, Romania, Oral report (online)
  41. Tomchuk O.V., Avdeev M.V. Isoscattering point in SANS contrast variation studies of core-shell nanoparticles, The XXV International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2021), 1–15 October 2021, Almaty, Kazakhstan, Oral report (online).
  42. Tomchuk O.V., Avdeev M.V., Bulavin L.A., Zabulonov Yu.L. Fractal structures in nanosystems by scattering techniques, International workshop for young scientists "Functional materials for technical and biomedical applications", 6–10 September 2021, Kharkiv, Ukraine, Oral report.
  43. Tomchuk O.V., Avdeev M.V., Bulavin L.A., Zabulonov Yu.L., Ivankov O.I., Len A. Tuning of the porous structure of detonation nanodiamond powders by pressure: SANS study, 15th International Conference "Advanced Carbon Nanostructures" (ACNS-2021), 28 June – 2 July 2021, Saint-Petersburg, Russia, Oral report (online).
  44. Tropin T.V., Selyshchev P.A., Petrenko V.I., Avdeev M.V., Aksenov V.L. Kinetics of cluster growth in C<sub>60</sub>-toluene solutions: DLS study and theoretical evaluation, 15<sup>th</sup> International Conference "Advanced Carbon NanoStructures" (ACNS-2021), 28 June – 2 July 2021, Saint-Petersburg, Russia, Oral report (online).
  45. Yerdauletov M. Influence of the microstructure of positive lithium-ion batteries on their functional characteristics, III International Scientific Forum "Nuclear Science and Technologies", 20–24 September 2021, Almaty, Kazakhstan, Oral report.
  46. Zel I.Yu., High Pressure Studies of BaYFeO<sub>4</sub> By Neutron Powder Diffraction and Raman Spectroscopy, IUCr High-Pressure Workshop 2021, 01.02.2021 – 06.02.2021, Novosibirsk, Russian Federation, Oral report
  47. Zhomartova A.Zh., Study of ceramic objects of the settlement of ancient Kazakhstan by methods of neutron tomography, diffraction and Raman spectroscopy. The XXV International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2021), 11-15 October 2021, Almaty, Kazakhstan, Oral talk
  48. Абдурахимов Б. А., Неразрушающие исследования объектов культурного наследия узбекистана на новой установке нейтронной радиографии и томографии на реакторе ВВР-СМ, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Устный доклад
  49. Абдурахимов Б. А., Результаты исследования объектов культурного наследия Республики Узбекистан на новой станции нейтронной радиографии и томографии на реакторе ВВР-СМ, Второе международное рабочее совещание «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия». 16 – 20 октября 2021 г., Казань, Устный доклад
  50. Байгунов И.А., Гладышев П.П., Холмуродов Х.Т., Шаповалов Ю.А. Молекулярно-динамическое исследование конформационного поведения алкогольдегидрогеназы в зависимости от pH раствора, 28<sup>ая</sup> научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов, 12-23 Апреля 2021, Дубна, ГУ «Дубна».
  51. Бакиров Б.А., Исследование объектов культурного наследия методами нейтронной томографии и дифракции «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия». 16 – 20 октября 2021 г., Казань, Устный доклад.
  52. Бокучава Г.Д., И.В. Папушкин, А.А. Круглов, Нейтронная фурье-стресс-дифрактометрия по времени пролета на реакторе ИБР-2 для решения материаловедческих задач, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в конденсированных средах (РНИКС-2021), 27 сентября - 1 октября 2021 г., г. Екатеринбург, Россия. Устный доклад.
  53. Горшкова Ю.Е. "Комплементарные методы исследования для биогибридных нанокомплексов". Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021 г. , Екатеринбург. Устный доклад.
  54. В.Д. Жакетов. Neutron reflectometry with registration of secondary radiation. The XXV International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2020), October 11-15, 2021, Almaty, Kazakhstan. Устный доклад.
  55. В.Д. Жакетов. Нейтронная рефлектометрия с регистрацией вторичного излучения. Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021 г. , Екатеринбург. Устный доклад.
  56. Ердаулетов М. Исследование влияния микроструктуры положительных и отрицательных электродов литий-ионных аккумуляторов на их функциональные характеристики, I Международная Школа-конференция «Атом. Наука. Технологии», 14-16 апреля 2021, Алматы, Казахстан, Устный доклад.

57. Ердаулетов М., Влияние микроструктуры положительных литий-ионных аккумуляторов на их функциональные характеристики, Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Устный доклад.
58. Жомартова А.Ж., Исследование керамических объектов поселения древнего Казахстана методами нейтронной томографии, дифракции и рамановской спектроскопии. Второе международное рабочее совещание «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия». 16 – 20 октября 2021 г., Казань, Устный доклад
59. Зель И. Ю., Структура и фазовый состав горных пород из мест захоронения радиоактивных отходов: методы нейтронного рассеяния, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Устный доклад
60. И.А. Бобриков “Temperature evolution of Fe-27Ga structure: comparison of X-Ray and neutron in situ diffraction study” XII International conference on superconductivity and magnetism 21-27 October 2021, Bodrum, Turkey, устный доклад
61. И.А.Бобриков «Temperature-induced phase transitions on the surface and in the bulk of the Fe-27Ga magnetostriuctive alloy», Рабочее совещание “Дифракция нейтронов - 2021”, 8 – 10 июня 2021 года, г. Гатчина, устный доклад.
62. Гладышев П.П., Холмуродов Х.Т., Грибова Е.Д., Туманов Ю.Д., Байгунов И.А. Рудных С.К. Молекулярная диагностика заболеваний и аналитическая химия белков будущего. Возможности молекулярной динамики в разработке эффективных белковых биореагентов для иммунохимической диагностики заболеваний, 1-ая Всероссийская Конференция "Перспективные направления медицины будущего, 22-23 октября 2021, Дубна, Россия.
63. Кичанов С. Е., нейтронная радиография и томография на реакторе ИБР-2: текущий статус и последние результаты, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Устный доклад
64. Лозанов В.В., Бескровный А.И. “Исследование продуктов взаимодействия иридия с  $W_2V$  и  $TaV_2$  с применением метода времяпролётной нейтронографии” Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Устный доклад
65. Ляникова Е.В., Моржухина С.В., Моржухин А.М., Холмуродов Х.Т., Тестов Д.С., Попова Е.С., Гашимова В.Р. Возможности применения молекулярного моделирования для прогнозирования свойств теплоаккумулирующих материалов на основе кристаллогидратов, 28<sup>ая</sup> научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов, 12-23 Апреля 2021, Дубна, ГУ «Дубна».
66. М.Е. Донец «Mechanical milling effect on structural and electrochemical properties of lithium-nickel-manganese-cobalt oxide cathode materials» 25-я Международная научная конференция молодых ученых и специалистов ОИЯИ, 10-15 октября 2021, Алматы, Казахстан, устный доклад
67. Маслова В.А., Кузьменко М.О., Галон И.В., Киселев М.А. Особенности осаждения липидов на кремниевую подложку в зависимости от их состава, Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Устный доклад (онлайн).
68. Пахневич А.В. “Использование рентгеновской микротомографии в бактериальной палеонтологии” ПАЛЕОСТРАТ. Годичное собрание (научная конференция) секции Палеонтологии МОИП и Московского отделения Палеонтологического общества при РАН, Москва, 25–26 января 2021 г., устный доклад
69. Руткаускас А. В., Кристаллическая и магнитная структура полугейслеровских сплавов  $MnNi_{0.9}M_{0.1}Sb$  ( $M = Ti, V, Cr, Fe, Co$ ), Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Устный доклад
70. Сёмкин М. А., Попов Е. П., Бескровный А. И. “Магнитные структуры соединений  $Li(Ni,Co)PO_4$ ”, (РНИКС-2021): Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Устный доклад.
71. Сиколенко В.В., Карпинский Д.В., Вершинина Т.А., Нейтронное рассеяние на допированных нестехиометрических  $ViMnO_3$  конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), Екатеринбург, 27 сентября - 1 октября 2021г. Устный доклад.
72. Смирнова В.С., Исследование металлических артефактов славянских поселений на территории Московской области методами нейтронной томографии и дифракции. Второе международное рабочее совещание «Применение ядерно-физических методов для исследования объектов культурного наследия». 16 – 20 октября 2021 г., Казань, Устный доклад
73. Худоба Д.М. “New inelastic neutron scattering spectrometer at IBR-2 reactor”, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Устный доклад.

74. A. Badmaarag, D. Sangaa, V. Sikolenko, L. Enkhtur, "Distribution of residual stresses in reinforcing steel bars" III International Scientific Forum "Nuclear Science and Technologies", 20 – 24 September 2021, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan
75. A. Badmaarag, D. Sangaa, V. Sikolenko, L. Enkhtur, "Investigation of residual lattice strain in a polycrystalline sandstone sample using the neutron Time-Of-Flight diffraction" III International Scientific Forum "Nuclear Science and Technologies", 20 – 24 September 2021, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan.
76. Balasoiu M., Buzatu D., Ivankov O., Balasoiu-Gaina A.-M., Lysenko S., Astafeva S., Stan C., On the CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/LA/SDS-Na/H<sub>2</sub>O ferrofluid structure. Effect of dilution and temperature, 4<sup>th</sup> International Summer School and Workshop: Complex and Magnetic Soft Matter Systems, CMSMS 2021, 19 - 23 April 2021, Timisoara, Romania, Poster report
77. Genov I.G., Popov E., Beskrovnyi A.I. "Investigation and analysis of tungsten alloys using neutron diffraction" Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Екатеринбург, Россия. Стендовый доклад.
78. Genov I.G., Popov E., Beskrovnyi A.I. "Neutron diffraction study of high-tech alloy for effects caused by heavy ion irradiation", Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021 г. Екатеринбург, Россия. Стендовый доклад.
79. Kholmurodov Kh.T., Dushanov E.B., Kondela T., Hrubovčák P., Badreeva D.R., Ermakova E.V., Ivankov O.I., Kuklin A.I., Kurakin S.A., Murugova T.N., Soloviov D.V., Kučerka N. Coarse-Grained MD-Simulations for Big Vesicles Objects: The Experimental and Model Studies of Lipid Membranes, IX Международная конференция «Современные проблемы ядерной энергетики и ядерных технологий», 23-25 ноября 2021, Улугбек, Ташкент, Узбекистан.
80. Kosiachkin Ye.N., Tropin T.V., Gapon I.V., Tomchuk O.V., Nagorniy A.V., Artykulnyi O.P., Kuzmenko M.O., Bulavin L.A., Avdeev M.V. Neutron reflectometry in applied research of interfaces with liquid and soft media at the IBR-2 reactor, 4<sup>th</sup> Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS-4), September 24-30 2021, Sant Feliu de Guixols, Spain, Poster report.
81. M Sliwinska-Bartkowiak, A.Beskrovnyi "Phase Transitions of EMIN TFSI Ionic Liquids confined in Nanocarbons" AAAPM-UCLA International Conference on Advances in Functional Materials, 18-22 August 2021 Los Angeles, USA. Poster
82. M. Balasoiu, C. Andronache, D. Racolta, A. Pantelica, D. Pantelica, D.M. Mihai, D. Iancu, Investigation of x(Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.Ag<sub>2</sub>O)·(100-x)[P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>·CaO] glass samples by means of PIXE, PIGE and RBS methods, International Seminar on Interaction of neutrons with Nuclei, 28 International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultracold Neutrons, Related Topics» ISINN-28, May 24 - 28, 2021, Poster report.
83. M.Sliwinska-Bartkowiak, A.Beskrovnyi, "Structures of ice confined in nanopores; pressure enhancement and wetting energy effects" Smart Materials and Surfaces, October 20-22, Milan 2021. Poster.
84. M.Sliwinska-Bartkowiak, A. Beskrovnyi, "Structures of Ice in Confined" Golden Jubilee Foundation Year International Conference on "Artificial Intelligence, Photonics, Revolutionary Smart Material" 25-26 October 2021, Darbhanga, India. Poster.
85. Mirzayev M., Popov E. "Decomposition of water molecules on titanium dioxide nano powder under neutron irradiation" Multiscale Phenomena in Condensed Matter, 5-7 July 2021, Kraków, Poland. Poster
86. Nagorna T. "Specifics of fullerenes cluster formation in polar / nonpolar solvent mixture" 4<sup>th</sup> International Summer School and Workshop "Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure" 19 - 23 April 2021, Timisoara, Romania / online, poster;
87. Авдеев М.М., Синтез тонких полимерных пленок на кремниевой поверхности для развития «умных» покрытий с антисептическими свойствами, Зезинская школа-конференция для молодых ученых "Химия и физика полимеров", 11-13 ноября 2021, Москва, стендовый доклад (онлайн).
88. Бакиров Б. А., Исследование античных и средневековых монет неразрушающими методами нейтронной томографии и дифракции, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия. Постерный доклад
89. Галон И.В., Кузьменко М.О., Тропин Т.В., Авдеев М.В. Рефлектометр ГРЭИНС: статус и перспективы, Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Стендовый доклад (онлайн).
90. Голосова Н. О., Структурные и магнитные фазовые переходы в металлическом тербии при воздействии высоких давлений, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия. Постерный доклад

91. Жомартова А. Ж., Результаты исследования керамических образцов —объектов культурного наследия казахстана—с помощью методов нейтронного рассеяния, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Постерный доклад
92. И.А. Бобриков «Влияние механического помола различной интенсивности на структурные и электрохимические свойства катодных материалов на основе литий-никель-марганец-кобальтового оксида», XVI Международная конференция "Актуальные проблемы преобразования энергии в литиевых электрохимических системах" 20-24 сентября 2021г, г. Уфа, стендовый доклад.
93. Кузьменко М.О., Гапон И.В., Маслова В., Горшкова Ю.Е., Авдеев М.В. Новая ячейка «жидкость-твердое тело» с несущим нанослоем оксида кремния для исследования биологических образцов, Конференция по использованию нейтронов в исследовании конденсированных сред (РНИКС-2021), 27 сентября – 1 октября 2021, Стендовый доклад (онлайн).
94. Смирнова В. С., Исследование киафов с раскопок грунтового могильника волна-1 методом нейтронной томографии, Конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированных сред (РНИКС-2021), 27.08.2021 – 01.10.2021, Екатеринбург, Россия, Постерный доклад

### **Аспиранты, соискатели и студенты, принимавшие участие в исследованиях**

#### **Аспиранты и соискатели**

1. Аргымбек Байболат, соискатель ОИЯИ, диссертация: «Кристаллическая и магнитная структура сложных оксидов железа в широком диапазоне давлений и температур», рук. Кичанов С.Е.
2. Артикульный А.П., аспирант КНУ, диссертация «Влияние полимеров на структуру и взаимодействие мицеллярных систем», рук. Авдеев М.В.
3. Бакиров Булат Айратович, аспирант КФУ диссертация: «Изучение объектов культурного наследия методами нейтронной радиографии, томографии и дифракции», рук. Белушкин А.В.
4. Байгунов И., аспирант ГУ «Дубна», диссертация «Молекулярная динамика белков с учетом рН растворов», рук. Холмуродов Х.Т.
5. Ердаулетов Мейир, аспирант ГУ «Дубна», «Влияние микроструктуры положительных и отрицательных электродов литий-ионных аккумуляторов на их функциональные характеристики», рук. Авдеев М.В.
6. Кенессарин Мурат, аспирант ГУ «Дубна», кандидатская диссертация «Исследование строительных и геофизических материалов методом нейтронной радиографии и томографии», рук. Кичанов С.Е.
7. Колупаев Е.Д., аспирант МГУ, «Исследования магнетизма слоистых структур рефлектометрией нейтронов в статическом и осциллирующем магнитном поле», рук. Никитенко Ю.В.
8. Косячкин Е.Н., аспирант КНУ, диссертация «Исследование электрохимических интерфейсов методами нейтронного рассеяния», рук. Авдеев М.В.
9. Куракин С.А., аспирант Казанского (Приволжского) федерального университета, рук. Кучерка Н.
10. Лис О.Н., аспирант Казанского (Приволжского) федерального университета, кандидатская диссертация: «Кристаллическая и магнитная структура сложных оксидов кобальта и железа в широком диапазоне давлений и температур», рук. Козленко Д.П.
11. Набиев Асиф Оглы, соискатель ОИЯИ.
12. Назаров Куаныш, аспирант Евразийского Национального Университета им.Л.Н.Гумилева, тема диссертации: «Исследование структурных особенностей конструкционных и функциональных материалов методом нейтронной радиографии и томографии», рук. Кичанов С.Е.
13. Назарова Асель, аспирант в Евразийском национальном университете им. Л.Н.Гумилева, Казахстан. «Исследование магнитных наночастиц типа “оболочка-ядро” применяемых в ядерной медицине». рук. Худоба Д.М.
14. Ской В.В., аспирант МФТИ, рук. Куклин А.И.
15. Клепацка М., аспирант Факультета физики Университета им. А. Мицкевича в Познани, Польша; рук. Худоба Д.М.

#### **Студенты:**

1. Авдеев М.М. (МГУ), Синтез полимерных нанослоёв для детектирования мицелл поверхностно-активных веществ на границе раздела, магистратура, рук. Шибаяев А.В.

2. Боронин Д.И. (МГУ), Рефлектометрические исследования тонких металлических пленок с регулируемой структурой для электрохимического осаждения, бакалавриат, рук. Авдеев М.В.
3. Кукарин Д. (ГУ «Дубна»), Молекулярная динамика белков коронавирусных систем, бакалавриат, рук. Холмуродов Х.Т.
4. Краав А. (ГУ «Дубна»), Молекулярная динамика низкомолекулярных соединений, бакалавриат, рук. Холмуродов Х.Т.
5. Ганичев Я. (ГУ «Дубна»), Молекулярная динамика кофермента НАД, бакалавриат, рук. Холмуродов Х.Т.
6. Гомулин М. (ГУ «Дубна»), Молекулярная динамика белков коронавирусных систем, бакалавриат, рук. Холмуродов Х.Т.
7. Голубцов П. (ГУ «Дубна»), Молекулярно-динамическое моделирование (От атомных фрагментов до молекулярных структур), бакалавриат, рук. Холмуродов Х.Т.
8. Антонов Ю.А. (МГУ), Поляризирующие суперзеркала с большими углами отражения, магистратура, рук. Авдеев М.В.
9. Бухалович С.М., рук. Куклин А.И.
10. Багаева Д. Ф., рук. Куклин А.И.
11. Осипов С.Д., рук. Куклин А.И.
12. Сударев В.В., рук. Куклин А.И.

#### **Подготовленные кандидатские и докторские диссертации**

1. Тропин Тимур Васильевич, Кинетика необратимых процессов в частично упорядоченных структурах, д.ф.-м.н, науч. консультант Аксенов В.Л.
2. Белозерова Надежда Махмудовна, «Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру микрокристаллических и нанокристаллических сложных оксидов марганца и железа», к.ф.-м.н., науч. руководитель Козленко Д.П.
3. Кичанов Сергей Евгеньевич, «Экспериментальные методы нейтронной радиографии и томографии на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 и стационарном исследовательском реакторе ВВР-К», д.т.н., науч. консультант Козленко Д.П.
4. Жакетов В.Д., «Эффекты близости в неоднородных структурах с ферромагнитными и сверхпроводящими слоями», к.ф.-м.н., науч. руководитель Никитенко Ю.В.
5. Рулев М.И., PhD, науч. рук. Гордон/Горделий В.И.

#### **Информация о контактах со СМИ**