

Российская академия наук
Уральское отделение
ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ

УДК 538.91.911; 538.91.913; 538.91.915
538.94.945; 538.955; 538.97; 539.125.5
Г.р. № 01.2.007 08390

Инв. № 2298/2



УТВЕРЖДАЮ:
Директор Института,
чл.-корр. РАН

В.В.Устинов

«19» ноября 2007 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

**НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ
НАНОМАТЕРИАЛОВ, КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ СО
СПЕЦИАЛЬНЫМИ СВОЙСТВАМИ (В ТОМ ЧИСЛЕ,
КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ АТОМНОЙ
ЭНЕРГЕТИКИ В ИСХОДНОМ СОСТОЯНИИ И ОБЛУЧЕННЫХ В
ПРОЦЕССЕ ЭКСПЛУАТАЦИИ), КОМПОЗИЦИОННЫХ И
КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ
ВОДО-ВОДЯНОМ АТОМНОМ РЕАКТОРЕ ИВВ-2М
(НЕЙТРОННЫЙ МАТЕРИАЛОВЕДЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ИФМ
УРО РАН)**

по теме:

**ОБЕСПЕЧЕНИЕ РЕАЛИЗАЦИИ МЕРОПРИЯТИЙ ФЦП И
ДРУГИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ И ДООСНАЩЕНИЕ ИМЕЮЩЕГОСЯ
СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО КОМПЛЕКСА
(промежуточный)**

Этап второй

Шифр 2007-7-1.8-00-03-005

Государственный контракт от «19» апреля 2007 г. № 02.518.11.7026

Дополнительное соглашение от «20» сентября 2007 г. №1

Научный руководитель,
чл.-корр. РАН

Б.Н.Гощицкий

подпись, дата

16.11.07

Екатеринбург 2007

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы
член-корр. РАН



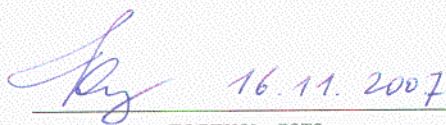
подпись, дата

16.11.07

Б.Н. Гощицкий
(Введение, заключение,
1.1, 2, 3, 4.1)

Исполнители темы:

зав. отделом,
д.ф.-м.н.,
профессор



подпись, дата

16.11.2007

Ю.Н. Скрябин
(1, 4, Приложения)

ст. научн. сотр.,
к.ф.-м.н.



подпись, дата

16.11.2007

В.И. Бобровский
(1.8, 1.11)

ст. научн. сотр.,
к.ф.-м.н.

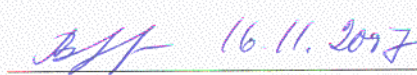


подпись, дата

16.11.07

С.Г. Богданов
(1.3, 1.5, 1.6, 1.7, 1.9)

ст. научн. сотр.,
к.ф.-м.н.

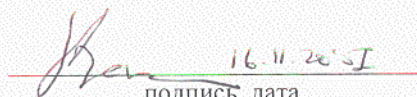


подпись, дата

16.11.2007

В.И. Воронин
(1.1, 1.3, 1.4)

ст. научн. сотр.,
к.ф.-м.н.

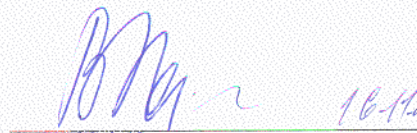


подпись, дата

16.11.2007

А.Е. Карькин
(1.2, 1.8, 1.10)

рук. группы,
к.ф.-м.н.

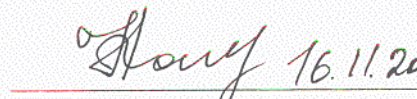


подпись, дата

16.11.07

В.Д. Пархоменко
(1.2, 2)

Нормоконтролер



подпись, дата

16.11.2007

Н.А. Гоглева

РЕФЕРАТ

Отчет 40 с., 2 прил.

Рассеяние нейтронов, радиационная физика, дефекты, магнитные структуры, наноструктуры, твердые электролиты, системы с сильными электронными корреляциями, фазовые переходы, электронные и решёточные свойства.

В качестве объектов исследования выбраны многокомпонентные сплавы и соединения редкоземельных и переходных металлов; наноструктуры и твердые электролиты; конструкционные материалы и системы с сильными электронными корреляциями после радиационного, термического и барического воздействий. Исследования в широком интервале температур 4.2К – 1000К, в магнитных полях до 15 Тл и при давлениях до 20 Кбар проводятся на уникальных образцах, приготовленных с использованием оригинальных технологий как в виде однофазных порошков, так и совершенных монокристаллов.

Цель работы:

1. Проведение исследований и обеспечение научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ, проводимых организациями Российской Федерации, с предоставлением возможности использования методов, основанных на применении потоков как тепловых и быстрых нейтронов ядерного реактора для получения фундаментальной научной информации об особенностях кристаллической, нанокристаллической и магнитной структур и фазовых переходов в функциональных материалах, определяющих их служебные свойства; о влиянии реакторного облучения на структуру и свойства материалов (в том числе, конструкционных, для атомной энергетики) с последующей разработкой рекомендаций по созданию новых радиационно-стойких материалов и радиационной модификации свойств сплавов и соединений.
2. Развитие материально-технической базы УСУ «Атомный реактор ИВВ-2М, рег. № 01-34 (Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ УрО РАН)» путем дооснащения имеющихся специализированных комплексов (лабораторий), приобретаемым научным оборудованием для обеспечения и развития исследований в режиме коллективного пользования.

На втором этапе работ «Обеспечение реализации мероприятий ФЦП и других научных проектов и дооснащение имеющегося специализированного комплекса» в соответствии с Техническим заданием и Календарным планом:

- проведены научные исследования в рамках реализации мероприятий ФЦП;
- определен победитель конкурса и заключён Госконтракт № 29-ГК/07 от « 15 »

августа 2007 г. на поставку в ноябре-декабре с.г. автономного криорефрижератора на импульсных трубках и начата поставка этого оборудования;

- завершена разработка программы и концепции развития УСУ до 2010 года.

По результатам исследований опубликовано – 25 статей, сделано - 30 докладов на конференциях.

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
ВВЕДЕНИЕ	7
1. Научные исследования	9
1.1 Исследование влияния структурного разупорядочения на структурное и магнитное состояния, физические свойства перспективных катодных материалов на основе литиевых манганитов со структурой шпинели (на примере LiMn_2O_4)	9
1.2 Исследование гальваномагнитных свойств тройных кристаллов PbSnSe ($x=0 - 0.125$) при облучении быстрыми нейтронами (при $T=330\text{ K}$) и последующих изохронных отжигах	10
1.3 Изучение структурных и магнитных превращений в соединениях $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$	10
1.4 Изучение локализации атомов водорода в структуре кубических и ромбоэдрических гидридов соединения ErFe_2	11
1.5 Изучение атомной и субатомной структуры нанодисперсных углеродных наноматериалов	11
1.6 Энтропия и магнитокалорический эффект в ферро- и ферримагнетиках с магнитными фазовыми переходами первого рода	13
1.7 Энергетический анализ малоуглового рассеяния нейтронов и изучение коэффициента термического линейного расширения в $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррите	14
1.8 Изучение поведения магнитных свойств под давлением в кобальтовых перовскитах $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.5}$ ($\text{R}=\text{Y}, \text{Pr}, \text{Ho}$)	14
1.9 Изучение магнитной структуры сплавов квазибинарной системы $\text{FeSn}_2 - \text{MnSn}_2$	17
1.10 Трансформация кристаллической, электронной и фононной структуры GaAs , Ge , Si , Fe_3O_4 в области фазовых переходов под давлением до 30 ГПа	17
1.11 Кристаллографические особенности твердых электролитов $\text{K}(\text{Al}/\text{Fe})\text{O}_2$ и $(\text{K}/\text{Rb}/\text{Cs})_3\text{PO}_4$ в суперионном состоянии	18
1.12 Разработка нейтронографических методов изучения внутренних напряжений в материалах	19
2 Закупка оборудования	20
3 Сведения об услугах коллективного пользования	21
4 Программа и концепция развития УСУ до 2010 года	22
4.1 Концепция развития УСУ	22
4.2 Создание специализированного дифрактометра для исследования наноматериалов	23
4.3 Модернизация существующего оборудования и приобретение нового оборудования	24
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	25
Приложение А. Список публикаций	30
Приложение Б. Информация по п. 9.3 Технического задания	34

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

УСУ

ФЦП

ИВВ-2М

- Исследовательский водо-водяной атомный реактор ИВВ-2М

ИФМ УрО РАН

- Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук

МУВ

- магнитоупругое взаимодействие

ДСД

- двухосный стресс-дифрактометр

РГ

- расширенный графит

МУРН

- малоугловое рассеяние нейтронов

КПД

- коэффициент полезного действия

СИС

- суперионное состояние

ТЭЛ

- твердый электролит

ЩЗМ

- щелочноземельные металлы

РГ

- расширенный графит

ИСОГ

- интеркалированные соединения окисленного графита

ИСГ

- интеркалированные соединения графита

ПЧД

- позиционно-чувствительный детектор

ВВЕДЕНИЕ

Исследовательский атомный реактор ИВВ-2М (г. Заречный Свердловской обл.) является единственным в Урало-Сибирском регионе, где проводятся прикладные и фундаментальные исследования с использованием потоков быстрых и тепловых нейтронов. В настоящий момент главными направлениями исследований на реакторе ИВВ-2М являются: радиационная физика и радиационное материаловедение, нейтронные исследования конденсированного состояния. В рамках радиационного направления проводятся исследования дефектов, структурных и фазовых превращений, диффузионных процессов и физических свойств твердых тел при высокоэнергетичных излучениях и термических воздействиях. Объектами нейтронографического направления исследований являются сплавы и соединения с сильными электронными корреляциями (в частности, магнетики, сверхпроводники, Кондо-системы и др.). Кроме радиационного и нейтронографического направлений исследований на реакторе ИВВ-2М проводится комплекс мероприятий по модернизации материально-технической базы. С этой целью в настоящее время завершаются работы по сооружению специализированного стресс-дифрактометра для исследования внутренних напряжений в конструкционных материалах, в том числе, радиоактивных реакторных, определяющих срок их надежной и безопасной эксплуатации.

Основанием для проведения НИР по теме: «Нейтронные исследования особенностей структуры наноматериалов, кристаллических материалов со специальными свойствами (в том числе, конструкционных материалов для атомной энергетики в исходном состоянии и облученных в процессе эксплуатации), композиционных и керамических материалов на исследовательском водо-водяном атомном реакторе ИВВ-2М (Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ УрО РАН)» шифр «2007-7-1.8-00-03-005», выполняемой в рамках федеральной целевой научно-технической программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы», является решение Конкурсной комиссии Роснауки № 10 (протокол от «30» марта 2007г. № 7), на основании которого заключен государственный контракт от «19» апреля 2007 г. № 02.518.11.7026.

Работы в рамках государственного контракта направлены на решение таких актуальных проблем физики твердого тела, как механизмы радиационной повреждаемости материалов, особенности формирования магнитных структур в соединениях переходных металлов, природа суперионного состояния твердых электролитов, структура наноматериалов.

Конкретно, предполагается провести:

- Исследование кристаллических, нанокристаллических и магнитных структур и особенностей фазовых переходов в сплавах и соединениях методами дифракции и малоуглового рассеяния нейтронов.
- Нейтронографическое исследование особенностей структурного состояния веществ, облученных быстрыми нейтронами и гамма-квантами.
- Изучение особенностей решеточных и электронных свойств исследуемых веществ (в том числе, с наведенной радиоактивностью) общефизическими методами.

Такие исследования необходимы для разработки новых радиационно-стойких конструкционных материалов для ядерной и термоядерной энергетики, синтеза новых сорбентов и катализаторов.

Работа проводится коллективом высококлассных специалистов на высоком научно-техническом уровне на экспериментальных установках, своевременно прошедших метрологическую аттестацию.

В соответствии с Техническим заданием и Календарным планом на второй этап было запланировано:

- провести научные исследования в рамках реализации мероприятий ФЦП;
- определить победителя конкурса, заключить Госконтракт на закупку автономного криорефрижератора на импульсных трубках и начать поставку этого оборудования;
- завершить разработку программы и концепции развития УСУ до 2010 года.

По результатам проведенных научных исследований в 2007 году опубликовано 25 статей и сделано 30 докладов на конференциях.

1 Научные исследования

1.1 Исследование влияния структурного разупорядочения на структурное и магнитное состояния, физические свойства перспективных катодных материалов на основе литиевых манганитов со структурой шпинели (на примере LiMn_2O_4)

Из литературы известно, что литиевый манганит со структурой нормальной шпинели $\text{Li}^+[\text{Mn}^{4+}\text{Mn}^{3+}\text{O}_4]^{2-}$ является весьма интересным физическим объектом. В окрестности комнатной температуры возникает зарядовое упорядочение ионов Mn^{4+} и Mn^{3+} по типу $(1/3, 1/3, 0)$, сопровождающееся орторомбическими искажениями кристаллической структуры. Этот структурный переход (I-рода) резко снижает количество циклов перезарядки батарей (литиевый манганит предполагается использовать в качестве катодного материала в перезаряжаемых батареях). В высококачественных образцах ниже 65 К возникает антиферромагнитное упорядочение несоразмерного типа (окончательной ясности тут нет). Первоначальная идея заключалась в том, чтобы путем облучения перераспределить катионы лития и марганца по октаэдрическим и тетраэдрическим позициям шпинельной решетки. Предполагалось, что такое разупорядочение подавит структурный переход, обусловленный электронным упорядочением, и, возможно, приведет к ферромагнетизму.

Синтезированы образцы LiMn_2O_4 . Проведенная аттестация показала, что образцы весьма высокого качества. Выполнено облучение ($\Phi = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-2}$) LiMn_2O_4 .

Методами рентгеновской (при комнатной температуре) и нейтронной (при 4.2 К, 78 К, 295 К) дифракции исследован исходный упорядоченный образец. Методами рентгеновской и нейтронной дифракцию при комнатной температуре исследован облученный ($\Phi = 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-2}$) образец.

Установлено, что физические свойства синтезированных образцов LiMn_2O_4 соответствуют литературным данным - наблюдаются электронное упорядочение и соответствующий структурный переход, дальний антиферромагнитный порядок в области низких температур. Предпринимаются усилия по расшифровке магнитной структуры. На основе дифракционных данных при комнатной температуре установлено, что облучение приводит к реализации следующего распределения катионов - $\text{Mn}_{0.33}\text{Li}_{0.67} [\text{Mn}_{1.67}\text{Li}_{0.33}]$, т.е. происходит частичное структурное разупорядочение. Признаков зарядового упорядочения в таком структурном состоянии не обнаружено.

1.2 Исследование гальваномагнитных свойств тройных кристаллов PbSnSe ($x=0 - 0.125$) при облучении быстрыми нейтронами (при $T=330$ К) и последующих изохронных отжигах

Замещение свинца оловом в узкощелевых полупроводниках PbSnSe приводит к сужению запрещенной щели и является приборным эффектом. Инфракрасные датчики на основе селенида свинца считаются радиационно-стойкими из-за высокой плотности состояний, стабилизирующих уровень Ферми. В работе исследовано влияние радиационных дефектов, образованных облучением быстрыми нейтронами и последующими изохронными отжигами, на свойства серии сплавов Pb-Sn-Se с целью выявления общих закономерностей изменения свойств при замещении. Облучение и отжиги позволяют обратимо сдвигать уровень химпотенциала в кристаллах, что используется, как для изучения электронной структуры, так и для модифицирования облучением электрофизических свойств материалов для электронных устройств.

Монокристаллические образцы синтезированы и аттестованы на физическом факультете МГУ.

Выполнены исследования температурных зависимостей эффекта Холла, удельного сопротивления и магнетосопротивления 4 образцов с концентрацией олова от 0 до 11,5 % в магнитных полях до 14 Тл, облученных флюенсом 2×10^{19} см⁻² и отожженных при температурах $T_{\text{анн}} = 340 - 470$ К.

После облучения наблюдались изменения температурных зависимостей константы Холла и удельного сопротивления, в том числе, переходы металл-полупроводник и изменение доминирующего типа носителей заряда. При отжиге исходные свойства почти полностью восстанавливались. Исследовано поведение указанных эффектов облучения и отжига при изменении химического состава монокристаллов.

1.3 Изучение структурных и магнитных превращений в соединениях Nd_{1-x}Tb_xCo₂

Намагниченность кобальтовой подрешетки в соединениях типа RCo₂ определяется величиной обменного поля, действующего со стороны редкоземельной подрешетки. Каково поведение кобальтовой подрешетки, в соединениях, в которых редкоземельная подрешетка сформирована из таких разноименных ионов, что их суммарная намагниченность равна нулю.

Образцы Nd_{1-x}Tb_xCo₂ ($0 < x < 1$) синтезированы дуговым методом на водоохлаждаемой лодочке в Институте физики металлов. Аттестация образца была проведена рентгено- и нейтронографическими методами. Установлено, что образцы имеют кубическую структуру типа MgCu₂.

Установлены температурные зависимости электросопротивления, определены температуры Кюри соединений. Нейтронографические измерения выполнены на дифрактометрах Д-2 и Д-3 Института физики металлов при 4.2 и 293 К.

Температура Кюри исследуемых соединений линейно возрастает с увеличением концентрации тербия, что указывает на усиление обменного взаимодействия. Концентрационная зависимость намагниченности редкоземельной подрешетки имеет отчетливо выраженную аномалию при $x=0.3$, при этой концентрации намагниченность редкоземельных ионов равна нулю. Однако намагниченность кобальтовой подрешетки не исчезает при этой концентрации, а сохраняет свой линейный рост при увеличении содержания тербиевых ионов.

1.4 Изучение локализации атомов водорода в структуре кубических и ромбоэдрических гидридов соединения ErFe_2

Интерметаллиды типа RFe_2 способны образовывать гидриды с высокой концентрацией водорода. Это свойство открывает широкие возможности использования гидридов типа RFe_2H_x в водородной энергетике. Однако имеющиеся экспериментальные данные пока не позволяют создать модель, описывающую механизм распределения атомов водорода по позициям решетки.

Образцы $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$, $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ были синтезированы в Институте физики металлов. Исходное соединение было получено дуговым методом на водоохлаждаемой лодочке. Гидрирование проведено при 200 С.

Нейтронографические исследования $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.1}$ и $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.1}$ проведены в интервале температур 10 - 453 К на дифрактометре высокого разрешения HRPT в Институте им. П.Шерера (Швейцария).

При 270 К обнаружен структурный переход из ромбоэдрической структуры (пр. гр. $R\bar{3}m$) в кубическую ($Fd\bar{3}m$). Установлены координаты и коэффициенты заполнения атомов водорода в кубической фазе. Определены температурные зависимости намагниченностей эрбиевой и железной подрешеток. Обнаружено, что магнитный порядок в Er-подрешетке разрушается при 300 К, тогда как в Fe-подрешетке - при 450 К.

1.5 Изучение атомной и субатомной структуры нанодисперсных углеродных наноматериалов

Слоистое строение графита и электронное строение углеродных слоев допускают спонтанное проникновение атомов и молекул некоторых веществ в межслоевые пространства с образованием интеркалированных соединений графита (ИСГ). С 70-х

годов прошлого века ИСГ интенсивно изучаются во всех передовых странах, и, прежде всего, с целью создания на их основе новых функциональных углеродных материалов, реагентов с каталитическими свойствами и твердых носителей реакционно способных веществ - щелочных металлов, фторидов и хлоридов металлов, оксидов неметаллов и безводных кислот. Однако графит обладает низкой универсальностью к внедряемому веществу. Он способен образовывать ИСГ только с объектами, обладающими донорно-акцепторными свойствами. Кроме того, стабильность ИСГ достаточно низка. Давление разложения для них сравнимо с упругостью паров интеркалированных веществ. Это обусловлено тем, что в ИСГ межслоевые пространства графита открыты как для интеркалирования, так и для деинтеркалирования.

С практической точки зрения для получения новых функциональных материалов более перспективным оказалось использование интеркалированных соединений окисленного графита (ИСОГ). Их получают путем внедрения в межслоевые пространства графита атомов фтора, кислорода или аминогрупп. Тем самым удается реализовать структуру, в которой атомы или функциональные группы оказываются химически связанными с атомами углерода графитовых слоев. Внедренные объекты выполняют роль перегородок, из-за чего существенно затрудняется процесс деинтеркалирования. Благодаря этому ИСОГ могут использоваться в качестве молекулярных химических контейнеров для хранения, транспортировки и дозированного выделения в окружающую среду летучих веществ; реагентов, функционирующих в качестве детоксикантов и сорбентов в экологических технологиях; исходных продуктов для получения расширенного графита (РГ) - эффективного химически и термически устойчивого сорбента низкой плотности с графитовой структурой. Целью настоящей работы является исследование наноструктурного композитного материала РГ/Fe. Выбранный объект рассматривается как модельный для описания атомной и субатомной структуры нанокомпозитов на основе расширенного графита.

Синтез образцов проводили в несколько этапов. Исходным материалом являлось интеркалированное соединение фторированного графита (матрица - фторид диуглерода C_2F , интеркалат - трифторид хлора ClF_3). Из него методом быстрого термораспада получали расширенный графит, который пропитывали водным раствором хлорида железа. Полученный раствор нагревали до температуры 100-120 С, высушивали и восстанавливали водородом при температуре 600 С. Было получено четыре образца с разным содержанием железа: 0,5-1, 25-35, 40-50, 65-75 масс. %.

На всех образцах выполнены рентгеновские и нейтронные дифракционные измерения и исследования малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов, а также изучена

зависимость поляризации прошедшего пучка нейтронов от внешнего магнитного поля.

Установлено, что композиты РГ + металл и РГ + Fe₃O₄ включают в себя несколько фаз. Основной фазой является РГ (нанокристаллические частицы с гексагональной структурой графита, пространственная группа P63/mmc). Частицы металла также имеют наноразмеры. Особенностью их структурного состояния является одновременное существование высокотемпературной и низкотемпературной фаз при 293 К, хотя соответствующий массивный образец металла содержит (при 293 К) лишь низкотемпературную фазу. В частности, образец РГ + Со содержал как низкотемпературную (гексагональную) фазу, так и высокотемпературную (кубическую) фазу кобальта. Согласно данным магнитных измерений образцы РГ + металл и РГ + Fe₃O₄ являются магнитоупорядоченными. При этом в образцах с M = Fe, Со, Ni спонтанный магнитный момент, отнесенный на M-атом, приблизительно равен моменту M-атома в случае массивного образца.

1.6 Энтропия и магнитокалорический эффект в ферро- и ферримагнетиках с магнитными фазовыми переходами первого рода

Магнитокалорический эффект (МКЭ) в магнетиках или адиабатическое изменение температуры ΔT_{AD} , которое пропорционально изменению магнитной энтропии $\Delta S_M = S_M(H) - S_M(0)$ при включении и выключении магнитного поля H, давно и хорошо известен. В последнее время МКЭ привлекает внимание в связи с применением ферромагнетиков в системах магнитного охлаждения, работающих в большом интервале температур. Особенно большие величины адиабатического изменения температуры в относительно малых магнитных полях (несколько десятков градусов в магнитном поле порядка 2 тесла) наблюдаются в ферромагнетиках с магнитными фазовыми переходами первого рода (МФППР). Величины ΔT_{AD} и ΔS_M экспериментально измерены для многих ферромагнетиков. Однако до сих пор не ясна их функциональная зависимость от магнитного поля, намагниченности и температуры Кюри T_C. Для целенаправленного поиска материалов с большим МКЭ необходимы расчеты этого эффекта в рамках той или иной модели ферромагнетика.

Целью настоящего исследования является расчет термодинамических свойств и магнитотепловых эффектов в ферромагнетиках и ферримагнетиках с МФППР. Расчет проводится на основе варианта обменно-стрикционной модели (ОСМ), предложенного в нашей лаборатории. Сравнение результатов расчета с экспериментом проводятся для ферромагнитных соединений La(Fe_xSi_{1-x})₁₃, их гидридов, а также ферримагнитных интерметаллидов со структурой RCo₂.

Получен термодинамический потенциал ОСМ ферромагнетика, позволяющий

рассчитывать магнитные, упругие и тепловые свойства ферромагнетиков с магнитными фазовыми переходами первого и второго рода. Выведено выражение для энтропии ферромагнетика как функции температуры, давления и магнитного поля.

С помощью обменно-стрикционной модели ферромагнетика объяснено происхождение МФППР в ферромагнетике $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$. Для этого ферромагнетика рассчитаны: температурная зависимость намагниченности при различном внешнем давлении, изотермы намагниченности при ряде температур и зависимость объемной магнитострикции от внешнего магнитного поля. Проведен расчет температурной зависимости изменения энтропии при включении и выключении магнитного поля (МКЭ) и при приложении и снятии внешнего давления (барокалорический эффект). Показано, что результаты расчета удовлетворительно количественно согласуются с экспериментом.

1.7 Энергетический анализ малоуглового рассеяния нейтронов и изучение коэффициента термического линейного расширения в $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррите

Проведено исследование длинноволновых низко-энергетических магнитных возбуждений в магнетиках с конкурирующим обменным взаимодействием.

Синтез $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррита был выполнен по стандартным технологическим режимам в НИИ ДОМЕН (г. Санкт-Петербург). При аттестации образца (рентгеновским и нейтронографическим методами) была установлена его однофазность и соответствие параметров кристаллической решетки (постоянной решетки, распределения катионов по неэквивалентным позициям) литературным данным.

В $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррите проведен энергетический анализ малоуглового рассеяния нейтронов при различных температурах и волновых векторах. Выполнены измерения коэффициента теплового расширения в температурном интервале (80 - 600) К.

Обнаружено, что в $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррите (как и в инварных сплавах переходных металлов на основе железа) из-за конкурирующего обменного взаимодействия увеличена плотность состояний внутри-границных w - и локализованных вблизи доменных границ pw - магнитных возбуждений. Это оказывает влияние на поведение спонтанной намагниченности в обоих типах магнитных материалов, но не определяет величину и знак магнитообъемного эффекта.

1.8 Изучение поведения магнитных свойств под давлением в кобальтовых перовскитах $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ ($\text{R}=\text{Y}, \text{Pr}, \text{Ho}$)

Данные соединения представляют собой слоистые перовскиты. Структурно ситуация напоминает бесконечнослоевые соединения. Необычные свойства этих систем связаны с

явлениями, разыгрывающимися в CoO_2 -плоскостях, разделенных промежуточными слоями, играющими роль доноров носителей заряда. Управлять этими процессами можно, с одной стороны, изменяя концентрацию кислорода в системе (в промежуточных, донорских слоях), а с другой - пытаться при фиксированном составе соединения воздействовать на него высокими давлениями или высокими магнитными полями. Перовскиты на основе кобальта при понижении температуры испытывают ряд последовательных магнитных фазовых переходов, а также переход металл-изолятор (ПМИ), проявляют эффект гигантского магнетосопротивления, а при повышенных температурах кобальтиты отличаются высокой ионной проводимостью. В соединениях $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.5}$, в принципе, должны наблюдаться переходы $\text{PM} \rightarrow \text{FMt} \rightarrow \text{AFM}$ в интервале температур 160 К - 280 К, а также какие-то загадочные метастабильные состояния в районе 4 К. Особенность кобальтитов состоит в том, что в них разница энергий кристаллического поля на d-электронах Co и внутриатомного обменного взаимодействия настолько мала (при том, что сами эти энергии порядка 2-3 эВ, разница между ними не превышает нескольких десятков мэВ), что Co может сравнительно легко переходить из низкоспинового состояния в высокоспиновое и наоборот. Иначе говоря, в кобальтитах присутствует дополнительная спиновая степень свободы, которой нет, например, в купратах и манганитах. Внешнее давление изменяет длины связей и углы между связями в кристалле, а это приводит к изменению спинового состояния ионов Co. В рамках проекта предполагается построение фазовой диаграммы в координатах температура-давление-магнитное поле для слоистых перовскитов с химической формулой $\text{R}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.5}$, исследование природы слабого ферромагнетизма, метамагнитного поведения и индуцированного внешним магнитным полем АФМ/ФМ фазового перехода.

Синтезированы и аттестованы образцы с $\text{R} = \text{Y}, \text{Pr}, \text{Ho}$. Состав по кислороду определен с точностью $x=5.5$ (плюс-минус 0.02). Структурно образцы являются однофазными поликристаллами.

С использованием SQUID-магнетометра выполнены исследования магнитных свойств этих соединений при $P=0$ в интервале температур 2-300 К. Проведены уникальные исследования поведения магнитных свойств соединения $\text{Y}\text{BaCo}_2\text{O}_{5.5}$ в импульсных магнитных полях до 35 Т в широком интервале температур 4.2-2800 К. При этом кривые намагниченности измерялись при двух амплитудах намагничивающего поля -7 Т и 35 Т.

Измерения магнитных свойств, проведенные на SQUID'e в отсутствие внешнего давления, в общем, подтвердили имеющиеся по этим системам литературные данные. Изучение петель гистерезиса, полученных при разных температурах в магнитном импульсном поле с амплитудой 7 Т показало, что в интервале температур 4.2-220 К

соединение $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ демонстрирует слабое ферромагнитное поведение со спонтанным моментом Co порядка $0.03 \mu_B$. Столь малый магнитный момент, вероятно, связан с формированием нескомпенсированной скошенной (canted) антиферромагнитной структуры. В этом соединении, где появление магнитного упорядочения типа Дзялошинского-Мория запрещено симметрией решетки, неколлинеарная магнитная структура может возникнуть, например, благодаря спиновому обменному взаимодействию высокого порядка [E.L. Nagaev, Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. Москва, Наука, 1988, 231 с.]. Начиная с 230 К, на кривых намагниченности начинает проявляться индуцированный полем переход первого рода. Одновременно исчезает слабый ферромагнетизм. Индуцированный полем магнитный момент оказывается существенно выше, чем в низкотемпературном состоянии, оставаясь, впрочем, довольно низким. Вероятно, индуцированное полем состояние является ферримагнетиком. Критическое поле для этого перехода падает с ростом температуры и при 275 К ферримагнитное состояние стабилизируется. Температурные зависимости намагниченности при разных магнитных полях, полученные из этих измерений, показывают, что слабый ферромагнетизм стабилен в широком интервале температур. При этом температурная зависимость величины слабого ферромагнитного момента оказывается весьма сложной и не может быть описана функцией Бриллюэна. Следовательно, она не может быть приписана отдельной магнитной фазе с температурой Кюри порядка 250 К. Исчезновение слабого ферромагнетизма выше 250 К, вероятно, связано с магнитным фазовым переходом в антиферромагнитной подсистеме. Антиферромагнитное состояние между 250 и 270 К оказывается очень близким к спонтанному переходу антиферромагнетика в ферримагнетик. Эта трансформация относительно легко выполняется наложением магнитного поля. Кривые намагниченности, полученные с использованием амплитуды импульсного магнитного поля 35 Т позволили сделать заключение, что, по крайней мере, часть ионов Co в соединении $\text{YBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ находится в низкоспиновом состоянии. Это вывод согласуется с данными ЯМР экспериментов [M. Itoh et al., Physica B 329-333 (2003) 751]. Начиная с 175 К, магнитное поле в 35 Т оказывается достаточным, чтобы индуцировать метамагнитный переход. Индуцированный магнитный момент растет с ростом температуры, достигая $0.4 \mu_B/\text{Co}$ при 35 Т. Неожиданно этот переход сопровождается очень широким гистерезисом. На данной стадии неясно, связан ли переход с поворотом спина или же с временным индуцированием высокоспинового состояния на позициях Co . На этот вопрос, возможно удастся ответить в ходе планируемых измерений на монокристалле. При 220 К была также обнаружена значительная асимметрия петли гистерезиса, природа которой остается

пока не вполне понятной.

1.9 Изучение магнитной структуры сплавов квазибинарной системы FeSn₂ - MnSn₂

Все сплавы квазибинарной системы MnSn₂ - FeSn₂ обладают кристаллической структурой, описываемой пространственной группой D_{4h}¹⁸ (I4/mcm) (элементарная кристаллическая ячейка является объемноцентрированной тетрагональной). Магнитная структура MnSn₂ в интервале температур 0 < T < 80 К описывается звездой волнового вектора $k_7 = \mu b_3 = 2/(\pi a) (\mu, \mu, 0)$, где $\mu = 1/4$, с магнитными моментами, перпендикулярными плоскости (110), взаимную ориентацию которых в последовательности этих плоскостей можно охарактеризовать последовательностью арифметических знаков +, +, -, -, причем в каждой плоскости (110) все магнитные моменты параллельны между собой. В интервале температур 80 < T < 320 К магнитная структура MnSn₂ характеризуется звездой волнового вектора $k_{13} = b_3/2 = 2/(\pi a)(1/2, 1/2, 0)$ с магнитными моментами, расположенными так же, как и при T < 80 К, но их взаимная ориентация описывается последовательностью знаков +, -, +, -. Кроме того, в этой структуре величина магнитного момента атома Mn модулирована с периодом $\lambda = 31 \text{ \AA}$ в плоскости (110), что соответствует лучу $2/(\pi a)(\mu, -\mu, 0)$ звезды k_7 с $\mu = 0,152$, с амплитудой 0,5 μ_B . Магнитная структура FeSn₂ в интервале температур 0 < T < 390 К характеризуется звездой волнового вектора $k_6 = 2/(\pi a)(2\mu, 0, 0)$ с $\mu = 0,5$. При T ~ 100 К по имеющимся данным в FeSn₂ происходит спин-переориентационный переход. Предполагается, что магнитную структуру FeSn₂ можно описать с использованием звезды волнового вектора $k_{15} = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)/2 = 2\pi (0, 0, 1)/a_3$. Последнее утверждение требует проверки. Работа выполняется с целью уточнения магнитной структуры сплавов в области перехода при постепенном замещении атомов Mn в MnSn₂ атомами Fe.

Для каждой из перечисленных звезд волновых векторов сосчитаны базисные функции неприводимых представлений, т. е. проведен симметричный анализ магнитных структур сплавов квазибинарной системы MnSn₂-FeSn₂.

1.10 Трансформация кристаллической, электронной и фононной структуры GaAs, Ge, Si, Fe₃O₄ в области фазовых переходов под давлением до 30 Гпа

Фазовые переходы под действием высокого давления в системах Si, Ge, GaAs, Fe₃O₄ до сих пор не являются полностью изученными. В работе исследовалось влияние примесей и дефектов на переход полупроводник-металл в германии и кремнии, влияние примесей и отжига на образование промежуточных полупроводниковых и полуметаллических фаз высокого давления в арсениде галлия, и на сдвиг давления фазового перехода в магнетите

Fe_3O_4 при комнатных температурах.

Монокристаллические образцы кремния, выращенные методом Чохральского, предоставлены Институтом полупроводников СО РАН и Институтом электронной технологии ПАН (Варшава) и там же аттестованы стандартными методами. Монокристаллические образцы остальных материалов получены в Гиредмете, Институте электронной технологии ПАН (Варшава), Институте физики твердого тела (Университет Токио) и аттестованы производителями. Исследованы барические зависимости термоэдс и электросопротивления у всех указанных материалов в диапазоне давлений до 25 ГПа при комнатной температуре. В зависимости от содержания примесей и дефектов, полученных легированием или облучением высокоэнергетическими частицами (протонами), наблюдалось изменение характера барических зависимостей электросопротивления и термоэдс (например, изменение знака термоэдс), а также сдвиг давлений электронных и структурных фазовых переходов при высоком давлении. У некоторых образцов исследовано изменение спектров комбинационного рассеяния света в зависимости от содержания примесей и введенных дефектов.

1.11. Кристаллографические особенности твердых электролитов $\text{K}(\text{Al}/\text{Fe})\text{O}_2$ и $(\text{K}/\text{Rb}/\text{Cs})_3\text{PO}_4$ в суперионном состоянии

На основании полученных экспериментальных данных по влиянию температуры на кристаллическую структуру, физические свойства синтезированных ортофосфатов калия, рубидия и цезия установлено:

- экспериментальные и теоретические (расчётные) межатомные расстояния в октаэдрах практически совпадают для соединений K_3PO_4 и Rb_3PO_4 , а для Cs_3PO_4 экспериментальное значение на 1.5% выше;
- экспериментальные расстояния для цепочечных атомов Me1 (K, Rb, Cs; координационное число = 8) превышают теоретические, свидетельствуя об ослаблении химической связи в этих узлах. Отклонение возрастает с увеличением размера щелочного металла. Такие изменения указывают на то, что, с одной стороны, проводимость наиболее вероятна по катионам Me1 , находящимся в цепочках. С другой стороны, следует ожидать возрастания величины проводимости с ростом размера катионов Me^+ ($\text{K}_3\text{PO}_4 \Rightarrow \text{Rb}_3\text{PO}_4 \Rightarrow \text{Cs}_3\text{PO}_4$). Поскольку в Cs_3PO_4 связь Cs – O ослаблена и в узлах Cs2, эти ионы также могут участвовать в переносе заряда, и следует ожидать большего возрастания проводимости при переходе от $\text{Rb}_3\text{PO}_4 \Rightarrow \text{Cs}_3\text{PO}_4$, чем от $\text{K}_3\text{PO}_4 \Rightarrow \text{Rb}_3\text{PO}_4$. При этом энергия активации должна понижаться. Эти выводы согласуются с результатами измерения проводимости данных соединений, полученными в работе;

- при температуре порядка 540°C обнаружен структурный переход в кубическую структуру. При этом тетраэдры PO_4 , оставаясь жестким образованием, формируют ГЦК решетку, в которой тетра и окта - поры заполняют ионы щелочных металлов. Температура этого перехода совпадает с температурой скачка в проводимости;

- при этом структурном переходе тепловой фактор атомов калия скачком возрастает до величины ~ 8 , т.е. решетка атомов калия «плавится». На это указывает также поведение фона на нейтронограммах: при переходе возникают большие диффузные гало, характерные для жидких или аморфных материалов; тетраэдры PO_4 при этом вращаются.

Таким образом, возникновение суперионного состояния в исследованных соединениях сопровождается плавлением подрешетки щелочного металла, которое само по себе ведет к росту проводимости; тетраэдры PO_4 непрерывно вращаются, а при прохождении тока их вращение коррелирует с движением катионов щелочного металла, увеличивая величину проводимости (так называемый “paddle-wheel” механизм).

1.12. Разработка нейтронографических методов изучения внутренних напряжений в материалах

Для изучения внутренних напряжений в материалах с помощью нейтронографии необходимо, с одной стороны, обеспечить высокое разрешение используемых нейтронных дифрактометров, а с другой – разработать средства теоретического анализа экспериментальных результатов.

Проведены теоретические исследования проблем разрешения нейтронных дифрактометров, более глубоко учитывающие, в отличие от стандартных подходов, пространственные эффекты при распространении нейтронных пучков. Разработана математически корректная процедура получения функций разрешения нейтронных дифрактометров, применимая для описания приборов с фокусирующими монохроматорами и позволяющая учитывать неоднородности распределения характеристик нейтронных потоков в приборе по поперечному сечению. С использованием этих методов исследован вопрос о границах применимости обычно используемых приближений для дифрактометров с плоскими монохроматорами. Исследована проблема искажений формы линии брэгговских пиков, обусловленных конечными вертикальными размерами детекторов, а также способы уменьшения этих искажений, что может явиться критически важным в случае исследования внутренних напряжений в материалах.

2 Закупка оборудования

В соответствии с Техническим заданием и Календарным планом с ООО «Криомагнитные системы» - победителем ранее объявленного конкурса – заключён Госконтракт № 29-ГК/07 от « 15 » августа 2007 г. на поставку автономного криорефрижератора на импульсных трубках. В 2007 году поставлен двухступенчатый гелиевый криорефрижератор замкнутого цикла на импульсных трубках (SRP-082B-F70H производства компании «Sumitomo») в комплектации:

- Холодная голова, ориентация вертикальная	1 шт.,
- Компрессор	1 шт.,
- Соединительные шланги (20 метров), кабель питания	1 компл.,
- Термодатчики	4 шт.,
- Инструменты для подключения	1 компл.,
- Сертификат (протокол испытаний)	1 экз.
- Техническое описание на русском языке	2 экз.

Характеристики поставляемого оборудования и комплектующих элементов:

Криорефрижератор

- Холодопроизводительность 2-й ступени – не менее 1Вт при 4.2К;
- Минимальная температура 2-ой ступени – менее 3К*;
- Время захлаживания до 4,2 К – не более 70 мин.;
- Геометрия холодной головы - концентрическая;
- Ресурс – 30 000 часов;
- В криорефрижераторе должна быть предусмотрена возможность стыковки с сухим гелиевым криостатом шахтного типа (SHI-950T «Sumitomo» или аналогом) с держателем образца и нагревателем, охлаждение образца через теплообменный газ с загрузкой образца в криостат сверху.

Компрессор

Тип компрессора – F 70H, комнатное исполнение, водоохлаждаемый, питание – трехфазное, 50Гц 380В, максимальный рабочий ток 20 А, длина питающего кабеля 20А x 20 метров;

- Замена адсорбера – 30 000 часов.

Термодатчики

- Терморезисторы - ТВО (910 Ом).
- Калибровка в диапазоне 1.8-300К – не менее 30 точек, вместе с датчиком поставляется таблица расчетных значений в соответствии с подгоночной кривой с шагом 0.1К;

3 Сведения об услугах коллективного пользования

В 2007 году на пяти экспериментальных установках атомного реактора ИВВ-2М, доступных для внешних пользователей, оказываются услуги в проведении нейтронных исследований кристаллических и магнитных структур, фазовых переходов и возбуждений в металлах, сплавах и соединениях, в том числе, облученных быстрыми нейтронами.

Общее количество эксплуатационных дней реактора - 250 суток, в том числе:

внутреннее использование:	200 экспериментов/20000 часов,
национальное использование:	120 экспериментов/12000 часов,
международное использование:	40 экспериментов/4000 часов.

В среднем время на установках распределяется следующим образом (%):

долгосрочные проекты:	75%,
индивидуальные эксперименты:	20%,
срочные эксперименты:	5%.

Услуги коллективного пользования регулярно предоставляются следующим организациям УрО РАН в рамках Соглашений, заключенных с ними:

- Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург,
- Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург,
- Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург.

В 2007 году услугами Нейтронного материаловедческого комплекса пользовались следующие организации:

- Уральский государственный университет
- Петербургский институт ядерной физики РАН
- Объединенный Институт Ядерных Исследований
- Институт химии твердого тела УрО РАН
- Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
- Институт реакторных материалов Росатома
- Институт неорганической химии СО РАН
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
- Институт физики металлов УрО РАН
- РФЯЦ-Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики

В целях расширения сотрудничества к реализации работ привлекаются партнеры как в России, так и за рубежом.

4 Программа и концепция развития УСУ до 2010 года

4.1 Концепция развития УСУ

Развитие высокотехнологичных секторов экономики в современном мире невозможно без широкого внедрения нанотехнологий и наноматериалов, представляющих новейшее направление в современной науке и технике. Методы рассеяния нейтронов позволяют получать наиболее детальную информацию о свойствах наносистем и материалов на микроскопическом уровне. Главной целью является установление взаимосвязи между структурой объектов на атомном уровне и их физическими и технологическими свойствами.

В современной промышленности и технике широко применяются новые материалы, способные обеспечить работу изделий в разнообразных, зачастую экстремальных условиях, продлить ресурс их работы, или сделать более технологичным их производство. Отличительной особенностью многих из этих материалов является их многокомпонентный характер. В связи с этим остро стоит проблема исследования поведения многокомпонентных систем, причем не только на макро-, но и на микроуровне, т.е. требуется получение данных о поведении зерен, слагающих данные материалы, о процессах, развивающихся на их границах. Очень важно иметь возможности исследовать поведение материалов непосредственно в процессе приложения к ним различных воздействий и нагрузок, а также иметь устройства, обеспечивающие неразрушающий контроль готовых изделий. Чрезвычайно важной является надежная информация о локальных напряжениях, возникающих в облучаемых материалах при введении радиационных дефектов атомного масштаба и определяющих основные процессы структурно-фазовых превращений.

Именно, методы, основанные на дифракции нейтронов, дают уникальную надежную объемную информацию о природе образования и растворения фаз под воздействием облучения. В России исследования внутренних напряжений с помощью нейтронографии ведутся лишь на фурье-дифрактометрах в ОИЯИ и ПИЯФ, которые не могут полностью удовлетворить имеющуюся острую потребность в их дальнейшем развитии, что весьма актуально для материаловедения и развития новых технологий. Исследования внутренних напряжений, возникающих в конструкционных материалах в результате радиационного воздействия, в настоящее время не проводятся в связи с отсутствием специализированных приборов.

4.2 Создание специализированного дифрактометра для исследования наноматериалов

Для исследования нанокристаллических структур с помощью нейтронов на атомном реакторе ИВВ-2М в 2007-2010 годы предполагается создать специализированный спектрометр, который должен иметь ряд особенностей, отличающих его от обычных нейтронных дифрактометров для кристаллических образцов. Эти особенности, в некоторой степени, взаимоисключающие. Например, данные о субструктуре наноматериалов могут быть получены только из рассеяния в области малых переданных импульсов, что достигается применением большой длины волны падающих нейтронов. Напротив, для структурных аспектов необходимы измерения в широком интервале значений переданных импульсов, что требует использования нейтронов с короткой длиной волны. Для реализации этого проекта в ближайшее будущее предполагается разработать соответствующий технический проект.

Нейтронный дифрактометр предполагается разместить на горизонтальном экспериментальном канале ГЭК-5 реактора ИВВ-2М. Пучок нейтронов из реактора проходит через нейтронород (длиной 3 м) и попадает на первый кристалл-монокроматор, позволяющий получить монохроматические (используется фильтр с $L = 50$ мм) нейтроны с длиной волны 2.44 ангстрема. Первый пучок будет сфокусирован кристаллами пирографита с вертикальной фокусировкой. Второй пучок формируется другим кристаллом – кристаллом германия с отражающей плоскостью (531). Оба пучка пересекаются в одной точке, там, где находится исследуемый образец. Минимальное значение переданного импульса q будет не ниже 0.1, что вполне достаточно, чтобы иметь общую область перекрытия значений q , достижимых на нашей специализированной установке малоуглового рассеяния нейтронов Д-6.

Система регистрации нейтронов состоит из восьми позиционно-чувствительных однокоординатных детекторов. При пространственном разрешении детекторов не хуже 2 мм будет достигнуто угловое разрешение около 7-8 минут.

Конструкция установки (гониометра) позволяет осуществлять поворот системы детекторов на угол приблизительно в 270 градусов, что чрезвычайно важно при переходе с одной длины волны падающих нейтронов на другую.

Примерная стоимость требуемого оборудования

1. Монокроматор с кристаллами пирографита – 2000 тыс. руб.
2. Монокроматор с кремнием – 500 тыс. руб.
3. Гониометр (корпус, опорная плита, стрела, защита детекторов, посадочные конуса

для датчиков угла, электроника, программное обеспечение) – 5000 тыс. руб.

4. Позиционно-чувствительные детекторы (восемь комплектов, программное обеспечение) - 5500 тыс. руб.
5. Итого – 13000 тыс. руб.

4.3 Модернизация существующего оборудования и приобретение нового оборудования

С целью обеспечения мероприятий по оснащению данной уникальной установки современным прецизионным научным оборудованием и специализированными системами и существенного расширения возможностей проводимых в настоящее время нейтронных исследований конденсированного состояния различных веществ необходимо в 2008 году приобрести сухой гелиевый криостат шахтного типа (SHI-950T «Sumitomo» или аналог) с держателем образца, нагревателем (охлаждение образца через теплообменный газ с загрузкой образца в криостат сверху), терморегулятором (Model 9700 «Scientific Instruments» или аналогом) и откачным стендом с турбонасосом (TSH 261/VVP 055-3, 230V, фирма «Pfeiffer Vacuum» или аналогом).

В последующие годы предполагается приобрести автоматический рентгеновский дифрактометр общего назначения ДРОН-7, производства НПП «Буревестник», Россия. Рентгеновский дифрактометр предназначен для решения широкого круга аналитических, технологических и научно-исследовательских задач материаловедения – одной из центральных тем исследования на УСУ «Атомный реактор ИВВ-2М, рег. № 01-34 (Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ УрО РАН).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Краткие выводы

Выполнены все предусмотренные Техническим заданием и Календарным планом работы в рамках НИР по теме: «Нейтронные исследования особенностей структуры наноматериалов, кристаллических материалов со специальными свойствами (в том числе, конструкционных материалов для атомной энергетики в исходном состоянии и облученных в процессе эксплуатации), композиционных и керамических материалов на исследовательском водо-водяном атомном реакторе ИВВ-2М (Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ УрО РАН)» шифр «2007-7-1.8-00-03-005», выполняемой в рамках федеральной целевой научно-технической программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы», является решение Конкурсной комиссии Роснауки № 10 (протокол от «30» марта 2007г. № 7), на основании которого заключен государственный контракт от «19» апреля 2007 г. № 02.518.11.7026.

Синтезирован необходимый для запланированных исследований набор образцов. Проведены облучения образцов флюенсами быстрых нейтронов $\Phi \sim (10^{17}-10^{20}) \text{ см}^{-2}$. Исследованы структурные, магнитные и электронные свойства синтезированных образцов.

Закуплен двухступенчатый гелиевый криорефрижератор замкнутого цикла на импульсных трубках (SRP-082B-F70H производства компании «Sumitomo») в комплектации:

- Холодная голова, ориентация вертикальная	1 шт.,
- Компрессор	1 шт.,
- Соединительные шланги (20 метров), кабель питания	1 компл.,
- Термодатчики	4 шт.,
- Инструменты для подключения	1 компл.,
- Сертификат (протокол испытаний)	1 экз.
- Техническое описание на русском языке	2 экз.

Разработана программа и концепция развития УСУ до 2010 года.

Краткие результаты исследования структурных, магнитных и электронных свойств синтезированных образцов:

1. Установлено, что физические свойства синтезированных образцов LiMn_2O_4 соответствуют литературным данным - наблюдаются электронное упорядочение и соответствующий структурный переход, дальний антиферромагнитный порядок в области низких температур. На основе дифракционных данных при комнатной

- температуре установлено, что облучение приводит к реализации следующего распределения катионов - $Mn_{0.33}Li_{0.67}[Mn_{1.67}Li_{0.33}]$, т.е. происходит частичное структурное разупорядочение. Признаков зарядового упорядочения в таком структурном состоянии не обнаружено.
2. Исследовано влияние радиационных дефектов, образованных облучением быстрыми нейтронами и последующими изохронными отжигами, на свойства серии сплавов Pb-Sn-Se с целью выявления общих закономерностей изменения свойств при замещении. После облучения наблюдались изменения температурных зависимостей константы Холла и удельного сопротивления, в том числе, переходы металл-полупроводник и изменение доминирующего типа носителей заряда. При отжиге исходные свойства почти полностью восстанавливались. Исследовано поведение указанных эффектов облучения и отжига при изменении химического состава монокристаллов.
 3. Установлено, что концентрационная зависимость намагниченности редкоземельной подрешетки в соединениях $Nd_{1-x}Tb_xCo_2$ имеет отчетливо выраженную аномалию при $x=0.3$, при этой концентрации намагниченность редкоземельных ионов равна нулю. Однако намагниченность кобальтовой подрешетки не исчезает при этой концентрации, а сохраняет свой линейный рост при увеличении содержания тербиевых ионов.
 4. В соединениях $ErFe_2H_{3.1}$ и $ErFe_2D_{3.1}$ при 270 К обнаружен структурный переход из ромбоэдрической структуры (пр. гр. R-3m) в кубическую (Fd3m). Установлены координаты и коэффициенты заполнения атомов водорода в кубической фазе. Определены температурные зависимости намагниченностей эрбиевой и железной подрешеток. Обнаружено, что магнитный порядок в Er-подрешетке разрушается при 300 К, тогда как в Fe-подрешетке - при 450 К.
 5. Установлено, что композиты «расширенный графит + металл» и «расширенный графит+ Fe_3O_4 » включают в себя несколько фаз. Основной фазой является PГ (нанокристаллические частицы с гексагональной структурой графита, пространственная группа P63/mmc). Частицы металла также имеют наноразмеры. Особенностью их структурного состояния является одновременное существование высокотемпературной и низкотемпературной фаз при 293 К, хотя соответствующий массивный образец металла содержит (при 293 К) лишь низкотемпературную фазу. Согласно данным магнитных измерений образцы «расширенный графит + металл» и «расширенный графит+ Fe_3O_4 » являются магнитоупорядоченными. При этом в образцах с $M = Fe, Co, Ni$ спонтанный

- магнитный момент, отнесенный на М-атом, приблизительно равен моменту М-атома в случае массивного образца.
6. Проведен расчет температурной зависимости изменения энтропии при включении и выключении магнитного поля (магнитокалорический эффект) и при приложении и снятии внешнего давления (барокалорический эффект). Показано, что результаты расчета удовлетворительно количественно согласуются с экспериментом.
 7. Обнаружено, что в $Zn_{0.55}Mn_{0.45}Fe_2O_4$ феррите (как и в инварных сплавах переходных металлов на основе железа) из-за конкурирующего обменного взаимодействия увеличена плотность состояний внутри-границных и локализованных вблизи доменных границ магнитных возбуждений.
 8. Кривые намагниченности, полученные с использованием амплитуды импульсного магнитного поля 35 Т позволили сделать заключение, что, по крайней мере, часть ионов Со в соединении $YBaCo_2O_{5.5}$ находится в низкоспиновом состоянии.
 9. Уточнена магнитная структура сплавов $MnSn_2 - FeSn_2$ в области спин-ориентационного перехода при постепенном замещении атомов Мп в $MnSn_2$ атомами Fe.
 10. Установлено, что в GaAs, Ge, Si, Fe_3O_4 в зависимости от содержания примесей и дефектов, полученных легированием или облучением высокоэнергетическими частицами (протонами), характер барических зависимостей электросопротивления и термоэдс меняется (например, изменение знака термоэдс). Исследовано изменение спектров комбинационного рассеяния света в зависимости от содержания примесей и введенных дефектов.
 11. Разработана математически корректная процедура получения функций разрешения нейтронных дифрактометров, применимая для описания приборов с фокусирующими монохроматорами и позволяющая учитывать неоднородности распределения характеристик нейтронных потоков в приборе по поперечному сечению.
 12. Показано, что проводимость в низкотемпературных фазах твердых электролитов $K(Al/Fe)O_2$ и $(K/Rb/Cs)_3PO_4$ носит преимущественно одномерный характер, связанный с существованием каналов проводимости вдоль выделенных направлений. При высокой температуре во всех соединениях существует структурный переход, температура которого совпадает с температурой скачка проводимости. Этот скачок, во первых, связан с образованием каналов проводимости вдоль трех кристаллографических осей (трехмерный характер), во вторых, в $K(Al/Fe)O_4$ с коррелированным движением ионов калия с колебаниями

тетраэдров, а в соединениях $(\text{K/Rb/Cs})_3\text{PO}_4$ с коррелированным движением ионов K/Rb/Cs с вращением пространственно разделенных тетраэдров PO_4 . Эти процессы сопровождаются «плавлением» подрешетки щелочных металлов. Выявленные при высокой температуре в изученных соединениях структурные превращения способствуют возникновению суперионного состояния.

Научная значимость работы

Полученные результаты вносят вклад в понимание таких актуальных проблем физики твердого тела, как особенности формирования магнитных структур в соединениях переходных металлов, а также способствуют появлению новых физических идей для построения фундаментальной теории сильнокоррелированных систем. Результаты, полученные при изучении радиационных эффектов в модельных сплавах, в рабочих и кандидатных материалах для ядерной энергетики являются важными для разработки новых радиационно-стойких конструкционных материалов для новой техники и повышения безопасности эксплуатации существующей.

Практическая значимость работы

Результаты, полученные при изучении радиационных эффектов в упорядоченных модельных сплавах и соединениях переходных металлов являются важными для разработки новых радиационно-стойких конструкционных материалов для ядерной энергетики. Изучавшиеся материалы с гигантским магнитосопротивлением рассматриваются как перспективные для создания датчиков и элементов запоминающих устройств для ЭВМ. Изучение особенностей строения твердых электролитов важно для создания новых источников энергии.

Предполагаемое использование результатов НИР

- Использование новых научных данных для последующей интерпретации природы и сущности физики магнитных явлений в соединениях редкоземельных и переходных металлов.
- Использование новых научных данных для определения возможных физических механизмов формирования экстремальных свойств материалов.
- Использование радиационного облучения для модификации свойств материалов (направленное изменение магнитных, электрических и прочностных свойств).
- Использование нейтронографических данных для улучшения эксплуатационных свойств функциональных материалов, применяемых в практике (в частности, для

ядерной и термоядерной энергетики)

Апробация работы

По результатам исследований опубликованы – 25 статей, сделано 30 докладов на конференциях.

Список публикаций

Статьи:

1. С. Ф. Дубинин, В. Е. Архипов, Ю. Г. Чукалкин, С. Г. Теплоухов, В. Д. Пархоменко, Я. М. Муковский. Магнитная структура и транспортные свойства атомно-разупорядоченного кристалла двумерного манганита $\text{La}_{2-2x}\text{Sr}_{1+2x}\text{Mn}_2\text{O}_7$ // ФТТ, 2007, том 49, в. 2, с. 297-303.
2. С. Ф. Дубинин, С. Г. Теплоухов, В. Е. Архипов, В. Д. Пархоменко, Э. А. Нейфельд, А. В. Королев, Н. А. Угрюмова, Я. М. Муковский. Зарядовое упорядочение в кристаллах ферромагнитных манганитов $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x=0.22, 0.24$)// ФТТ, 2007, том 49, в. 4, с.704-710.
3. С. Ф. Дубинин, В. И. Соколов, С. Г. Теплоухов, В. Д. Пархоменко, В. В. Гудков, А. Т. Лончаков, И. В. Жестовских, Н. Б. Груздев. Наноразмерные деформации решетки в кристалле ZnSe , легированном 3d-элементами// ФТТ, 2007, том 49, в. 7, с. 1177-1182.
4. Е. А. Шерстобитова, А. Ф. Губкин, А. В. Захаров, А. Е. Теплых, А. А. Подлесняк, С. Н. Гвасалия, Д.-Г. Парк, Н. В. Баранов, А. Н. Пирогов. Нейтроннографическое исследование метамагнитного перехода в $\text{Tb}_{0.1}\text{Tm}_{0.9}\text{Co}_2$ // ФТТ, 2007, том 49, в. 7, с. 1246-1250.
5. А. П. Вохмянин, Ю. А. Дорофеев, А. И. Курбаков, А. Н. Пирогов, Ю. Н. Скрыбин. Магнитная структура Er_5Si_3 при $T < 20$ К// Кристаллография, 2007, том 52, в. 3, с. 454-457.
6. Е. А. Шерстобитова, К. А. Козлов, А. Е. Теплых, Ю. А. Дорофеев, Ю. Н. Скрыбин, А. Н. Пирогов. Зонный метамагнитный переход в соединениях $\text{Tb}_x\text{Nd}_{1-x}\text{Co}_2$ // Кристаллография, 2007, том 52, в. 3, с. 458-461.
7. В. Г. Кулеев, Т. П. Царькова, А. П. Ничипурук, В. И. Воронин, И. Ф. Бергер. Исследование причин существенных различий величин коэрцитивной силы, остаточной намагниченности и начальной магнитной проницаемости ферромагнитных сталей в нагруженном и разгруженном состояниях при их пластическом растяжении// ФММ, 2007, том 103, в. 2, с. 136-146.
8. Э. З. Валиев. Энтропия и магнитокалорический эффект в ферромагнетиках и антиферромагнетиках// ФММ, 2007, том 104, в. 1, с. 12-16.
9. Ю. Г. Чукалкин, А. Е. Теплых. Эффекты структурного разупорядочения в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Ba}_{0.175}\text{MnO}_3$ // ФММ, 2007, том 104, в. 1, с. 105-112.
10. В. И. Соколов, А. Т. Лончаков, С. М. Подгорных, С. Ф. Дубинин, С. Г. Теплоухов, В. Д. Пархоменко, Н. Б. Груздев. Эффект Яна-Теллера и сдвиговые деформации решетки в твердых растворах $\text{Zn}_{1-x}\text{M}_x\text{Se}$ // ФНТ, 2007, том 33, No 2/3, с. 276-281.
11. A. V. Skripov, A. L. Buzlukov, A. V. Soloninin, V. I. Voronin, I. F. Berger, T. J. Udovic, Q. Huang, J. J. Rush. Hydrogen motion and site occupation in $\text{Ti}_2\text{CoH}_x(\text{D}_x)$: NMR and neutron scattering studies// Physica B 392, 2007, pp. 353-360.
12. V.A. Cherepanov, L.Ya. Gavrilova, T.V. Aksenova, M.V. Ananyev, E. Bucher, G. Caraman, W. Sitte, V.I. Voronin. Synthesis, structure and oxygen nonstoichiometry of $\text{La}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_{3-\delta}$ // Progress in Solid State Chemistry (2007),
13. Д. П. Козленко, С. В. Овсянников, В. В. Щенников, В. И. Воронин, Б. Н. Савенко. Термоэлектрические свойства манганита $\text{La}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}\text{MnO}_3$ при сверхвысоких давлениях до 20 ГПа// Письма в ЖЭТФ, 2007, том 85, с. 242-246
14. D. P. Kozlenko, L. S. Dubrovinsky, I. N. Goncharenko, B. N. Savenko, V. I. Voronin, E. A. Kiselev, N. V. Proskurnina. Pressure-induced monoclinic distortion and charge and orbital ordering in $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ //Phys. Rev. B, 2007, v. 75, 104408.
15. Е. А. Киселев, Н. В. Проскурнина, В. И. Воронин, В. А. Черепанов. Фазовые равновесия и кристаллическая структура фаз в системе La-Fe-Ni-O при 1370 К на воздухе// Неорганические материалы, 2007, том 43, в. 2, с. 209-217.

16. N. V. Baranov, A. F. Gubkin, A. P. Vokhmyanin, A. N. Pirogov, A. Podlesnyak, L. Keller, N. V. Mushnikov, M. I. Bartashevich. High-field magnetization and magnetic structure of Tb_3Co // J. Phys.: Condens. Matter, 2007, v. 19, 326213 (14 pp).
17. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующими монохроматорами. I. Общие формулы// Поверхность, 2007, No 7, с. 72-78.
18. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующим монохроматором. II. Вертикальная фокусировка// Поверхность, 2007, No 8, с. 42-49.
19. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующим монохроматором. III. Горизонтальная фокусировка// Поверхность, 2007, No 12, с. 5-12.
20. K. Conder, A. Podlesnyak, E. Pomjakushina, V. Pomjakushin, M. Stingaciu, A.E. Karkin. Transport properties and oxygen isotope effect in layered cobaltites $Rb_aCo_2O_{5-x}$ // JMMM, 2007, v. 310, pp. 907-909.
21. A. Podlesnyak, A. Karkin, K. Conder, E. Pomjakushina, M. Stingaciu, P. Allenspach. Magnetic and electric transport properties of $TbBaCo_2O_{5.5}$ single crystal// JMMM, 2007, v. 316, pp.710-712.
22. A. Karkin, Yu. Akshentsev, B. Goshchitskii. Insulator-to-metal transition in SmB_6 induced by neutron irradiation// Physica C 460-462, 2007, pp. 811-812
23. B. Goshchitskii, S. Naumov, N. Kostromitina, A. Karkin. Superconductivity and transport properties in $LaRu_4Sb_{12}$ single crystals probed by radiation-induced disordering// Physica C 460-462, 2007, pp. 691-693.
24. Sergey V. Ovsyannikov, Vladimir V. Shchennikov, Boris N. Goshchitskii. Thermoelectric power and phase transitions in lanthanides under pressure up to 20 GPa// Materials Science and Engineering A 46 , 2007, pp. 427-431.
25. С.Е. Данилов, В.Л. Арбузов, Б.Н. Гощицкий, А.Е. Карькин, В.А. Павлов, В.Д. Пархоменко. Влияние стоков разного типа на радиационную повреждаемость аустенитных Fe-Ni-сплавов при электронном и нейтронном облучении// ВАНТ, серия ФРП и РМ (90), 2007, № 2, с. 43-47

Доклады:

7-ой Международный Уральский семинар “Радиационная физика металлов и сплавов”, Снежинск, 25 февраля - 3 марта 2007

1. А. В. Литвинов, В. А. Шабашов, В. В. Сагарадзе, К. А. Козлов, Н. Ф. Вильданова, В. И. Воронин. Получение дисперсно-упрочненных оксидами реакторных аустенитных сплавов на основе Fe-Ni инвара, легированного Ti и Zr. с. 66.
2. А. Мирмельштейн, Е. Клементьев, В. Воронин, И. Бергер, В. Щенников, Ю. Акшенцев, Д. Козленко. Влияние внешнего и химического давления на структуру промежуточно-валентного соединения $CeNi$. с.70.
3. В. Д. Пархоменко, С. Ф. Дубинин, В. Е. Архипов, Ю. Г. Чукалкин, С. Г. Теплоухов, Я. М. Муковский. Магнитная структура и транспортные свойства атомно-разупорядоченного кристалла двумерного манганита $La_{2-2x}Sr_{1+2x}Mn_2O_7$. с. 88.
4. Т. И. Арбузова, С. В. Наумов, В. И. Воронин, Б. А. Гижевский, А. Е. Козлов, Р. Г. Захаров, С. А. Петрова, Т. И. Филенкова. Влияние неравновесных состояний на обменное взаимодействие в наноструктурном $LaMnO_{3-\delta}$. с. 89.
5. Ю. Г. Чукалкин, А. Е. Теплых, Б. Н. Гощицкий. Модификация структурного и магнитного состояний окисных перовскитоподобных манганитов путем введения антиузельных дефектов. с. 90.
6. A. Karkin, Yu. Akshentsev, B. Goshchitskii. Insulator-to-Metal Transition in SmB_6

Induced by Neutron Irradiation. p. 92

7. B. Goshchitskii, S. Naumov, N. Kostromitina, A. Karkin. Superconductivity and Transport Properties in $\text{LaRu}_4\text{Sb}_{12}$ Single Crystals Probed by Radiation-Induced Disorder. p. 100.
8. И. Ф. Бергер, В. И. Воронин, Н. В. Проскурнина, А. Е. Карькин, А. Г. Кучин, Б. Н. Гощицкий. Изменение кристаллической структуры и магнитных свойств $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ после облучения быстрыми нейтронами и последующих изохронных отжигов. с. 101.
9. В. И. Воронин, Н. В. Проскурнина, Б. Н. Гощицкий. Локализация радиационных дефектов в решетке ВТСП после облучения быстрыми нейтронами. с. 102.

4-й Международный симпозиум “Химия и химическое образование”, 16-19 мая 2007, Владивосток

1. В. И. Воронин. Нейтронные исследования особенностей кристаллической структуры супериоников Me_3PO_4 ($\text{Me} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) в широком температурном интервале, 4-й Международный симпозиум “Химия и химическое образование”, 16-19 мая 2007, Владивосток, с. 60.

4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden

1. D. Kozlenko, B. Savenko, S. Kicharov, I. Goncharenko, V. Voronin. Pressure tuning of magnetic states in $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ manganites ($x=0.25 - 0.85$). Programme - Oral presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 57.
2. E. A. Sherstobitova, A. N. Pirogov, V. Sikolenko, R. Schedler, J.-G. Park, S. G. Bogdanov, Yu. N. Skryabin. Polarized neutron scattering on TbNi_5 single crystal. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 101.
3. A. E. Teplykh, A. P. Vokhmyanin, Yu. N. Skryabin. Magnetic structure alloys of system $\text{FeSn}_2 - \text{MnSn}_2$. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 104.
4. A. Teplykh, A. Pirogov, N. Mushnikov, D. Scheptyakov, V. Pomjakushin, P. Teplykh. Crystal structure and magnetic state of $\text{ErFe}_2\text{H}_{3.0}$ and $\text{ErFe}_2\text{D}_{3.0}$. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 105.
5. N. V. Proskurnina, V. I. Voronin, I. F. Berger, D. V. Sheptyakov, E. I. Burmakin, G. S. Shekhtman. Alkali element sublattice “melting” -- mechanism of occurrence of superionic condition in Me_3PO_4 ($\text{Me}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$). Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 185.
6. A. E. Teplykh, S. G. Bogdanov, Yu. A. Dorofeev, A. N. Pirogov, Yu. N. Skryabin, V. G. Makotchenko, A. S. Nazarov, V. E. Fedorov. Structural State of Expanded Graphite Prepared from Intercalation Compounds and Composites this Basis. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 194.
7. V. I. Voronin, I. F. Berger, N. V. Proskurnina, A. E. Karkin, A. G. Cuchin, B. N. Goshchitskii. Neutron investigations of the crystal structure of R_2Fe_{17} after fast neutron irradiation and subsequent isochronal annealing. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund, Sweden, Media-Tryck. p. 195
8. V. D. Parkhomenko, S. F. Dubinin, Yu. G. Chukalkin, S. G. Teploukhov, V. E. Arkhipov, Yu. M. Mukovski. Defects and structure of a manganite $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$ crystal. Poster presentations. 4th European Conference on Neutron Scattering, 25-29 June 2007, Lund,

Sweden, Media-Tryck. p. 403.

Euro-Asian Symposium “Magnetism on a Nanoscale”, EASTMAG-2007, Kazan, August 2007

1. N. V. Mushnikov, V. S. Gaviko, A. N. Pirogov, A. V. Korolyov. Magnetic properties and structure of ErFe_2H_x hydrides.

Симпозиум “Среды со структурным и магнитным упорядочением”, 5-10 сентября 2007, п. Лоо Краснодарского края

1. Э. З. Валиев. Магнитный фазовый переход первого рода в ферромагнетиках $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$.
2. Э. З. Валиев. Магнитокалорический и барокалорический эффекты в ферромагнетике $\text{La}(\text{Fe}_{0.88}\text{Si}_{0.12})_{13}$.

VI Национальная конференция РСНЭ 2007, Москва, ноябрь 2007

1. С. Г. Богданов, Э. З. Валиев, А. Н. Пирогов, Ю. Н. Скрябин, А. Е. Теплых, А. С. Назаров, В. Г. Макотченко, В. Е. Федоров. Малоугловое рассеяние нейтронов композитами расширенный графит-железо.
2. А. Е. Теплых, Ю. Г. Чукалкин, А. Г. Кучин. Магнетизм интерметаллида $\text{Ce}_2\text{Fe}_{17}$ в кристаллическом и аморфном состояниях.
3. В. Д. Пархоменко, С. Ф. Дубинин, С. Г. Теплоухов. Влияние химического состава на аморфизацию быстрыми нейтронами сплавов на основе никелида титана.

Международная конференция “Актуальные проблемы физики твердого тела (ФТТ-2007)”, Минск, 23-26 октября 2007 г

1. А. П. Вохмянин, А. Е. Теплых, С. Г. Богданов, Ю. А. Дорофеев, А. Н. Пирогов, В. А. Казанцев, Ю. Н. Скрябин, В. Г. Макотченко, А. С. Назаров, В. Е. Федоров. Структурное состояние композитов на основе расширенного графита.
2. А. П. Вохмянин, Е. А. Шерстобитова, А. Н. Пирогов, А. Е. Теплых. Зонный метамагнитный переход в соединениях $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$.

Конференция по физике конденсированного состояния, сверхпроводимости и материаловедению, посвященная 50-летию исследовательского ядерного реактора ИРТ, Москва, РНЦ КИ, 26-30 ноября 2007

1. В. И. Воронин, И. Ф. Бергер, С. Ф. Солодовников, Д. Ю. Наумов, А. Е. Карькин, Н. В. Проскурнина, Б. Н. Гощицкий. Кристаллическая структура атомно разупорядоченных соединений CeM_2X_2 ($\text{M}=\text{Ni}, \text{Cu}$; $\text{X}=\text{Si}, \text{Ge}$).
2. А. Е. Карькин, Ю. Н. Акшенцев, Б. Н. Гощицкий. Эффекты разупорядочения в Кондо-изоляторе SmV_6 .
3. А. Е. Карькин, В. И. Воронин, И. Ф. Бергер, В. А. Казанцев, Ю. С. Поносов, В. Г. Ральченко, В. И. Конов, Б. Н. Гощицкий. Радиационные эффекты в CVD-алмазе.
4. Ю. Н. Михайлов, В. А. Казанцев. Низкоэнергетические магнитные возбуждения в $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_4$ феррите.

Информация по п. 9.3 Технического задания
(по состоянию на 07.12.07 – завершение работ по этапу № 2)

1. Перечень организаций-пользователей научного оборудования УСУ за последние 3 года и за 2007 год с указанием количества их обращений и характера использования оборудования УСУ (под обращениями имеются в виду конкретные научные исследования), в том числе перечень сторонних пользователей УСУ:

за последние 3 года:

- -Институт химии твердого тела УрО РАН - 25
- Институт металлургии УрО РАН - 5
- -Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН - 8
- -Институт неорганической химии СО РАН - 8
- -Уральский государственный университет - 8
- -РФЯЦ-Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики - 4
- -Белоярская атомная станция - 3
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН - 4
- -Институт реакторных материалов Росатома - 13
- Институт физики металлов УрО РАН – 5
- Институт электрофизики УрО РАН - 3
- Петербургский институт ядерной физики РАН - 4

за 2007 год:

- Институт химии твердого тела УрО РАН - 2
- Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН - 2
- Уральский государственный университет - 2
- Петербургский институт ядерной физики РАН - 1
- Объединенный институт ядерных исследований - 2
- Институт неорганической химии СОРАН - 1
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск – 1
- -Институт реакторных материалов Росатома - 3
- РФЯЦ-Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики - 1
- Институт физики металлов УрО РАН – 3

Характер обращений – нейтронографические исследования кристаллической и магнитной структур и фазового состава сплавов и соединений, облучение материалов и изделий быстрыми нейтронами.

2. Обновление парка научного оборудования (по данным бухгалтерского учета):

- 11.85 процентов к уровню 2006 г. (Рассчитывается как процентное отношение стоимости приобретенного оборудования в 2007 году за счет средств ФЦП к стоимости оборудования УСУ, состоящего на балансе на 1 января 2007 года).

3. Количество научных публикаций, подготовленных по результатам исследований с использованием УСУ за последние 3 года и за 2007 год:

0, 0 - монографии;

47, 16 - статьи во всероссийских изданиях;

34, 9 - статьи в зарубежных изданиях;

85, 26 - доклады.

4. Перечень наиболее значимых публикаций за последние 3 года и за 2007 год.

за последние 3 года:

- S.Mikhalev, S.Verkhovskii, A.Gerashenko, A.Mirmelstein, V.Bobrovskii, K.Kumagai, Y.Furukawa, T.D'yachkova, Yu. Zainulin. Temperature dependence of the sublattice magnetization of the infinite-layer antiferromagnet SrCuO₂// Phys. Rev. B, 2004, vol. 69, 132415.
- Б.А.Гринберг, Н.В.Казанцева, Е.В.Шорохов, А.Н.Пирогов, Ю.А.Дорофеев. Нейтронографическое и электронно-микроскопическое исследование фазовых превращений в никелевом сплаве после ударно-волнового нагружения// Физика и техника высоких давлений, 2004, том 14, №. 4, с. 97-103.
- А.Е. Карькин, В.В. Щенников, С.В. Овсянников, Е.П. Скипетров, Б.Н. Гощицкий. Индуцированный облучением быстрыми нейтронами электронный переход полупроводник-металл в селениде свинца// Письма в ЖТФ, 2004, том 30, №. 8, с. 53-61.
- D.P. Kozlenko, V.P. Glazkov, B.N. Savenko, and V.I. Voronin. Interplay between structural and magnetic properties of Lu₂ Fe₁₇ at high pressure// Eur. Phys. J. B, 2004, vol. 41, p. 445-449.
- S.Lee, A.A.Podlesnyak, K.Prokes, E.V.Sikolenko, A.S.Ermolenko, E.G.Gerasimov, Yu.A.Dorofeev, A.P.Vokhmyanin, J.-G.Park, A.N.Pirogov. Magnetic phase transitions in TbNi₅ single crystal: Bulk properties and neutron diffraction studies// Письма в ЖЭТФ, 2005, том 82, №. 1, с. 34-38.
- А.Е.Карькин, С.В.Наумов, Б.Н.Гощицкий, А.М.Балбашов. Гальваномагнитные свойства атомно-разупорядоченного монокристалла Sr₂RuO₄// ЖЭТФ, 2005, том 127, №. 6, с. 1297-1309.
- С.Ф.Дубинин, Н.Н.Лошкарева, С.Г.Теплоухов, Ю.П.Сухоруков, А.М.Балбашов, В.Е.Архипов, В.Д.Пархоменко. Упорядочение кислородных вакансий в монокристалле перовскита CaMnO_{3-δ}// ФТТ, 2005, том 47, №. 7, с. 1226-1231.
- В.И.Соколов, С.Ф.Дубинин, С.Г.Теплоухов, В.Д.Пархоменко, Н.Б.Груздев. Нестабильность решетки, вызванная 3d-примесями в полупроводниках II-VI// ФТТ, 2005, том 47, №. 8, с. 1494-1497.
- Н.О.Голосова, Д.П.Козленко, В.И.Воронин, В.П.Глазков, Б.Н.Савенко. Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуры кобальтита La_{0.7}Sr_{0.3}CoO₃// ФТТ, 2006, том 48, №. 1, с. 90-94.
- А.Е. Карькин, Б.Н. Гощицкий. Особенности электронных состояний соединений с сильными электронными корреляциями: исследование методом радиационного разупорядочения// Физика элементарных частиц и атомного ядра, 2006, том 37, №. 6, с. 1-44.
- С.Ф.Дубинин, Ю.Г.Чукалкин, С.Г.Теплоухов, В.Е.Архипов, В.Д.Пархоменко, Я.М.Муковский. Дефекты и структура кристалла манганита La_{0.85}Sr_{0.15}MnO₃// ФТТ, 2006, том 48, №. 10, с. 1805-1811.
- С.Ф.Дубинин, В.И.Соколов, С.Г.Теплоухов, В.Д.Пархоменко, Н.Б.Груздев. Неоднородные искажения в кристалле Zn_{1-x}Cr_xSe// ФТТ, 2006, том 48, №. 12, с. 2151-2156.
- Ю.Г.Чукалкин, А.Е.Теплых. Структура и магнетизм дефектного манганита LaMnO₃// ФТТ, 2006, том 48, №. 12, с. 2181-2189.
- N.V.Baranov, A.A.Ermakov, A.N.Pirogov, A.V.Proshkin, S.N.Gvasaliya, A.Podlesnyak. Irreversibility of the magnetic state of the Tm_{1-x}Tb_xCo₂ revealed by specific heat, electrical resistivity, and neutron diffraction measurements// Phys. Rev. B. 2006, vol. 73, p. 104445-1-11.
- Ye.V.Shcherbakova, Yu.F.Dorofeev, A.N.Pirogov, Ye.G.Gerasimov, N.V.Mushnikov.

Magnetic structure and properties of $\text{LaFe}_{13-x}\text{Ga}_x\text{C}$ compounds ($x=2.9, 6.5$)// JMMM, 2006, vol. 302, No1, p.165-172.

за 2007 год:

26. С. Ф. Дубинин, В. И. Соколов, С. Г. Теплоухов, В. Д. Пархоменко, В. В. Гудков, А. Т. Лончаков, И. В. Жестовских, Н. Б. Груздев. Наноразмерные деформации решетки в кристалле ZnSe, легированном 3d-элементами// ФТТ, 2007, том 49, в. 7, с. 1177-1182.
27. Е. А. Шерстобитова, А. Ф. Губкин, А. В. Захаров, А. Е. Теплых, А. А. Подлесняк, С. Н. Гвасалия, Д.-Г. Парк, Н. В. Баранов, А. Н. Пирогов. Нейтронографическое исследование метамагнитного перехода в $\text{Tb}_{0.1}\text{Tm}_{0.9}\text{Co}_2$ // ФТТ, 2007, том 49, в. 7, с. 1246-1250.
28. А. П. Вохмянин, Ю. А. Дорофеев, А. И. Курбаков, А. Н. Пирогов, Ю. Н. Скрябин. Магнитная структура Er_5Si_3 при $T < 20 \text{ K}$ // Кристаллография, 2007, том 52, в. 3, с. 454-457.
29. Е. А. Шерстобитова, К. А. Козлов, А. Е. Теплых, Ю. А. Дорофеев, Ю. Н. Скрябин, А. Н. Пирогов. Зонный метамагнитный переход в соединениях $\text{Tb}_x\text{Nd}_{1-x}\text{Co}_2$ // Кристаллография, 2007, том 52, в. 3, с. 458-461.
30. A. V. Skripov, A. L. Buzlukov, A. V. Soloninin, V. I. Voronin, I. F. Berger, T. J. Udovic, Q. Huang, J. J. Rush. Hydrogen motion and site occupation in $\text{Ti}_2\text{CoH}_x(\text{D}_x)$: NMR and neutron scattering studies// Physica B 392, 2007, pp. 353-360.
31. D. P. Kozlenko, L. S. Dubrovinsky, I. N. Goncharenko, B. N. Savenko, V. I. Voronin, E. A. Kiselev, N. V. Proskurnina. Pressure-induced monoclinic distortion and charge and orbital ordering in $\text{La}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. B, 2007, v. 75, 104408.
32. N. V. Baranov, A. F. Gubkin, A. P. Vokhmyanin, A. N. Pirogov, A. Podlesnyak, L. Keller, N. V. Mushinkov, M. I. Bartashevich. High-field magnetization and magnetic structure of Tb_3Co // J. Phys.: Condens. Matter, 2007, v. 19, 326213 (14 pp).
33. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующими монохроматорами. I. Общие формулы// Поверхность, 2007, No 7, с. 72-78.
34. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующим монохроматором. II. Вертикальная фокусировка// Поверхность, 2007, No 8, с. 42-49.
35. В. И. Бобровский, И. Л. Ждахин. Функция разрешения нейтронных дифрактометров с фокусирующим монохроматором. III. Горизонтальная фокусировка// Поверхность, 2007, No 12, с. 5-12.
36. Yurii Chukalkin, Alexander Teplykh, Boris Goshchitskii. Destruction of manganite $\text{La}_{0.825}\text{Ba}_{0.175}\text{MnO}_3$ ferromagnetism caused by structural disordering// Phys. stat. sol. (RRL), № 1, (2007), P19-P21

5. Перечень научных работ, подготовленных к опубликованию в 2007 году:

- монографии:

нет;

- статьи во всероссийских изданиях:

10. Ю. Н. Михайлов, В. А. Казанцев. Длинноволновые магнитные возбуждения в $\text{Zn}_{0.55}\text{Mn}_{0.45}\text{Fe}_2\text{O}_3$.
11. С. Ф. Дубинин, А. В. Королев, С. Г. Теплоухов, В. Е. Архипов, Э. А. Нейфельд, В. Д. Пархоменко, Н. А. Угрюмова. Фазовое расслоение в кристалле манганита $\text{La}_{0.95}\text{Ba}_{0.05}\text{MnO}_3$.
12. Ю. Н. Михайлов, В. А. Казанцев. Магнитное состояние, упругие постоянные и

длинноволновые статические смещения атомов в Yb-FeNi сплавах.

13. С. Ф. Дубинин, В. Е. Архипов, В. Д. Пархоменко, С. Г. Теплоухов, Я. М. Муковский.
 14. Зарядовое упорядочение в радиационно-модифицированном манганите $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{MnO}_3$.
 15. В. И. Воронин, И. Ф. Бергер, Н. В. Проскурнина, Д. Шептяков, Е. И. Бурмакин, С. С. Строев, Г. Ш. Шехтман. Кристаллическая структура низкотемпературной модификации ортофосфатов цезия и рубидия.
 16. В. Л. Арбузов, Б. Н. Гощицкий, С. Е. Данилов, А. Е. Карькин, Д. А. Перминов, В. Д. Пархоменко. Радиационно-индуцированное расслоение твердого раствора сплавов Fe-Ni и Fe-Ni-P при облучении электронами и быстрыми нейтронами.
 17. С. Ф. Дубинин, В. И. Соколов, А. В. Королев, С. Г. Теплоухов, Ю. Г. Чукалкин, В. Д. Пархоменко, Н. Б. Груздев. Магнитное состояние массивного кристалла $\text{Zn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Se}$ ($x=0.045$).
 18. А. П. Вохмянин. Симметричный анализ магнитных структур сплавов квазибинарной системы $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Sn}_2$;
- статьи в зарубежных изданиях:
2. Е. А. Sherstobitova, К. А. Kozlov, А. Е. Teplykh, Yu. А. Dorofeev, J.-G. Park, Yu. N. Skryabin, N. V. Baranov, А. N. Pirogov. Structure and magnetic state of the $\text{Nd}_{1-x}\text{Tb}_x\text{Co}_2$ compounds at 4.2K.

- доклады:

В процессе подготовки 11 докладов на международные и российские конференции.

6. Перечни подготовленных и защищенных с использованием научного оборудования УСУ за последние 3 года и за 2007 год:

- дипломных работ:

за последние 3 года:

- Ф.С. Шеметьев. Расчет сечения малоуглового рассеяния нейтронов на спиновых волнах”.
- О.Г. Микушина. Определение размера неоднородностей в соединениях $\text{R}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ и стали ЧС-68 методом малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов.
- А.Ф. Губкин. Магнитные фазовые переходы в интерметаллических соединениях R_3Co .
- А.С. Кривошеков. Гальваномагнитные свойства и структурное состояние соединений с тяжелыми фермионами CeCu_6 , CeCu_2Ge_2 , CeNi_2Ge_2 и CePd_2Ge_2 , разупорядоченных с помощью нейтронного облучения.
- П.А. Теплых. Нейтронографический контроль кристаллической структуры и магнитного состояния интерметаллических соединений $(\text{Dy}_{1-x}\text{Y}_x)_3\text{Co}$ “.
- А.В. Береснев. Нейтронографическое определение магнитной структуры соединений .
- И.В. Проскурин. Примесь в магнитном окружении. Модель Бозе-Кондо.
- Д.Ю. Устюгов. Квантовое туннелирование субомической диссипационной двухуровневой системы.

за 2007 год:

9. Т.С.Немытова. Магнитные свойства и кристаллическая структура ZrMnCo_2 соединения.
10. М.В.Пантелеев. Концентрационный метамагнитный переход в соединении TbTmCo_2 .

- кандидатских диссертаций:

за последние 3 года:

- Н.В.Проскурнина. “Фазовые равновесия, кристаллическая структура и кислородная нестехиометрия сложных оксидов в системах La-M-M'-O (M, M'=Fe, Co, Ni)”.

- докторских диссертаций:

за последние 3 года:

- А.Е.Карькин. “Особенности электронных состояний соединений с сильными электронными корреляциями: исследование методом радиационного разупорядочения”.

за 2007 год:

нет

7. Количество привлеченных для выполнения научных исследований на УСУ:

за последние 3 года:

3 - аспирантов;

8 - студентов;

за 2007год:

0 - аспирантов;

2 - студентов;

8. Количество научных конференций за последние 3 года и за 2007год, в работе которых приняли участие специалисты УСУ, в том числе международных.

34 (28 международных) - за последние 3 года,

7(5 международных) - за 2007 год.

9. Признание научной значимости результатов, полученных на УСУ в виде государственных и международных премий, наград выставок и др. за последние 3 года и за 2007 год.

нет

10. Перечень аттестованных методик измерений, а также перечень усовершенствованных и разработанных методик измерений на УСУ:

Методики выполнения измерений (МВИ):

Экспериментальные установки, используемые при работе УСУ (нейтронные дифрактометры)

аттестованы и периодически проверяются по характеристикам погрешности (калибруются) метрологической службой ИФМ УрО РАН в соответствии с планом МО НИР, принятым в институте и полностью соответствуют требованиям, сформулированным в ГОСТ 7.32-2001. Средства измерения, входящие в установки, также калибруются метрологической службой в соответствии с графиком калибровки СИ. Метрологическая служба ИФМ УрО РАН аккредитована на право калибровки средств измерений (реестр № 054032).

Кристаллические и магнитные структуры анализируются путем обработки нейтронограмм и рентгенограмм с помощью пакетов “Fulprof”, “DBWS”, являющихся стандартным средством такого анализа во всем мире.

Метрологическая аттестация и периодический контроль характеристик погрешности

(калибровка) нейтронных дифрактометров проводится с помощью сертифицированных эталонных образцов. МВИ прописаны в техническом описании и инструкции по эксплуатации на нейтронные дифрактометры.

Исследования свойств облученных материалов на установке HFSS фирмы Oxford Instruments проводятся с использованием стандартных методик (МВИ) фирмы-изготовителя, прописанных в эксплуатационной документации, в диапазоне температур 0.3 К-400 К, магнитных полей до 15.5 Т и позволяют исследовать:

- электросопротивление и температуру сверхпроводящего перехода в температурном интервале (0.3-400.0) К в магнитных полях до 15 Т и давлениях до 20 кбар;
- электросопротивление высокорезистивных материалов в температурном интервале (4.2-100.0) К;
- величины критического тока в сверхпроводниках в диапазоне (0.3-400.0) К и магнитных полях до 15 Т;
- магнитную восприимчивость и эффект Холла при температурах (0.3-400.0) К;
- намагниченности в магнитных полях до 2 Т в температурном интервале (4.2-1000.0) К;
- АС-восприимчивость при температуре от 4.2 до 300.0 К;
- коэффициент линейного расширения в диапазоне температур (70-1500) К;
- удельную теплоемкость при температуре от 2.5 до 350 К;
- механические свойства образцов при температуре от 80 до 300 К.

Усовершенствованные и разработанные методики измерений на УСУ:

- Усовершенствованный метод малоуглового рассеяния поляризованных и неполяризованных нейтронов на нанокристаллических образцах
- Усовершенствованный метод разделения магнитного и ядерного вкладов в сечение рассеяния поляризованных нейтронов

11. Адрес интернет-сайта УСУ (если имеется).

нет

12. Суммарное количество исследований (измерений), выполненных с использованием УСУ за последние 3 года и в 2007 году, в том числе в интересах сторонних организаций. Ежегодно общее количество эксплуатационных дней реактора составляет 250 суток, в том числе:

- | | | |
|----|------------------------------|--------------------------------|
| 1. | внутреннее использование: | 200 экспериментов/20000 часов, |
| 2. | национальное использование: | 120 экспериментов/12000 часов, |
| 3. | международное использование: | 40 экспериментов/4000 часов. |

В среднем время на установках распределяется следующим образом (%):

- | | | |
|----|------------------------------|------|
| 4. | долгосрочные проекты: | 75%, |
| 5. | индивидуальные эксперименты: | 20%, |
| 6. | срочные эксперименты: | 5%. |

13. Объем средств федерального бюджета, выделенных организации по виду расходов «государственная поддержка УСУ»:

2100 т.р., 2100 т.р., 2660 т.р. - за последние 3 года;

3000 т.р.. - в 2007 году.

14. Объем средств, выделенных на поддержание и развитие УСУ из других источников финансирования:

1500 т.р., 1550 т.р., 1550 т.р. (УрО РАН) - за последние 3 года;

1550 т.р. (УрО РАН) - в 2007 году.

15. **Перечень оборудования**, приобретенного для УСУ за счет средств федерального бюджета, выделенных организации Минпромнауки России и Роснаукой за последние 3 года и за 2007 год в соответствии с приложением № 1 к ТЗ:

2004 г.

- Система микроанализа EDAXDA4i;
- Электронная система управления стресс-дифрактометром.

2005 г.

- Электронная система накопления дифракционных спектров на нейтронном стресс-дифракто-метре (3-я очередь).

2006 г.

- Механическая система перемещения стресс-сканера и позиционно чувствительного детектора нейтронов;
- Электронная система дистанционного управления и накопления информации для нейтронного дифрактометра Д-7а;
- Высоковольтный источник питания (DF3, X-ray generator).

2007 г.

- Двухступенчатый гелиевый криорефрижератор замкнутого цикла на импульсных трубках (SRP-082B-F70H производства компании «Sumitomo»).

16. **Структура затрат** из средств федерального бюджета на УСУ, выделенных организации по виду расходов «государственная поддержка УСУ» за последние 3 года и в 2007 году на:

- приобретение импортного оборудования, тыс. руб. – 641.8/1180.0;
- приобретение отечественного оборудования, тыс. руб. – 1696,2/0.0;
- модернизацию оборудования, тыс. руб. – 500.0/0.0;
- ремонт оборудования, тыс. руб. - 0.0/0.0.