

**Перечень важнейших результатов
секции «Образование и структура кристаллов»
в 2010 г.**

1. В Институте общей физики им. А.М. Прохорова РАН (ИОФ РАН) совместно с Институтом общей и неорганической химии РАН (ИОНХ) и Химическим факультетом и Факультетом наук о материалах Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова (МГУ).

Получены дополнительные экспериментальные свидетельства существования кооперативного роста монокристаллов путем агломерации наночастиц. Исследовались кристаллизация веществ кубической структуры, родственной флюориту (Y_2O_3 , CeO_2 , $Ba_4R_3F_{17}$, $M_{1-x}R_xF_{2+x}$), методы исследования – СЕМ, ПЭМ, уширение линий на рентгенограммах порошка, малоугловое рентгеновское рассеяние. Проведен анализ литературы, сформулированы направления дальнейших исследований. Сформулировано понятие о силах ориентационного упорядочения.

Продолжены исследования механизмов формирования фторидной нанокерамики путем горячего формования монокристаллов.

2. В Институте общей физики РАН им. А.М. Прохорова (ИОФ РАН) совместно с Геологическим факультетом Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова (МГУ).

Установлена и объяснена роль собственных дефектов форстерита Mg_2SiO_4 в возникновении центров окраски (ЦО) и образовании окисленной формы хрома (Cr^{4+}).

Показано, что кислород ростовой атмосферы при выращивании форстерита непосредственно не участвует в создании окисленной формы хрома, но лишь создает точечные дефекты (вакансии кремния и дырки в валентной зоне), которые способствуют процессу самоокисления хрома. При этом, изменение парциального давления кислорода влияет на концентрацию ЦО и Cr^{4+} , в случае, если меняет соотношение собственных дефектов кристалла, создавая дефекты избыточного кислорода.

Показано, что концентрацию ионов Cr^{4+} и центров окраски можно рассматривать как индикатор катион-анионной стехиометрии.

3. В Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН (ФТИ РАН)

Разработан комплексный подход к моделированию процесса выращивания оксидных кристаллов из расплава методом Чохральского. Подход охватывает (1) оптимизацию процессов теплообмена в кристаллизационной установке, (2) разработку алгоритма управления, обеспечивающего реализацию оптимальных тепловых условий роста и (3) динамическое, то есть полностью нестационарное моделирование ростового процесса с автоматическим управлением по весовому датчику.

4. В Институте физики полупроводников СО РАН (ИФП СО РАН)

Обобщен опыт вычислительно-экспериментального исследования транспортных свойств квантовых и одноэлектронных наноустройств, созданных в ИФП СО РАН и в сильнейших зарубежных научных группах: разработана концепция интроскопии устройств. Первичная информация, собранная в процессе изготовления устройств и измерения их структурных, а также электрофизических характеристик, используется для вычислительного восстановления на базе недоступного для экспериментально определения картин удерживающего потенциала, геометрии электронных систем, а также квантовых и одноэлектронных явлений, происходящих внутри устройств.

Исследованы оптические характеристики структур с вискерами кремния, выращенными методом МЛЭ.

5. В Институте экспериментальной минералогии РАН (ИЭМ РАН)

I. Впервые на основе комплексных экспериментальных и термобарогеохимических исследований включений в синтетическом кварце и других минералах установлено, что водно-углеводородные флюиды в зависимости от температуры, давления и объемных соотношений водного раствора (L1), жидких (L2) и газообразных (G) углеводородов (УВ) могут находиться в различных фазовых состояниях, определяющих формы нахождения и миграции УВ в земных недрах. В частности, определены условия существования водно-углеводородных флюидов в гетерогенном трехфазном ($L1 > G \geq L2$, $L1 > L2 \geq G$) или двухфазном ($L1 \geq L2$, $L2 \geq L1$) состояниях, и в гомогенном жидком, газовом и надкритическом состояниях.

II. Осуществлены опыты продолжительностью до 60 суток по выращиванию монокристаллов высокогерманиевого кварца (ВГК) в укрупненном лабораторном автоклаве объемом 1500 л при температурах 500-550°C и давлениях 80-100 МПа. Выращены кристаллы весом до 120 г с толщиной нароста на одну сторону от заправки до 12 мм со скоростью роста 0,12 – 0,15 мм/сутки. Максимальное содержание GeO_2 в кристаллах достигает 16-17,5 масс.%. Дальнейшие исследования, направленные на создание промышленной технологии выращивания ВГК, должны быть сосредоточены на нахождении относительно хорошо растворимых соединений германия для использования в качестве шихтового материала.

III. Впервые выращены монокристаллы топаза (совместно и отдельно с кварцем) при температурах 450-750°C и давлениях от 20 до 150 МПа в растворах, приготовленных на основе тяжелой воды и ее смесей с обычной водой. Установлено, что водород в составе гидроксила и фторидных комплексов в топазе и структурных дефектах в кварце, в зависимости от доли тяжелой воды в растворах частично или полностью замещается дейтерием. Это доказывается появлением новых полос поглощения в ИК-спектрах топаза вблизи 2650, 2685, 2695 и 2922 cm^{-1} и кварца – вблизи 2590, 2600, 2625, 2670, 2700 и 2715 cm^{-1} . Присутствие тяжелой воды в растворах доказывается спектрами комбинационного рассеяния во флюидных включениях в кварце, росшем одновременно с топазом.

IV. Впервые разработан воспроизводимый метод получения тонкокристаллического ортосиликата висмута (эвлитина) – материала, перспективного для изготовления сцинтилляционных керамик. Синтез кристаллов осуществляется в гидротермальных растворах гидроксида натрия, фторида аммония и перекиси водорода при температурах до 250°C и давлениях до 15-20 МПа. Наиболее перспективным представляется синтез эвлитина в растворах перекиси водорода, поскольку в нем изначально отсутствуют элементы, могущие повлиять на чистоту конечного продукта. Важность решения этого вопроса стоит достаточно остро, т. к. отделение тонкокристаллических, особенно наноразмерных кристаллов от загрязнения компонентами растворителя является весьма сложной технологической задачей.

6. В Федеральном государственном учреждении Российский научный центр «Курчатовский институт» (РНЦ КИ)

Методом механоактивации из кристаллических фуллеренов C_{60} , C_{70} и их смесей получены аморфные (наноразмерные) структуры и установлено, что при их отжиге происходит переход из молекулярной аморфной фазы в атомарную (алмазо или графеноподобную), устойчивую до температуры 2000К, что ~ в 2 раза выше термоустойчивости кристаллических фуллеренов. Эта температура превышает температуру плавления многих практически важных элементов (Al, Cu, Fe, Ti) и поэтому открывается возможность использования этой фазы в качестве легирующей добавки для получения новых углеродсодержащих материалов.

Завершено создание аппаратуры для нейтронно-синхротронных исследований кристаллических, аморфных и наноразмерных материалов при высоких давлениях и с помощью этой аппаратуры проведены исследования барических фазовых переходов, атомной и магнитной структуры ряда нормальных и обращенных шпинелей, манганитов, мультиферроиков, фуллеритов C_{70} , переменновалентных и водородсодержащих соединений. На основе полученных структурных данных сделаны выводы о природе переходов и характере взаимодействий в этих системах.

Разработан ряд нетрадиционных нейтронно-синхротронных методик, включающих методики рефракционного, дифракционного и фазового контраста на бело, фильтрованном и монохроматическом излучении. На этой основе на реакторе ИР-8 создан комплекс экспериментальных установок, с помощью которого изучено строение и технологические дефекты в моно и поликристаллических турбинных лопатках, сварных швах, микро и макротопливных композициях, композитных и монокристаллических сверхпроводниковых материалах. Исследованы возможности нейтронных методов для изучения био и геоматериалов и метеоритного вещества.

7. В Учреждение Российской академии наук Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН (ИК РАН)

I. Природа аномального электрического влияния на магнитопластичность кристаллов

Обнаружен эффект резкого увеличения или ослабления движения дислокаций (соответственно усиление магнитопластичности или магнитоупрочнения) в слабом магнитном поле в зависимости от примеси при одновременном действии слабого электрического поля $E \sim 1$ кВ/м в щелочно-галоидных кристаллах. Дополнительное электрическое поле вызывает рост числа магнитоактивных центров на дислокациях на несколько порядков, что в случае магнитопластичности на несколько порядков повышает скорость дислокаций. Это приводит к их массовому выходу из кристалла и эффективной релаксации напряжений. Выяснен механизм явления. Эффект открывает технические перспективы регулирования структуры и управления свойствами наноразмерных центров, меняя тем самым пластичность кристаллов.

II. Электронные и магнитные свойства кристаллов магнезиовюстита ($Mg_{1-x}Fe_x$)O в экстремальных условиях сверхвысоких давлений, высоких и низких температур

Изучены электронные и магнитные свойства магнезиовюстита (Mg,Fe)O, одного из основных минералов в составе нижней мантии Земли, в условиях, максимально приближенных к тем, которые реализуются в глубине Земли, т.е. при сверхвысоких давлениях до 900 кбар и высоких температурах до 2500 К. В области давлений 550-700 кбар обнаружены электронные переходы ионов Fe^{2+} из высокоспинового в низкоспиновое состояние, при которых радикально меняются физические свойства кристаллов такие, как электро- и теплопроводность, плотность, сжимаемость, скорость звука, вязкость. Давление и температура этого спинового перехода соответствуют глубине от 1000 до 2200 км. Полученные результаты важны не только для геофизики, но и для фундаментальной физики сильно коррелированных электронных систем.

III. Прецизионное исследование поликристаллов с двумерным детектором на пучках СИ

Разработан метод исследования структуры поликристаллов с двумерными детекторами на пучках синхротронного излучения. В основе метода лежит интегрирование по большому телесному углу, что обеспечивает высокую статистическую точность данных, снижает влияние зернистости и текстуры образцов, убирает эффект асимметрии линий. Для эталонных образцов получены брэгговские R-факторы менее 1%. Качество определения структуры сравнимо с методом монокристалла, при этом для исследования необходимо малое количество вещества (менее 0.1 мм^3), а время съёмки на порядки величин меньше.

IV. Полиэлектrolитные нанокapsулы для доставки фармакологически активного компонента

Разработаны контейнеры на основе пористых неорганических частиц для доставки в мозг фармакологически активного компонента. Такие контейнеры, предназначенные для интраназального введения, представляют собой частицы карбоната кальция или диоксида титана с адсорбированным целевым соединением и поверхностью, модифицированной мукоадгезивными полимерами или сурфактантами. В ходе совместной работы с Институтом высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН проведены *in vivo*-тесты на лабораторных грызунах и показана эффективность доставки центрального анестетика лоперамида в центральную нервную систему крыс. Предложен способ модификации оболочек полиэлектролитных капсул магнитными наночастицами – *in situ* синтез магнетита методом химической конденсации. Полученные нанокomпозитные капсулы обладают высокой чувствительностью к воздействию внешнего магнитного поля.

V. Быстрая ангармоническая мода в электрооптическом переключении жидкокристаллических структур на основе хиральных нематиков

Изучены поляризационные и спектральные свойства нового электрооптического эффекта в хиральных жидких кристаллах (ЖК). В этом эффекте электрическое поле приводит к деформации (ангармонизму) геликоидальной надмолекулярной структуры ЖК на шкалах ~100 - 400 нм, что вызывает сильные изменения состояний поляризации света, прошедшего через слой ЖК. Благодаря субмикронной шкале периода упругой деформации наблюдаются рекордно короткие времена ее релаксации. Эффект характеризуется высококонтрастным электрооптическим откликом с быстрым действием в десятки раз выше, чем в современных ЖК-дисплеях. Это открывает перспективы использования эффекта в дисплейных технологиях.

8. В ООО «Гранит-А» (г. Александров)

Предложен новый ОТФ (осевого теплового потока) метод выращивания кристаллов (рост кристаллов в условиях слабых ламинарных течений расплава (космические условия на земле).

В 2010 году начато создание опытного производства полированных пластин и монокристаллов германия диаметром до 150 мм и CdZnTe диаметром до 75 мм.

Получены кристаллы германия с плотностью дислокаций на уровне 600/см² и CdZnTe со скоростью счета до 10⁷/сек. ОТФ метод позволяет выращивать крупногабаритные малодислокационные монокристаллы (до 300мм для Ge и до 200 мм для CdZnTe) и значительно повышает процент выхода годных (в 5 раз для CdZnTe, по сравнению с технологиями, используемыми в настоящее время). Технология защищена патентами