

**Перечень важнейших результатов
секции «Образование и структура кристаллов»
Научного совета РАН по физике конденсированных сред в 2011 году**

1. В Учреждении Российской академии наук Институте общей физики им. А.М. Прохорова РАН (ИОФ РАН)

Получены экспериментальные данные, свидетельствующие о широком распространении на наноуровне неклассического механизма образования кристаллов путем когерентного срастания наночастиц под действием сил ориентационного упорядочения.

2. В Учреждении Российской академии наук Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН (ИК РАН)

1) Кристаллы для оптических фильтров УФ-диапазона

Разработаны методики выращивания кристаллов гексагидратов сульфатов α -NSH, KNSH, ANSH, $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (KCSH), впервые выращены крупные кристаллы $Rb_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (RNSH) и $Cs_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ (CNSH) оптического качества, исследованы их свойства и структура.

Разработаны технологии выращивания кристаллов α -NSH, CNSH, KCSH. На их основе созданы два варианта солнечно-слепого объектива, входящего в состав УФ-датчика «Корона», который превосходит известные аналоги по многим параметрам.

Данные разработки входят в состав бортовой системы «Президент-С» защиты вертолетов от ПЗРК, которая принята на вооружение в 2010 г. В 2011 г. начато серийное производство кристаллов и приборов, которое завершает собой цикл исследований, проводившихся с 2005 г.

2) Термомиграция включений жидкой фазы в объеме твердой фазы.

Установлено, что массоперенос в нестационарных тепловых условиях отличается от такого в стационарных условиях не только количественно, но и возникновением качественно новых эффектов:

- эффект переключения потоков компонентов между сингулярными и несингулярными участками межфазных границ, при изменении скорости изменения температуры в системе;

- скорости межфазных границ могут на несколько порядков превышать скорость перемещения жидкой фазы как единого целого, что в случае неконтролируемых нарушений стационарности приводит к появлению нерегулярных полос роста, а в контролируемых нестационарных тепловых условиях позволяет управлять распределением примесей в перекристаллизованных областях;

- показано существование «эффекта грани» при термомиграции;

- определены пересыщения на сингулярных участках растворяющейся и кристаллизующейся межфазных границ и скорости перемещения этих участков предложенным новым методом, в котором нет необходимости знать величину градиента температуры.

Разработанная теория массопереноса в малых объемах жидкой фазы растворов в расплавах с учетом нестационарности тепловых условий может быть использована:

- для удаления включений из объема кристалла;

- для изучения механизма и кинетики процессов растворения и кристаллизации;

- для разработки методов измерения величины и анизотропии удельной межфазной энергии;

- при исследовании коэффициентов сегрегации и их зависимостей от скорости перемещения межфазной границы;

- в полупроводниковой технологии для расширения возможностей локального объемного легирования полупроводниковых подложек с управлением составом и формой перекристаллизованных областей

3. В Государственном Образовательном Учреждении Высшего Профессионального Образования Российском химико-технологическом университете им. Д.И. Менделеева (РХТУ)

1) Увеличение теплового эффекта кристаллизации при введении в расплав аксиальных низкочастотных вибраций

Экспериментально установлено, что введение аксиальных низкочастотных вибраций в расплав приводит к увеличению вплоть до 30 % теплового эффекта кристаллизации (на примере нитрата натрия NaNO_3). Высказана гипотеза о том, что данное явление связано с изменением степени ассоциации компонентов расплава.

2) Новый композиционный керамический материал на основе корунда, армированного многослойными углеродными нанотрубками

Разработан новый композиционный керамический материал на основе корунда, армированного многослойными углеродными нанотрубками, полученными каталитическим пиролизом. Композит характеризуется однородным распределением УНТ, образующих сетчато-каркасную структуру по границам зерен керамической матрицы, что приводит к увеличению трещиностойкости в 1,5 - 2 раза при содержании углеродных нанотрубок 0.2 об. %.

4. На Геологическом факультете Московского Государственного университета им. М.В. Ломоносова (МГУ) совместно с Учреждением Российской академии наук Институтом общей физики им. А.М. Прохорова РАН (ИОФ РАН)

Обнаружено явление резкого изменения характера концентрационных зависимостей ряда различных свойств кристаллов форстерита (**коэффициенты распределения хрома между кристаллом и расплавом, интенсивности спектральных линий поглощения и люминесценции, ЭПР спектры хромовых центров**) при переходе от области следовых содержаний примесей (**хрома, скандия или лития**) в расплаве к их более высоким концентрациям. Наблюдаемое явление объясняется взаимодействием примесей с собственными дефектами кристалла в области микроконцентраций и последующим изменением механизма зарядовой компенсации.

5. В Казанском физико-техническом институте им. Е.К. Завойского Казанского научного центра РАН (КФТИ КазНЦ РАН) совместно с Учреждением Российской академии наук Институтом общей физики им. А.М. Прохорова РАН (ИОФ РАН)

Обнаружены электрические квадрупольные переходы, вызванные резонансным взаимодействием градиента микроволнового электрического поля с электрическим квадрупольным моментом электронной оболочки иона – **электронный квадрупольный спиновый резонанс** (ЭКСП). Экспериментально исследовались спектры ЭПР электронно-ядерной спиновой системы примесных ионов Ho^{3+} в синтетическом форстерите (силикате магния Mg_2SiO_4). Обнаруженное явление не является электронным аналогом ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР), где резонансные переходы имеют магнитную дипольную природу и вызываются магнитной компонентой радиочастотного поля. Более близкой аналогией может служить ядерный акустический резонанс, где резонансное поглощение энергии акустических волн обусловлено электрическими квадрупольными переходами между ядерными спиновыми уровнями, и электронный акустический резонанс.

6. В Федеральном государственном бюджетном учреждении национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (РНИЦ КИ)

1) Самооблучение сплава Pu-Ga

Методом дифракции нейтронов на установке ДИСК реактора ИР-8 исследовано самооблучение сплава Pu-Ga с определением кристаллической структуры и среднеквадратичных атомных смещений $\langle u^2 \rangle$ при больших временах хранения. Исследование проводили при комнатной температуре на образце со слабо поглощающим нейтроны изотопом Pu²⁴², в который был добавлен для ускорения процессов самооблучения быстрорападающийся изотоп Pu²³⁸ (1.4%), что ускорило процессы старения в 4 раза и позволило достичь максимального эквивалентного времени старения ~23.5 года. Показано, что изменение $\langle u^2 \rangle$ (за счет статических смещений) происходит в две стадии: относительно быстрый рост (примерно на 50%) в первые 5-6 эквивалентных лет и медленный спад в течении 6-23 эквивалентных года почти до значения, превышающего исходное на ~20%. Последняя стадия может быть объяснена стоком непрерывно образующихся точечных дефектов на накапливающиеся со временем гелиевые пузырьки и дислокационные петли. Экстраполяция этого спада $\langle u^2 \rangle$ на большие времена старения показывает, что, если не сменится со временем механизм старения, образовавшийся на первой стадии самооблучения прирост $\langle u^2 \rangle$ исчезнет примерно к 50 годам эквивалентного времени самооблучения.

2) Структура сложных нейтронопоглощающих оксидов RE₂O₃-MEO₂ (RE = Dy, Gd, ME = Hf, Zr)

С помощью метода аномальной дифракции на установке СТМ Курчатовского источника синхротронного излучения удалось уточнить и объяснить особенности структуры образцов сложных оксидов RE₂O₃-MEO₂ (RE = Dy, Gd, ME = Hf, Zr), применяющихся в качестве эффективных нейтронопоглощающих материалов и претерпевающих при увеличении температуры отжига переход от аморфной структуры к структуре дефектного флюорита (с различным локальным окружением трех- и четырехвалентного катиона), а затем при накоплении дефектов к иной кристаллографической группе флюорита с удвоенным периодом решетки, промежуточной между структурными группами флюорита и пирохлора. Для анализа экспериментальных спектров поглощения и дифрактограмм был применен метод Байеса, который позволяет надежно оценивать точность полученных результатов и определять зависимые параметры обратной задачи.

3) Определение парциальных функций распределения в аморфных сплавах Zr-Be.

В рамках исследования наноразмерных систем нейтрон-синхротронными методами (на установке ДИСК ИР-8 и станции СТМ КЦСИ) проведено определение парциальных функций распределения в аморфных системах с различным соотношением масс атомов на примере сплавов Zr-Be. При этом синхротронные измерения дают информацию о структурном факторе тяжелой компоненты, а нейтронные – о структурном факторе обоих компонентов.

Проведены исследования динамического структурного фактора $S(Q,E)$ в двухкомпонентных металлических стеклах с различным соотношением масс атомов. Измерения выполнены с применением изотопического контраста, определен вклад отдельных атомов в формировании распространяющихся возбуждений и выявлено квазиакустическое и квазиоптическое поведение колебательных возбуждений в этих неупорядоченных системах, аналогичное фононным возбуждениям в кристаллах.