

Отчет по завершающейся теме “Исследования конденсированного состояния вещества с использованием современных методов нейтронографии” и предложение об открытии новой темы “Исследования функциональных материалов и наносистем с использованием рассеяния нейтронов ”

Д.П.Козленко

ЛНФ им. И.М.Франка, ОИЯИ, 141980 Дубна, Россия

denk@nf.jinr.ru

В отчете по теме 04-4-1121-2015/2020 “Исследования конденсированного состояния вещества с использованием современных методов нейтронографии” представлен обзор важнейших результатов, полученных за отчетный период 2018-2020 гг. Работы по теме в основном проводились силами коллектива Научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред ЛНФ ОИЯИ. Главной целью научных работ по теме было изучение структуры, динамики и микроскопических свойств новых материалов и наносистем, исследование которых актуально для развития современных представлений в области физики конденсированного состояния вещества, наук о материалах, химии, геофизики, инженерных наук, биологии и фармакологии, а также имеющих широкие перспективы применения в современных технологиях в области энергетики, электроники, фармакологии, медицины, методами рассеяния нейтронов и комплементарными методами. Главной целью методических работ было развитие комплекса спектрометров модернизированного реактора ИБР-2. Большинство научно-экспериментальных и методических работ проводилось на базе комплекса спектрометров реактора ИБР-2. Некоторые научные эксперименты также проводились в национальных и международных исследовательских центрах в тесном сотрудничестве со странами-участницами ОИЯИ.

Другим важным направлением деятельности по теме была реализация программы пользователей на базе комплекса спектрометров реактора ИБР-2.

Важнейшие полученные научные результаты:

- Определение структурной, магнитной и электронной фазовой Р-Т диаграммы магнетита Fe_3O_4 ;

- Анализ структурных фазовых переходов в сплавах Fe-xGa alloys ($x = 27.2 - 28$ at. %) с эффектом гигантской магнитострикции при изотермической выдержке;
- Анализ структурной организации наночастиц оксида железа в нанопористой матрице кремнезема SBA-15;
- Определение особенностей структурной организации звездообразных поли (2-этил-2-оксазолин) и поли (2-изопропил-2-оксазолин) с «ручками», привитым на нижний край тиакаликса[4]аренов;
- Анализ эффектов неоднородного внешнего магнитного поля на адсорбцию магнитных наночастиц феррожидкостей на плоской границе раздела сред;
- In-operando анализ эффектов добавления неэлектроактивной добавки (тетрабутил аммония перхлорат, TBAP) в литийсодержащий электролит на формирование твердо-электролитной интерфазы (Solid-Electrolyte Interphase, SEI) на поверхности электрода в модельных электрохимических границах раздела «жидкий электролит-твёрдый электрод»;
- Определение структурной организации фуллеренов C_{70} в тонких нанокompозитных пленках полистирола;
- Определение структурных особенностей комплексов фуллеренов с противоопухолевыми препаратами;
- Анализ магнитных и сверхпроводящих свойств слоистых наноструктур Nb(70nm)/Ni_{0.65}Cu_{0.35}(6.5 nm);
- Анализ колебательных спектров транс-1,3-циклогександиола, цис-1,3-циклогександиола, транс-1,2- циклогександиола и цис-1,2- циклогександиола с общей химической формулой C₆H₁₂O₂;
- Определение внутренних напряжений и микродеформаций в сталях и магниевых сплавах в условиях внешней приложенной нагрузки;
- Текстуальный анализ минералов в эклогитах;
- Анализ внутреннего строения объектов культурного и природного наследия с помощью нейтронной радиографии и томографии.

Важнейшие полученные методические результаты:

- Модернизация головной части - разветвителя 10-го канала реактора ИБР-2;
- Развитие метода изотопно-идентифицирующей рефлектометрии на рефлектометре РЕМУР;

- Усовершенствование электрохимических ячеек для экспериментов по нейтронной рефлектометрии;
- Замена конечной части обычного зеркального нейтроновода ($m = 1$) длиной 25 м на суперзеркальный нейтроновод с вертикальной фокусировкой ($m \approx 5$) спектрометра HEPA;
- Установка нового зеркального нейтроновода ($m = 2$) на дифрактометре FSS, установленном на 13 канале ИБР-2;
- Разработка и создание элементов нейтроноводной системы нового спектрометра малоуглового рассеяния и имиджинга для канала 10А;
- Разработка, создание и запуск в эксплуатацию спектрометра нейтронной радиографии и томографии на реакторе ВВР-К (РГП ИЯФ, Алматы, Казахстан).

За отчетный период сотрудниками, участвовавшими в выполнении работ по теме 04-4-1121-2015/2020, опубликовано 363 статьи в рецензируемых научных журналах и сделано 347 докладов на конференциях за период 2018-2020 гг. Результаты научно-методических исследований по теме были удостоены 4-х премий ОИЯИ.

Предложение об открытии новой темы “Исследования функциональных материалов и наносистем с использованием рассеяния нейтронов” на 2021-2025 гг.

Принимая во внимание успешную реализацию темы 04-4-1121-2015/2020, направления 7-летнего плана стратегического развития ОИЯИ в области физики конденсированных сред и актуальность выбранных направлений исследований, является целесообразным открыть новую тему “Исследования функциональных материалов и наносистем с использованием рассеяния нейтронов”, рук. Д.П.Козленко, В.Л.Аксенов, А.М.Балагуров на период 2021-2025 гг. Работы по теме в основном будут проводиться силами коллектива Научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред ЛНФ ОИЯИ.

Приоритетные фундаментальные и прикладные научные направления темы:

- Физика конденсированного состояния и науки о материалах,
- Физика наносистем и наноразмерных явлений,

- Физика комплексных жидкостей и полимеров,
- Биофизика и фармакология,
- Прикладное материаловедение и инженерные науки.

Основные научные тематики в рамках этих направлений:

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

Особое внимание будет уделено развитию комплекса спектрометров модернизированного реактора ИБР-2, включая создание новых спектрометров, модернизацию существующих спектрометров и развитие нейтронных методов исследования конденсированных сред:

- Разработка и создание элементов основной конфигурации спектрометра малоуглового рассеяния и имиджинга на 10 канале.
- Разработка и создание элементов нейтронной системы нового спектрометра неупругого рассеяния в обратной геометрии, стадия I (проект в рамках темы).
- Развитие нейтронной и детекторной системы нового дифрактометра ДН-6 для исследования микрообразцов, направленное на улучшение технических параметров и расширение доступного диапазона высоких давлений.
- Улучшение технических параметров и расширение экспериментальных возможностей многофункционального рефлектометра ГРЭИНС (запуск нового прерывателя нейтронного пучка, развитие электрохимических и жидкостных ячеек для проведения экспериментов).
- Модернизация действующих спектрометров реактора ИБР-2 (ФДВР, РТД, ДН-12, ЮМО, ФСД, РЕФЛЕКС, РЕМУР, СКАТ, ЭПСИЛОН) направленная на улучшение их технических характеристик – увеличение светосилы, улучшение фоновых условий, усовершенствование системы сбора данных и расширение имеющихся экспериментальных возможностей.
- Создание макетного варианта спектрометра малоуглового спин-эхо рассеяния на 9 канале.
- Улучшение технических характеристик спектрометра радиографии и томографии на 14 канале (пространственного разрешения, радиационной устойчивости детекторной системы).
- Усовершенствование корреляционного спектрометра FSS на 13 канале ИБР-2 и улучшение его технических параметров. Дальнейшее развитие корреляционного RTOF-метода.
- Развитие нейтронных методов исследования конденсированных сред, включая спин-эхо, нейтронные стоячие волны, расщепление нейтронной

волны, нейтронный магнитный резонанс, радиографию, томографию и др. методики.

- Разработка методов нейтронного рассеяния для in-operando мониторинга и изучения электрохимических материалов и интерфейсов.

Другим первоприоритетным направлением деятельности по теме также будет реализация программы пользователей на базе комплекса спектрометров реактора ИБР-2.

Работа в рамках темы будет в основном проводиться на базе комплекса спектрометров модернизированного реактора ИБР-2, некоторые отдельные эксперименты будут выполняться в других российских и зарубежных нейтронных и синхротронных центрах. Помимо методов рассеяния нейтронов, для ряда исследований будут использоваться комплементарные методы оптической и рентгеновской спектроскопии.

Финансирование работ по теме будет определяться лимитами, утвержденными в рамках 7-летнего плана стратегического развития ОИЯИ в области физики конденсированных сред.

Сотрудничество по теме включает более 100 исследовательских организаций из стран-участниц ОИЯИ – Азербайджан, Болгария, Беларусь, Вьетнам, Казахстан, Россия, Польша, Чехия, Словакия, Румыния, Молдова, Монголия, Украина, Узбекистан, ассоциированных членов – Египет, Германия, Венгрия, ЮАР, Сербия, и других стран – Латвия, Франция, Норвегия, Швейцария, Тайвань, Великобритания, Япония.