

## ПРЕДИСЛОВИЕ

1. НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ	1
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД	1
НЕЙТРОННАЯ ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА	17
ПЕРСПЕКТИВНЫЕ РАЗРАБОТКИ И СОЗДАНИЕ ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРОВ ИБР-2	30
2. ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ	<b>40</b>
3. ПУБЛИКАЦИИ	43
4. ПРЕМИИ И СТИПЕНДИИ	64
5. СОБЫТИЯ	67
6. СТРУКТУРА	71
7. МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С	
ПОЛЬЗОВАТЕЛЯМИ	75
8. ЛНФ ИМ. И.М. ФРАНКА И СМИ	77
9. НАШИ ЮБИЛЯРЫ	78
ВЛАДИМИР КАЗИМИРОВИЧ ИГНАТОВИЧ	
ЗИГФРИД МАТТИС	
	<b>8</b> E
	00



### ПРЕДИСЛОВИЕ

Мы хотели бы предложить вниманию читателей научный отчет Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка за 2012 год. Первая часть отчета содержит краткий обзор результатов экспериментальных и теоретических работ по главным научным направлениям Лаборатории – физика конденсированных сред, нейтронная ядерная физика, прикладные исследования и разработка и создание элементов нейтронных спектрометров для исследования конденсированных сред. Вторая часть включает в себя отчеты по модернизации импульсного реактора ИБР-2 и развитию нейтронного источника ИРЕН. Представлены также список публикаций за 2012 г., информация о семинарах и конференциях, организованных в ЛНФ, и данные о структуре персонала ЛНФ. В последней части содержатся экспериментальные отчеты, более подробно освещающие ряд основных направлений исследований, проводящихся в Лаборатории.

В 2012 главными достижениями Лаборатории являются:

• получение лицензии на регулярную эксплуатацию реактора ИБР-2М;

• возобновление пользовательской программы на спектрометрах ИБР-2М;

• успешный запуск холодного замедлителя нейтронов на реакторе ИБР-2М.

Оба нейтронных источника ЛНФ, – реактор ИБР-2М и установка ИРЕН, – отработали приблизительно по 1500 часов на физический эксперимент.

Лаборатория имеет соглашения о сотрудничестве в области нейтронных исследований почти с 200 научными институтами и университетами из 39 стран мира. Существенный вклад в это сотрудничество вносят страны-участницы ОИЯИ.

В ЛНФ трудятся более 400 сотрудников. В научном штате Лаборатории состоят 71 кандидат и 19 докторов наук. В лаборатории работают 70 сотрудников из стран-участниц ОИЯИ (помимо Российской Федерации), из них более двух третей моложе 35 лет.

Организация ежегодных конференций и школ по тематике Лаборатории помогает привлечь на работу молодых специалистов, что является одной из приоритетных задач дирекции ЛНФ.

Можно с уверенностью сказать, что Лаборатория продолжает успешное и динамичное развитие, выполняя научные исследования в интересах стран-участниц ОИЯИ.

В 2012 году исполнилось 80 лет со дня открытия нейтрона Дж. Чедвиком. В честь этого знаменательного события на обложке годового отчета нашей лаборатории помещен портрет Дж. Чедвика и фрагменты его статьи, принесшей ему Нобелевскую премию по физике.

А.В. Белушкин

Директор





В конце 2012 года, действующая дирекция лаборатории завершила свой срок работы. Ее членами были:



БЕЛУШКИН Александр Владиславович Директор Лаборатории с 2001

### Заместители директора по научной работе

ШВЕЦОВ Валерий Николаевич

c 2001



САНГАА Дэлэг

c 2009

куликов

Отилиа Ана



КОЗЕНКОВ Сергей Вячеславович Заместитель директора по общим вопросам *с 1989* 



ВИНОГРАДОВ Александр Витальевич Главный инженер с 2007

Ученый секретарь с 2008





### ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Основные цели исследований по теме состояли в изучении структуры, динамики и микроскопических свойств наносистем и новых материалов, интересных с точки зрения фундаментальных исследований, или имеющих большое значение для развития нанотехнологий в сфере электроники, фармакологии, медицины, химии, современной физики конденсированных сред и смежных областей методами рассеяния нейтронов и комплементарными методами. В первой половине 2012 г. до момента получения лицензии на регулярную эксплуатацию реактора ИБР-2М научная экспериментальная работа сотрудников НЭО НИКС проводилась в нейтронных и синхротронных центрах в России и за рубежом. Она осуществлялась согласно существующим соглашениям о сотрудничестве, а также в соответствии с принятыми заявками на эксперимент. С мая 2012 г. возобновлено проведение исследовательских работ на базе реактора ИБР-2М в соответствии с пользовательской программой ЛНФ ОИЯИ. Также проводились работы по модернизации существующих и созданию новых спектрометров в соответствии с планами развития комплекса спектрометров реактора ИБР-2М. Основное внимание было уделено реализации первоприоритетных проектов дифрактометра исследования микрообразцов (создание нового для ДH-6, многофункционального рефлектометра ГРЭЙНС, модернизация комплекса спектрометров для геофизических исследований СКАТ/Эпсилон).

В рамках исследований по теме сотрудники отдела НИКС поддерживали широкие связи со многими научными организациями в странах-участницах ОИЯИ, а также других странах. Как правило, сотрудничество оформлялось совместными протоколами или соглашениями. В России наиболее активное сотрудничество велось с близкими по тематике организациями, такими как НИЦ КИ, ПИЯФ, МГУ, ИФМ УрО РАН, ИК РАН, ИЯИ РАН и др.

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

- Исследование структуры и свойств новых кристаллических материалов и наносистем методом дифракции нейтронов;
- Исследование магнитных коллоидных систем в объеме и на границах раздела;
- Исследование структуры углеродных наноматериалов;
- Магнетизм слоистых наноструктур;
- Исследование надмолекулярной структуры и функциональных характеристик биологических, коллоидных и полимерных нанодисперсных материалов;
- Исследования наноструктуры и свойств липидных мембран и липидных комплексов;
- Исследование атомной динамики наносистем и материалов методом неупругого рассеяния нейтронов;
- Исследование текстуры и свойств минералов и горных пород;
- Анализ внутренних напряжений в объемных материалах и изделиях.

### I. Научные результаты.

### Структурные исследования новых оксидных и наноструктурированных материалов.

Проведено исследование кристаллической и магнитной структуры дейтерированного гербертсмитита  $ZnCu_3(OD)_6Cl_2$  методом нейтронной дифракции, а также магнитной восприимчивости, в диапазоне высоких давлений 0 - 10 ГПа и температур 1.5 - 300 К [1]. Данное соединение проявляет наиболее идеальную реализацию в кристаллических структурах магнитной двумерной Кагоме решетки ионов Cu со спином s =  $\frac{1}{2}$ , имеющей основное состояние квантовой спиновой жидкости. Обнаружено, что приложение давления P = 2.5 ГПа приводит к



разрушению состояния квантовой спиновой жидкости в  $ZnCu_3(OD)_6Cl_2$  и появлению антиферромагнитного упорядочения с температурой Нееля  $T_N = 6$  К и магнитной элементарной ячейкой  $\sqrt{3} a \times \sqrt{3} a$  (**рис. 1**). В области фазового перехода наблюдались аномалии барического поведения межатомных расстояний Cu-O и углов Cu-O-Cu, Cu-Cl-Cu. Проанализированы возможные механизмы данного явления.



Рис. 1. a): магнитная фазовая диаграмма гербертсмитита, полученная на основе измерений магнитной восприимчивости. b): магнитный вклад в нейтронного дифракционного **участок** спектра Р = 2.7 ГПа, полученный гербертсмитита при вычитанием спектра, измеренного при T = 50 К из спектра, измеренного при T = 1.4 К. Показаны экспериментальные точки и расчетные кривые для двух возможных моделей магнитной структуры.

На дифрактометре ФДВР проведено исследование структурного фазового перехода в феррите меди CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, который происходит с понижением симметрии высокотемпературной кубической фазы (пр. гр. Fd3m) до тетрагональной (пр. гр. I4<sub>1</sub>/amd). Было установлено, что структурный фазовый переход из тетрагональной фазы в кубическую (рис. 2) протекает в 400 – 440 °C. интервале температур при довольно широком этом наблюдается сосуществование обеих структурных фаз, которое имеет равновесный характер. Исследованный состав является полностью инвертированной шпинелью в кубической фазе, а в тетрагональной фазе параметр инверсии не превышает нескольких процентов ( $x = 0.06 \pm 0.04$ ). В то же время, возникающая при охлаждении фаза имеет классическую величину



**Рис. 2.** Эволюция дифракционных спектров от CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> при нагреве от 340 до 500 °C, свидетельствующая о структурном фазовом переходе из тетрагональной фазы в кубическую (вверху). Ось «Номер канала» соответствует межплоскостному расстоянию. Индексы Миллера дифракционных пиков указаны со значком T в тетрагональной фазе и C в кубической фазе. Зависимости межатомных расстояний катион-кислород в тетраэдрах и октаэдрах от температуры, определенные при обработке по методу Ритвельда (внизу). В  $P_{\rm C}$  фазе тетраэдры АО<sub>4</sub> и октаэдры ВО<sub>6</sub> регулярны, тогда как в  $P_{\rm T}$  фазе октаэдры вытягиваются вдоль тетрагональной оси (B-O1) и сжимаются в перпендикулярной плоскости (B-O2).



тетрагонального искажения (ү ≈ 1.06). Характер температурных изменений параметров структуры при переходе из кубической в тетрагональную фазу позволяет говорить о том, что в его основе лежит ян-теллеровское искажение (Cu,Fe)O<sub>6</sub> октаэдров (**рис. 2**), но не взаимная миграция атомов меди и железа.

На дифрактометре ФДВР впервые проведены дифракционные ex-situ и in-situ эксперименты в реальном времени по изучению структурных изменений, происходящих в химических источниках электрического тока (литиевые аккумуляторы) с рабочим веществом – оливином, допированным ванадием (LiFePO<sub>4</sub>+xV, x = 0, 0.75%, 2% и 5%) в ходе их заряда/разряда (redox-процессов) в режиме высокого разрешения ( $\Delta d/d \sim 0.001$ ). Сверхмалое допирование ванадием позволяет значительно улучшить свойства оливина (LiFePO<sub>4</sub>) как катодного материала – электропроводность возрастает в 10<sup>8</sup> раз, а емкость увеличивается на 33%. В режиме in-situ в процессе заряда/разряда исследовались две батареи, в одной из которых LiFePO<sub>4</sub> был на 0.75% допирован ванадием (рис. 3). Во время заряда батареи элементарная ячейка графита (выполняет роль анода) увеличивается из-за внедрения в структуру графита ионов лития и наоборот, уменьшается до стандартных размеров в процессе разряда и, соответственно, миграции ионов лития обратно в электрод LiFePO<sub>4</sub>. Расширение и восстановление кристаллической решетки графита, а также количество внедренных ионов лития в Li<sub>x</sub>C сказываются на положении и интенсивности некоторых дифракционных рефлексов от графита. Четко зафиксирован фазовый переход LiFePO₄ ↔ FePO₄: при d ~ 2.4 Å в заряженном аккумуляторе появляются два сильных дифракционных рефлекса, характерные для фазы FePO<sub>4</sub>. После нескольких циклов заряда/разряда батареи не замечено деградации кристаллической структуры рабочих электродов.



Рис. 3. Вверху: эволюция нейтронных дифракционных спектров, полученных от литиевого источника тока в процессе трех циклов заряда/разряда. Каждый полный цикл заряда/разряда занимал около 20 часов. Интенсивный пик при *d* ≈ 3.5 Å принадлежит графитовому аноду, пики в области 2-2.5 Å принадлежат оливину. Внизу: Иллюстрация миграции ионов лития во время разряда/заряда Li-ion батареи на основе LiFePO<sub>4</sub> (катод, справа). В процессе заряда ионы лития внедряются в решетку графита, заставляя ее расширяться. И, наоборот, во время разрядки батареи, ионы лития выходят из решетки графита и его стандартные структурные параметры восстанавливаются. Из работы Janina Molenda and Marcin Molenda (2011).

Методом нейтронной дифракции при комнатной температуре исследованы особенности кристаллической структуры кристаллофосфоров Lu<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>:Ce<sup>3+</sup>, полученных коллоиднохимическим методом и изучено влияние особенностей высокотемпературного отжига на кристаллическую структуру и спектрально люминесцентные свойства этих образцов. Результаты исследования указывают, что при определенной температуре отжига наблюдается замедление роста межатомных связей кислородного октаэдра и роста интенсивности люминесценции. Предполагается, что подобное явление связано с особенностями формирования дефектной структуры в Lu<sub>3</sub>Al<sub>5</sub>O<sub>12</sub>:Ce<sup>3+</sup> и возможным осаждением церия в другие



кристаллографические позиции, отличные от позиций лютеция Lu. Этот факт подтверждается появлением дополнительных пиков на спектрах люминесценции, связанных с возникновением новых каналов оптической релаксации.

Проведено исследование влияния условий синтеза на структуру и сорбционные свойства наносорбентов на основе титана (**рис. 4**). Определена морфология синтезированных наносорбентов при помощи растрового электронного микроскопа. Изучена кристаллическая структура и сорбционные свойства при помощи порошковой рентгеновской дифракции.



#### Исследования магнитных жидкостей и наночастиц.

температурах, после сорбции цезия – справа.

nual Report

Методом малоуглового рассеяния нейтронов изучены растворы магнетоферритина — искусственного биологического комплекса на основе апоферритина, в полости которого инициируется синтез оксидов железа с помощью химических методов. С помощью метода вариации контраста определена средняя плотность длины рассеяния магнетоферритина и относительный состав комплекса, в зависимости от загрузочного фактора LF (Loading Factor) — среднего числа атомов на один комплекса с ростом LF, что, возможно, связано с частичным разрушением оболочки апоферритина (**рис. 5**) [2].

В рамках комплексного исследования влияния магнитных наночастиц на структуру амилоидных агрегатов проведен анализ структуры стабилизированных фибриллярных амилоидов лизоцима яичного белка в кислой среде методами малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР) в водных растворах, а также атомно-силовой микроскопии при адсорбции на поверхность слюды [3].



Показано, что полученные кривые малоуглового рассеяния нейтронов (**рис. 6**) согласуются со спиральной структурой протофиламентов, образующих амилоидные фибриллы. Для анализа предложено простое приближение, которое позволяет определять период повторяемости (шаг) и среднюю толщину соответствующей спирали, а также эффективный радиус основных структурных единиц, составляющих спираль. Обнаружен «изотоп-эффект» в структуре спирали при использовании тяжелой компоненты в растворителе (смеси H<sub>2</sub>O/D<sub>2</sub>O), проявляющийся в существенном увеличении диаметра спирали при переходе к раствору со значительным содержанием D<sub>2</sub>O.



аналогичных агрегатов, адсорбированных на поверхность слюды из D<sub>2</sub>O.

По данным малоуглового рассеяния нейтронов (установка Yellow Submarine, Будапештский нейтронный центр, и SANS-II, Институт Поля Шеррера) получены значения структурных параметров различных компонент магнитных жидкостей на основе декалина с избытком поверхностно-активного вещества (олеиновая кислота). Показано, что при этом структурные изменения касаются преимущественно характера взаимодействия свободных



молекул ПАВ в объеме магнитных жидкостей. Однако увеличение притяжения между молекулами ПАВ в присутствии частиц магнитных жидкостей существенно меньше в декалине, чем в случае аналогичных систем на основе бензола. Это коррелирует с тем фактом, что в отличие от бензола, магнитная жидкость на декалине остается агрегационно-стабильной в диапазоне концентраций избытка олеиновой кислоты вплоть до 25% (об.). Таким образом, с точки зрения микроструктуры магнитных жидкостей показано, что взаимодействие растворитель - ПАВ играет существенную роль в стабилизации данных систем при избыточном содержании ПАВ.

Проведены эксперименты по рефлектометрии нейтронов (установка NREX, реактор FRM-II, Мюнхен, с горизонтальной плоскостью образца) для изучения структурной организации наночастиц двух магнитных жидкостей на границе раздела с кристаллическим кремнием. Исследовалось влияние введения биосовместимого полимера (полиэтиленгликоль) в состав частиц исходной электростатически-стабилизированной магнитной жидкости (магнетит, покрытый олеатом натрия, в воде).

#### Исследование углеродных наноматериалов.

Продолжено теоретическое описание кинетики роста кластеров в  $C_{60}$ /NMП и других полярных растворах [4]. Для разработанных ранее двух моделей агрегации фуллерена выполнены экстраполяции по времени численных решений кинетических уравнений. Это позволило впервые получить стационарные функции распределения кластеров по размерам, f(n), для конечных стадий роста кластеров (**рис. 7**). Для одной из моделей стационарные функции f(n) хорошо описываются так называемыми функциями Слёзова для классической коалесценции. Для второй модели было показано, что среди простых функций распределения наилучшей подгонкой является логнормальное распределение. Расчеты f(n) были выполнены для разных значений параметров моделей  $\tau$  и  $\tau_c$ , соответствующих временам релаксации характерных процессов в растворе.

Выполнен расчет эволюции кривых МУРН для различных моделей кластерного роста в растворе С<sub>60</sub>/NMП (**рис. 7**). В случае модели, для которой комплексообразование С<sub>60</sub>-NMП рассматривается как переход молекул фуллерена в состояние пересыщенного раствора, видно, что профили МУРН не соответствуют экспериментальным данным. Данный результат обусловлен малой полидисперсностью *f*(*n*), что может объясняться ошибкой экстраполяции (в случае второй модели эта ошибка значительна, поскольку даже логнормальное распределение плохо описывает функции распределения). Работа выполнялась в сотрудничестве с Университетом Улан-Батора (Улан-Батор, Монголия).

Также продолжены экспериментальные исследования свойств растворов  $C_{60}$  в смешанных растворителях. Так, для смешанного раствора  $C_{60}$  / NMП / толуол обнаружен необратимый сольватохромный эффект, который заключается в существенном различии в поведении спектров поглощения видимого и ультрафиолетового диапазонов в зависимости от относительного состава растворителя для разных последовательностей приготовления раствора. Если при добавлении NMП в начальный раствор  $C_{60}$  / толуол можно говорить о классическом сольватохромизме (пропорциональный сдвиг характеристических пиков поглощения), то в обратном случае при добавлении толуола в начальный раствор  $C_{60}$  / NMП наблюдается селективный сольватохромизме: толуол начинает проникать в сольватную оболочку только при очень высоком (> 95%) содержании в объеме растворителя. Такое поведение связано с сильным различием в диэлектрических свойствах двух типов молекул растворителя. Важной компонентой исследования явилось обнаружение зависимости в С<sub>60</sub> / NMП.





#### Исследование магнитных наноструктур.

Проведено исследование пропускания неполяризованных нейтронов некомпланарной структурой в зависимости от порядка следования компонент намагниченности на пути распространения нейтронной волны. В эксперименте нейтроны отражались от двух зеркал, намагниченности которых перпендикулярны друг другу и лежат в плоскости отражающих зеркал. Магнитное поле направлено перпендикулярно векторам намагниченностей. На рис. 8 показаны коэффициенты последовательного отражения нейтронов от двух зеркал для случаев двух противоположных направлений магнитного поля. Видны глубокие провалы, связанные с интерференцией волн на толщине плёнки, а также осцилляции, связанные с прецессией нейтронов вокруг вектора напряжённости магнитного поля. На **рис. 8** также показана относительная разность коэффициентов отражения. Размах колебаний разности соответствует поляризации пучка при отражении нейтронов, равной 0.2-0.25. Период колебаний составляет 0.7 Å, что соответствует периоду ларморовской прецессии в магнитном поле 27 Э. Таким образом, экспериментально показано, что пропускание пучка поляризованных нейтронов для некомпланарной структуры зависит от взаимной ориентации трёх магнитных моментов.





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

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследован процесс формирования мицелл светочувствительным поверхностно-активным веществом азобензол триметиламмоний бромидом (АзоТАБ). В транс-конформации молекула АзоТАБ формирует заряженные эллипсоидальные мицеллы. При увеличении концентрации АзоТАБ размер и агрегационное число мицелл растут. Повышение температуры вызывает уменьшение этих параметров. Степень диссоциации брома  $\xi$ , напротив, падает с увеличение концентрации АзоТАБ и растет с повышением температуры. При облучении ультрафиолетовым светом форма кривых рассеяния резко изменяется в измеренном диапазоне векторов рассеяния q, что указывает на реорганизацию агрегатов АзоТАБ. Возможно, что в данном случае АзоТАБ формирует сильно анизотропные объекты. Показано, что добавление светочувствительного сурфактанта к нуклеиновым кислотам вызывает их компактизацию. При этом эффект компактизации также светочувствительным. Светочувствительность объясняется является изменением комформации сурфактанта в зависимости от длины волны облучения. Так, облучение системы ультрафиолетовым светом меняет конформацию молекулы АзоТАБ из транс- в цис-, что способствует отрыву АзоТАБ от РНК/ДНК и декомпактизацию полинуклеотидных цепей.

Проведены исследования фазового перехода из жидкокристаллической фазы в рипплфазу в водных растворах липидных мембран DPPC/D<sub>2</sub>O с помощью малоуглового рассеяния нейтронов и волюметрических P-V-T – измерений одновременно (**рис. 9**). Определены толщина липидного бислоя (по данным МУРН) и изменение его объема (по данным волюметрии). Благодаря достигнутой высокой точности определения изменения объема удалось оценить изменение площади молекулы липида в результате фазового перехода, которое составило 6 Å<sup>2</sup>, в соответствии с результатами других работ.

Проведено исследование влияния соли на структуру липидных мембран на примере системы DMPC/H<sub>2</sub>O/CaCl. Показано, что с увеличением концентрации ионов кальция происходит переход мультислойных мембран в несвязанное состояние, как в гель, так и в жидкокристаллической фазах. Полученные результаты свидетельствуют о продолжительном (не резком) характере перехода. Подъем малоугловой части кривых с ростом концентрации также свидетельствует в пользу этой гипотезы. Анализ кривых малоуглового рассеяния для





мультислойных ДМФХ мембран показал, что разрушение ламеллярной структуры и образование однослойных везикул имеет место при  $C_{Ca2+} \sim 0.3$  mM в  $L_{\beta'}$  фазе и при  $C_{Ca2+} \sim 0.4$  mM в  $L_{\alpha}$  фазе.



Значения Сса2+ зависят как от фазового состояния системы, так и от концентрации самого липида. Детальный анализ дифракционных пиков позволил уточнить численные значения концентрации ионов Ca2+, необходимые для перехода исследуемой системы из связанного состояния в несвязанное. Показано, что в области предперехода уменьшение концентрации липида не влияет на период повторяемости липидных мембран. Толщины липидных бислоев спонтанно образованных из мультислойных мембран в области перехода состояние соответствуют толщинам однослойных системы в несвязанное везикул. Это является приготовленных методом экструдирования. прямым доказательством образования однослойных везикул при разрушении ламеллярной фазы мультислойных ДМФХ мембран как в гель, так и в жидкокристаллической фазах. Дальнейшее добавление ионов кальция приводит к частичному слипанию одиночных везикул.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей исследованы мультислойные липидные мембраны DPPC (1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine) и смеси ДПФХ/ПОФХ (1-palmitoyl-2-oleylphosphatidylcholine) в избытке воды. Получены температурные зависимости периодов повторяемости липидных бислоев в диапазоне от 3 до 60 °C. Было показано, что добавление ПОФХ в систему ДПФХ/Н2О в пределах экспериментальной ошибки не изменяет температуру главного фазового перехода для ДПФХ.



Наблюдаемое фазовое разделение происходит и в системе ДПФХ/ПОФХ/Н<sub>2</sub>О до температуры предперехода (гель-риппл фаза) мультислойных мембран ДПФХ. Обнаружено, что гель-фаза для смеси ДПФХ/ПОФХ имеет меньший период повторяемости, чем для чистого ДПФХ. Данный эффект существенно выше для образцов, измеренных с помощью МУРР.

Проведено исследование модельных липидных мембран, моделирующих липидную составляющую слизистой оболочки ротовой полости млекопитающих на основе церамида-6 методом нейтронной дифракции (рис. 10). Ранее было показано, что модельная мембрана oral stratum corneum (OSC) составом церамид 6/холестерин/сульфат холестерина/пальмитиновая кислота/ДПФХ/ДПФЭ/сфингомиелин 37 °C 99 % при и относительной влажности характеризуется сосуществованием нескольких структурных фаз с периодами повторяемости: 55, 46 и 58 Å. В результате проведенных экспериментов на ориентированных образцах в избытке воды, обнаружено, что одна из структурных фаз демонстрирует поведение, схожее с модельной мембраной stratum corneum, показывая незначительное увеличение периода повторяемости в течение первых нескольких минут гидратации с 44,9 до 45,6 А. Поскольку общепризнано, что низкую гидратацию в SC обуславливают в основном церамиды, данные позволяют предположить, что в липидной составляющей природной слизистой оболочки присутствуют церамид-обогащенные домены и именно они являются ответственными за контроль проницаемости.



мембраны DPPE/DPPC/SM в сухом и гидратированном состоянии. Мембрана полностью гидратирована через 2 минуты после помещения в камеру с водой (слева). Дифракционные спектры от модельной мембраны OSC = cer6/chol/PA/cholS/PL = 28/23/15/8/26 (PL= DPPE/DPPC/SM) в процессе гидратации (справа).

Исследована методом МУРН морфология смешанных двойных систем ДМФХ/ холат натрия (основа трансдермальных везикулярных переносчиков лекарств). Показано, что в диапазоне температур 10-60°С происходит переход из ламеллярной фазы в мицелярную при 15°С, в диапазоне температур 15-25°С система существует в мицеллярной фазе и при температуре 25°С происходит переход в ламеллярную фазу. Выказано предположение, что основой такой необычной температурной зависимости двойной системы ДМФХ/ холат натрия является наличие минимум ККМ холата натрия в области температур 15-25°С.

ual Report

#### Атомная и молекулярная динамика.

Проведены квантово-химические расчеты динамики решетки оксида ванадия в полиморфных фазах оксида ванадия  $\alpha$ -V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и  $\beta$ -V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [5]. Оксиды ванадия широко используются в тонко-пленочных электрохимических приборах и в качестве катода литиевых батарей в силу высокой плотности запасенной энергии и устойчивости к циклам перезаряда. Рассчитанные колебательные спектры сравнивались с экспериментальными рамановскими спектрами, установлено удовлетворительное согласие между ними. Анализ рассчитанных спектров позволил провести соотнесение экспериментальных линий и, впервые, получить жесткую привязку «структура-спектр» для двух полиморфов пентоксида ванадия. Рассчитана энергия активации фазового перехода  $\alpha$ -V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>  $\rightarrow \beta$ -V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и проведены дополнительных расчеты, направленные на выявление возможного механизма фазового перехода  $\alpha$ -V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

Проведен нейтронно-динамический эксперимент на жидком натрии (T = 105-420°C) и расплаве натрий – водород (T = 420°C, концентрация водорода C ~ 0.04 % ат). Установлено, что водород присутствует и диффундирует в расплаве в форме гидрида натрия NaH. На основе анализа ширин пиков квазиупругого рассеяния получена информация о диффузионных свойствах вещества (**рис. 11**).



Исследована температурная зависимость фононных плотности состояний самого тугоплавкого металла вольфрама, представляющего интерес для реакторных приложений. Из экспериментальных данных, впервые в прямом эксперименте определен спектр частот кристаллической решетки при температурах 293 и 2400 К. Спектр частот при температуре 2400 К смещается в сторону более низких частот в силу эффекта ангармонизма колебаний, сохраняя при этом основные особенности детальной структуры, характерные для ОЦК решетки.

#### Прикладные работы.

К прикладным работам в отделе НИКС ЛНФ традиционно относятся экспериментальные исследования текстуры горных пород и минералов, внутренних напряжений в них и определение внутренних напряжений в объемных материалах и изделиях, включая инженерные материалы и детали машин и устройств. В основном, эти исследования ведутся с помощью дифракции нейтронов.

Реализован новый комплексный подход к исследованию физических свойств слоистых текстурированных горных пород, основанный на создании модельных образцов с заданными характеристиками, приближенных по своей внутренней структуре и кристаллографической текстуре к реальным объектам, сформировавшимся в естественных условиях литосферы Земли. С этой целью проведены измерения скоростей квазипродольных упругих волн на двухфазных, слоистых модельных образцах в форме шара, изготовленных из минеральных порошковых наполнителей (мусковит, кварц) и связующего послойного эпоксида (**рис. 12**). Установлен различный тип связи слоистой структуры в образцах с мусковитовым и кварцевым



наполнителями и характером пространственного распределения скоростей квазипродольных ультразвуковых волн, что обусловлено самим процессом изготовления моделей (осаждением) [6].



ЦНИИТМАШ Совместно С в ферритно-мартенситных жаропрочных сталях 10Х9К3В2МФБР и Р91 были изучены процессы образования и распада мартенсита после нормализации с температуры 1050°С и последующих отжигов в интервале температур 500-840°С. Такие стали являются перспективными материалами для тепловой и атомной энергетики, поскольку они могут применяться в энергетических установках при температурах до 650°С и давлении пара до 35 Па, а их радиационная стойкость достигает 200 сна. Обнаружена сильная анизотропия ширин дифракционных пиков (рис. 13), обусловленная большой плотностью дислокаций, возникающих при мартенситном превращении, определены величины микродеформаций и плотность дислокаций и их уменьшение по мере увеличения температуры и времени отжига. Измеренные спектры МУРН выявили большое поверхностное фрактальное рассеяние в этих мартенситах. При температуре отжига 600°C, 1 час наблюдается интенсивное выделение объемных фрактальных частиц карбидов и нитридов. При дальнейшем отжиге карбиды укрупняются и уходят из поля зрения МУРН. При этом восстанавливается рассеяние на поверхностных фракталах вплоть до высоких температур отжига.

С помощью дифракции синхротронного излучения проведены измерения локальной текстуры в сечениях ряда образцов из магниевого сплава МА21, полученного методом интенсивной пластической деформации по технологии равноканального углового прессования (РКУП). Этот метод деформирования известен как способ получения структур с субмикрокристаллическим и нанометрическим размером зерен. Установлено, что текстура исходного образца, подвергнутого деформированию методом РКУП, характеризуется двумя сильными компонентами (базовой и призматической), сформировавшимися в результате экструзии с противодавлением. При деформировании по технологии РКУП базовая компонента





10Х9К3В2МФБР в зеркальной печи на ФСД при T=600°С (слева). Измеренный спектр стали 10Х9К3В2МФБР с характерно уширенными дифракционными пиками. На вкладке показано изменение положения и формы дифракционного пика (211) с ростом температуры (справа). Внизу: Релаксация микродеформаций в стали 10Х9К3В2МФБР с увеличением температуры отжига.

сдвигается на 45° относительно направления экструзии, что может быть объяснено реализацией деформационного механизма простой сдвиг.

### II. Методические результаты.

Завершено создание основной конфигурации нового дифрактометра для исследования микрообразцов ДН-6 на канале 6б реактора ИБР-2 (**рис. 14**). Основные элементы дифрактометра – зеркальный вакуумный нейтроновод, механическая часть, детекторная система, смонтированы на канале 6б. Проведены первые научно-методические эксперименты, которые показали увеличение светосилы на порядок по сравнению с аналогичным дифрактометром ДН-12.

Завершена масштабная модернизация дифрактометров СКАТ/Эпсилон и НЕРА-ПР на каналах 7а-1, 7а-2, 7-б (**рис. 15**), основной задачей которой была замена зеркальных нейтроноводов, установка прерывателей пучка и  $\lambda$ -прерывателей, модернизация детекторной системы, электроники накопления и окружения образца. На спектрометре НЕРА-ПР интегральный нейтронный поток на образце увеличился примерно в 2 раза, поток в области холодных нейтронов – в 4 раза (в режиме работы с криогенным замедлителем). Аналогичные данные по СКАТ/Эпсилон уточняются. Установки сданы в эксплуатацию.





Для расширения экспериментальных возможностей дифрактометра Эпсилон приобретена камера высокого давления типа "Париж-Эдинбург".



**Рис. 15.** Спектрометры СКАТ, ЭПСИЛОН и НЕРА на пучках 7а-1, 7а-2 и 7в реактора ИБР-2М (слева). Спектр падающих нейтронов, измеренный на образце ванадия на спектрометре НЕРА-ПР до модернизации (черная линия) и после модернизации (красная линия) – справа.

Продолжены работы по созданию нового многофункционального рефлектометра GRAINS на реакторе IBR-2M, канал 10. Выполнена доработка узлов системы формирования пучка в связи с обнаруженными конструкционными недостатками. Проведены завершающие работы по созданию биологической защиты, ведутся электротехнические работы, необходимые для начала пуско-наладочных работ на установке. Продолжены работы по реконструкции дифрактометра ДН-2 в дифрактометр для исследований в режиме реального времени.





Установлены прерыватель пучка, зеркальный нейтроновод, двухкоординатный ПЧД с чувствительной площадью регистрации 200×200 мм. Начаты первые тестовые измерения.

Завершен последний этап реконструкции головной части нейтроноводной системы ФДВР. Получен высокий вакуум в новом коллиматоре-концентраторе, выводящем пучок нейтронов к фурье-прерывателю. Продолжены работы по разработке алгоритмов и созданию RTOF-анализатора нового типа для режима регистрации всех событий ("list mode"). Пилотный образец анализатора установлен на ФСД и выполнены первые эксперименты, в которых проведено одновременное сравнительное измерение дифракционных спектров с помощью существующего анализатора на базе DSP и нового анализатора "list mode".



Проведена перенастройка элементов рефлектометра РЕФЛЕКС с учетом абсолютных измерений потоков на 9-м канале в 2011 г. Данные измерения показали, что поток тепловых нейтронов на 9-м канале значительно упал по сравнению с показателями 2006 г. Уменьшение потока произошло вследствие изменения габаритов активной зоны и смещения местоположения замедлителей относительно оси 9-го канала. Для исправления ситуации были перенастроены все коллиматоры 9-го канала. Проведенные измерения спектра прямого пучка в



мае-июне 2012 г. показали, что потоки тепловых нейтронов приняли те же значения, какие были до остановки реактора в 2006 г. В течение года продолжалась настройка, выявление и исправления недостатков электроники и программного обеспечения, установленных на рефлектометр в конце 2011 г.

Проведены работы по созданию инфраструктуры вывода нейтронных пучков 13 и 14 каналов ИБР-2М, на которых планируется разместить дифрактометр FSS (перемещаемый из GKSS) и макетный вариант установки для нейтронной радиографии. Установлена биологическая защита, завершаются электротехнические работы.

Завершены измерения рабочих параметров спектрометра ДИН-2ПИ после установки суперзеркального нейтронного концентратора. Оцененный на основе приведенных цифр фактор выигрыша оказался равным G (3 мэВ) ≈ 8.

Достигнут существенный прогресс в развитии зондовой нейтронной микроскопии. Эксперимент проводился с пучком поляризованных нейтронов с длиной волны 4 Å и шириной 2мкм, сформированным слоистым волноводом, который направлялся на аморфную магнитную проволочку (Co<sub>0.94</sub>Fe<sub>0.06</sub>)<sub>72.5</sub>Si<sub>12.5</sub>B<sub>15</sub> диаметром 190 мкм, содержащую два типа магнитных доменов (**рис. 16**). В результате сканирования в направлении перпендикулярно пучку нейтронов был измерен поперечный профиль угла прецессии спина нейтрона в проволочке, что позволяет анализировать её магнитную микроструктуру (распределение магнитной индукции). Экспериментально показано, что за разумное время измерений (порядка 10 часов) можно получить статистически обеспеченные данные о магнитной микроструктуре.

Рассмотрена теоретическая задача по оценке сечения рассеяния тепловых нейтронов на магнитных возбуждениях в ферромагнитных слоях толщиной в несколько десятков нанометров. Предложен способ увеличения сечения за счет резонансного усиления волновой функции нейтрона в слоистой системе, обладающей оптическим потенциалом особой формы.

Рассчитано сечение рассеяния нейтронов с поглощением магнона, просуммированное по всем возможным переданным энергиям, в зависимости от угла рассеяния  $\theta_s$ . Показано, что при достаточной светосиле рефлектометра возможно наблюдение подобных процессов при наборе статистики в течение нескольких суток.

### Литература

- D.P.Kozlenko, A.F.Kusmartseva, E.V.Lukin, D.A.Keen, W.G.Marshall, M.A. de Vries and K.V.Kamenev, "From Quantum Disorder to Magnetic Order in an s=1/2 Kagome Lattice: A Structural and Magnetic Study of Herbertsmithite at High Pressure", Phys. Rev. Lett. v. 108, pp. 187207 (1-5) (2012).
- L.Melnikova, Z.Mitroova, M.Timko, J.Kovac, M.Koralewski, M.Pochylski, M.V.Avdeev, V.I.Petrenko, V.M.Garamus, L.Almasy, P.Kopcansky, Physical characterization of iron oxide nanoparticles in magnetoferritin, *Magnetohydrodynamics* (2012), accepted.
- 3. M.V.Avdeev, V.L.Aksenov, Z.Gažová, L.Almásy, V.I.Petrenko, H.Gojzewski, A.V.Feoktystov, K.Šipošová, A.Antošová, M.Timko, P.Kopčanský, On the determination of the helical structure parameters of amyloid protofilaments by small-angle neutron scattering and atomic-force microscopy, *J. Appl. Cryst.* (2012), accepted.
- T.V. Tropin, N. Jargalan, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, R.A. Eremin, D. Sangaa, V.L. Aksenov, Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: experimental and theoretical study of C<sub>60</sub>/NMP solution, *J. Mol. Liq.* 175 (2012) 4-11.
- Baddour-Hadjean R., Smirnov M.B., Smirnov K.S., Kazimirov V., Gallardo-Amores J.M., Amador U., Arroyode Dompablo M.E., Pereira-Ramos J.P. Lattice dynamics of β-V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>: raman spectroscopic insight into atomistic structure of a high pressure vanadium pentoxide polymorph. Chemistry of Materials, 51, 3194 (2012).
- 6. Никитин А.Н., Локаичек Т., Круглов А.А., Васин Р.Н., Зель И.Ю. Особенности распространения ультразвука через слоистые структурно-неоднородные твердые тела. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, №12. с. 11-18 (2012).



### НЕЙТРОННАЯ ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

В 2012 г. в ЛНФ на импульсном источнике резонансных нейтронов ИРЕН продолжались методические работы по подготовке экспериментов. На выведенных пучках нейтронов были испытаны многодетекторная система «Ромашка»-1, предназначенная для измерения нейтронных сечений, и установка АУРА для исследования (n,e) рассеяния. Активно велись прикладные работы с применением методов нейтронной спектроскопии.

Значительная часть фундаментальных исследований в области нейтронной ядерной физики проводилась на нейтронных пучках ядерных центров России, Германии, Республики Корея, Китая, Франции. Работы велись в традиционных направлениях: изучение процессов нарушения пространственной и временной четности при взаимодействии нейтронов с ядрами; изучение процесса деления; экспериментальное и теоретическое исследование электромагнитных свойств нейтрона и его бета-распада; гамма-спектроскопия нейтронноядерных взаимодействий; структура атомного ядра; получение новых данных для реакторных приложений и для ядерной астрофизики; эксперименты с ультрахолодными нейтронами; прикладные исследования.

#### I. Экспериментальные и методические исследования.

## Создание и усовершенствование многоцелевых детекторных систем для измерений нейтронных сечений на установке ИРЕН ЛНФ.

В рамках сотрудничества между ОИЯИ и Институтом ядерных исследований и ядерной энергетики (ИЯИЯЭ) Болгарской академии наук (БАН) в ЛНФ ведутся работы по созданию и модернизации детекторных систем на основе кристаллов Nal «Ромашка-1» и «Ромашка-2». Предполагается использование этих систем для проведения экспериментов на выведенных нейтронных пучках установки ИРЕН.

«Ромашка-1» – это передвижная, легко перестраиваемая, многодетекторная система для регистрации гамма-лучей, состоящая из 24 сцинтилляционных сборок (6-гранных Nal(TI) кристаллов Amcrys + ФЭУ R1306 с делителем и генератором высоковольтного питания фирмы Hamamatsu) (**рис. 17**). Проведена энергетическая и временная калибровки кристаллов. Создана система накопления данных на основе двух 16-канальных оцифровщиков AFI Electronics,



Рис. 17. «Ромашка»-1 на канале №3 установки ИРЕН.



**Рис. 18.** Зависимость выхода реакции Ta(n, γ) от энергии нейтронов, полученная в измерениях на пролетной базе 30 м.



объединенных в один 32-канальный модуль. Система позволяет записывать на жесткий диск всю информацию, регистрируемую каждым из 24х кристаллов, с последующим ее анализом в режиме off-line. Это позволяет регистрировать как временные, так и энергетические спектры, проводить анализ наложений, множественности совпадений, мертвого времени и других параметров, необходимых для корректного определения нейтронных сечений и параметров нейтронных резонансов. В настоящее время система испытывается на пучке нейтронов канала №3 установки ИРЕН (**рис. 18**).

«Ромашка-2» состоит из двух наборов по 6 монокристаллов Nal(TI) трапецеидального сечения, в форме ромашки, помещены в металлические цилиндры-контейнеры диаметра порядка 30 см. К торцу каждого кристалла оптически соединен электронный умножитель фотонов ФЭУ-110. Система предназначена для определения концентрации радиоактивных элементов в окружающей среде и исследования радиационного захвата нейтронов в экспериментах, проводимых на установке ИРЕН в ЛНФ ОИЯИ путем измерения множественности гамма-лучей распада радиоактивных ядер.

#### Работы в рамках подготовки эксперимента по измерению (n,e) рассеяния.

Завершено размещение установки АУРА на канале №2 ИРЕН. Выполнена комплексная отладка программного обеспечения измерительного модуля с новым 8-канальным временным кодировщиком. При испытании установки АУРА на канале №2 ИРЕН с помощью <sup>3</sup>Не-счетчика (диаметром 30 мм и давлением 8 ат) были выполнены измерения спектра пучка нейтронов, перекрытого серебряным фильтром. Пучок был ограничен парафин-борным коллиматором до диаметра 80 мм. Счетчик располагался вертикально по оси пучка. Площадь пучка, перекрываемая счетчиком, была ~ 22 см<sup>2</sup>. На **рис. 19** показан спектр нейтронного пучка.



На **рис. 20** показан участок спектра с резонансными провалами серебра, который использовался для определения пролетной базы – расстояния между нейтронным источником ИРЕН и местом расположения гелиевого счетчика. Было определено, что база равна 13.75 м, а время между стартовым импульсом и вспышкой ~ 7 мкс. Оцененный интегральный нейтронный поток установки ИРЕН при работе на частоте повторения импульсов 25 Гц составил 1.2·10<sup>11</sup> 1/с. Продолжаются расчеты с целью уточнения поправок для эксперимента по извлечению длины n,е-рассеяния из угловой анизотропии медленных нейтронов, рассеиваемых аргоном (точность поправок должна быть не хуже 10–4). Поправка на различие эффективностей детекторов, регистрирующих нейтроны под углами вперед и назад, уточняется расчетами в реальной

ual Report

геометрии с учетом теплового движения атомов газа. Расчеты проводятся на кластере ЛИТ. Необходимая точность уже получена для 20 энергетических точек в диапазоне энергий нейтронов от 0,0065 до 0,8 эВ. Произведены оценки рассеяния и пропускания нейтронов кадмием, покрывающим стенки коллиматоров, для учета соответствующих погрешностей на отражение нейтронов в детекторы от «своих» и противоположных им коллиматоров.

## Измерение угловой корреляции между спинами осколков деления и направлением вылета мгновенных нейтронов деления.

Известно, что мгновенные нейтроны деления испускаются в лабораторной системе отсчета с сильной анизотропией, которая в основном обусловлена фокусировкой нейтронов по различные осколков деления. Однако попытки направлению вылета анализа экспериментальных данных по анизотропии нейтронного излучения привели к выводу, что анизотропия не может быть полностью описана только кинематической фокусировкой нейтронов, испускаемых движущимся фрагментом. Возможные причины, которые могли бы объяснить наблюдаемые расхождения в экспериментальных данных – это либо существование так называемых «разрывных» нейтронов, либо наличие анизотропной компоненты испускания нейтронов в системе центра масс осколков. Последняя гипотеза проверяется в настоящем исследовании.

Первый поисковый эксперимент, в котором использовалась детекторная система CODIS для регистрации осколков деления и набор нейтронных детекторов DEMON, был проведен в 2003 году в Страсбурге, чтобы проверить возможность такого рода экспериментов. Анализ этого тестового измерения показал, что анизотропия испускания нейтронов по отношению к спину осколка может быть эффективно измерена с помощью тройной корреляции нейтроннейтрон-осколок деления. Однако из-за низкой статистики в этом эксперименте никаких выводов относительно наличия этого эффекта сделать не удалось. Основные эксперименты, в которых была накоплена достаточная статистика, были проведены в Страсбурге в 2009-2011 годах. В 2012 году был проведен анализ этих основных экспериментов. Обработка данных заключалась в определении углов вылета осколков деления, образующих ось деления и в последующем проектировании направлений вылета двух или более нейтронов деления на плоскость, перпендикулярную оси деления. Теоретические расчеты предсказывают наличие угловой анизотропии в этой плоскости, описываемой формулой W=1+a2\*cos(2<sub>0</sub>) (см. рис. 21a). Экспериментальная кривая была получена только для части накопленной статистики, что связано со сложной методикой обработки данных, и демонстрирует наличие анизотропии аналогичного вида (см. рис. 216) с коэффициентом а2, характеризующим величину эффекта, равным (6±3)×10<sup>-3</sup>, что качественно согласуется с теоретическими расчетами.







#### Развитие методов исследования физики деления.

Разработан и применен для исследования спонтанного деления <sup>252</sup>Cf новый метод восстановления энергии мгновенных нейтронов деления, применимый к единичным событиям с измеренным временем пролета нейтрона. Экспериментальные данные были получены с помошью двойной ионизационной камеры с сетками Фриша и детектором быстрых нейтронов на базе сцинтиллятора NE213. В качестве электронной аппаратуры использовалась система восьми синхронных оцифровщиков с амплитудным разрешением 12 бит и частотой дискретизации 100 МГц. Распределения мгновенных нейтронов по множественности и энергии определялись с помощью анализа кинематики процесса деления с использованием измеренных значений кинетических энергий осколков деления, величины угла между направлением движения осколков деления и нейтрона и измеренной величиной времени пролета нейтроном заданной пролетной базы. Идея восстановления энергетических распределений нейтронов основана на том, что измеренная величина времени пролета нейтрона в единичном событии деления трактовалась как средняя величина из известного времяпролетного распределения. Исходя из этого, определялся набор других реализаций данной величины с соответствующими вероятностями и с ними производились вычисления необходимых кинематических характеристик события деления. В результате усреднения по сформированной выборке получались данные, не содержащие систематических погрешностей, связанных с нелинейной зависимостью между измеренными величинами и величинами, полученными с их применением. В процессе анализа экспериментальных данных был разработан новый метод разделения мгновенных нейтронов и уквантов. Метод основан на корреляционных функциях, параметры которых используются для отделения мгновенных у-квантов от мгновенных нейтронов деления. Максимум корреляционной функции (между детекторным сигналом и экспонентой с постоянной времени спада близкой к аналогичному параметру детекторного сигнала) реализуется при задержке экспоненциального сигнала на время, равное времени пролета нейтроном заданной пролетной базы. Цифровая реализация корреляционного алгоритма позволила более чем на порядок повысить фактор подавление мгновенных у-квантов деления. Важным достоинством метода явилось то, что и он имеет единственный параметр для критерия отбора событий.

#### Исследования реакций (n,p), (n,альфа).

Продолжены экспериментальные и теоретические исследования реакций (нейтрон, заряженная частица) на быстрых нейтронах. Измерения проводятся на ускорителях Ван-де-Граафа ЭГ-5 в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ и ЭГ-4.5 Института физики тяжелых ионов Пекинского университета. Данные о реакциях с вылетом заряженных частиц, вызванных быстрыми нейтронами, представляют значительный интерес для изучения механизмов ядерных реакций, структуры атомных ядер, выбора конструкционных материалов и проведения расчетов при создании новых установок для ядерной энергетики.

Проведены измерения реакций <sup>57</sup>Fe(n, $\alpha$ )<sup>54</sup>Cr и <sup>63</sup>Cu(n, $\alpha$ )<sup>60</sup>Co при E<sub>n</sub> ~ 4.0 – 6.5 МэВ, начата обработка данных. Завершена обработка данных из измерений реакций <sup>35</sup>Cl(n, $\alpha$ )<sup>32</sup>P и <sup>40</sup>Ca(n, $\alpha$ )<sup>37</sup>Ar, выполненных при энергии нейтронов 4.5 - 6.5 МэВ.

В рамках статистической модели выполнен систематический анализ сечений реакции (n,α) в энергетическом диапазоне от 6 до 20 МэВ. Из сравнения экспериментальных и теоретических значений сечений был получен фактор кластеризации α-частиц. Показано, что этот фактор зависит от энергии нейтронов.

#### Исследования структуры ядра.

Продолжается анализ экспериментальных данных по интенсивностям двухквантовых каскадов в ~40 ядрах из области масс 39<A<201. Протестировано несколько известных и предполагаемых феноменологических энергетических зависимостей плотности уровней и



радиационных силовых функций каскадных γ-переходов и выявлены наиболее подходящие для максимально точной аппроксимации экспериментальных данных.

Разработка принципиально новых модельных представлений о плотности уровней и ширинах эмиссии  $\gamma$ -квантов необходима прежде всего для оценки потребности в новых экспериментальных данных и определения параметров сверхтекучей фазы ядерной материи. Прежде всего, порога разрыва куперовских пар с точностью не хуже несколько десятков процентов. Это дало бы возможность детально исследовать процесс изменения сверхтекучих свойств такого специфического объекта, как нагретое атомное ядро.

Имеющаяся в настоящее время информация для полномасштабного решения такой задачи недостаточна. Но развитие дальнейших экспериментальных исследований в этом направлении не содержит принципиальных трудностей и вполне может быть реализовано на используемой в физике низких энергий экспериментальной основе.

## Исследования возможности поиска нарушения пространственной четности в дифракции нейтронов на ИБР-2.

Выполнены испытания прототипа установки для поиска нарушения пространственной четности в дифракции нейтронов на 30-ти метровой базе 1-го канала ИБР-2. Испытана система регистрации и накопления информации. Определены параметры пучка нейтронов. Получено указание на маятниковое поведение отраженного пучка нейтронов дифракции, что свидетельствует о хорошем качестве монокристалла бромида калия и пучка нейтронов. На основании полученных результатов сделана оценка времени, необходимого для обнаружения эффекта нарушения пространственной четности в дифракции, на уровне статистической точности 3·10<sup>-4</sup>.

## Исследование взаимодействия релятивистского пучка дейтронов с массивной размножающей мишенью из естественного урана.

В рамках проекта "Е и Т РАО" массивная (512 кг) мишенная сборка КВИНТА из природного урана (диаметр ~ 30 см и длина 65 см) с 10 см свинцовым бланкетом в марте и декабре 2012 г. облучалась на Нуклотроне ОИЯИ дейтронами с энергией от 1 до 8 ГэВ. С помощью детекторов ДЕМОН и ИЗОМЕР-М были измерены характеристики энергетических спектров мгновенных нейтронов и временные спектры запаздывающих нейтронов (3H) деления между импульсами ускорителя. Была успешно проведена оптимизация защиты детекторов с целью снижения уровня различных источников фона. Результаты измерений декабря 2012 года обрабатываются.

Зависимость от энергии  $E_d$  падающих дейтронов относительных полных выходов  $Y_{DN}$  3H, измеренных в марте 2012 года, согласуется вплоть до  $E_d$ = 8 ГэВ с соответствующей зависимостью полных чисел деления  $N_f$ , полученных интегрированием пространственных распределений скорости деления ядер мишени по объему сборки КВИНТА. Указанные распределения были измерены с помощью твердотельных трековых детекторов и независимо методом активации. Было установлено, что величины  $Y_{DN}$  и  $N_f$  (при нормировке на один падающий дейтрон и на один ГэВ его энергии) остаются постоянными в пределах погрешностей эксперимента (10-15)% во всем изученном диапазоне энергий дейтронов. Групповой анализ временных спектров 3H указывает на рост средней энергии нейтронов, вызывающих деление ядер мишени с увеличением энергии падающих дейтронов. Этот результат будет уточнен при анализе данных измерений декабря 2012 года, проведенных с минимальной продолжительностью импульса падающих дейтронов.



## Работы по созданию установки для исследования возможности накопления холодных нейтронов на конце выведенного пучка нейтронов.

Ранее нами был предложен проект нового высокоинтенсивного источника УХН производительностью ~10<sup>8</sup> УХН/с, объемная плотность УХН в котором может достигать 10<sup>5</sup> п/см<sup>3</sup>, что на 3 порядка превышает ныне существующие источники. Источник представляет собой сферический сосуд, заполненный жидким гелием при температуре 0.6 К, и окруженный замедлителем из твердого метана. Такая схема источника позволяет располагать его на выведенных пучках тепловых нейтронов, что многократно снижает тепловую нагрузку на источник и, соответственно, стоимость источника. Это позволяет многократно расширить спектр применения УХН не только для научных целей, но также для прикладных и образовательных целей.

В рамках исследования возможности создания нового гелиевого источника УХН, велись работы по созданию экспериментальной установки для проведения тестовых измерений. Тестовые измерения должны показать, какой выигрыш в потоке холодных нейтронов можно ожидать в полости на конце нейтроновода при окружении её замедлителем/отражателем из твёрдого метана. Разработаны и изготовлены основные части установки:

- криостат для создания метановой полости и охлаждения метана до гелиевой температуры, включающий систему подачи метана и испарения метана из криостата (рис. 22);
- прерыватель нейтронного потока (рис. 23).



Рис. 22. Криостат (в разобранном виде).



Рис. 23. Прерыватель нейтронного потока.

Проведение измерений запланировано на 2013 год. Реализовать измерения можно как на реакторе ИБР-2 (пучок №2) так и на реакторе ИР-8 (КИ, Москва). В первом случае можно вести измерения спектра вылетающих из полости нейтронов при различных энергиях ("монолиниях") падающих нейтронов. Во втором случае измеряется методом времени пролёта спектр на входе в полость и спектр на выходе из полости. Для этих измерений изготовлен прерыватель.

### Сотрудничество в коллаборации GRANIT в ILL (Франция).

nual Report

Цель коллаборации состоит в развитии и строительстве гравитационного нейтронного спектрометра второго поколения с ультравысоким энергетическим разрешением – GRANIT (ГРАвитационные Нейтронные Индуцирванные Переходы). Этот спектрометр позволит

наблюдать переходы резонанса между нейтронными квантовыми состояниями в поле тяготения Земли. Планируется впервые измерить энергию квантовых состояний непосредственно. Ожидается, что в спектрометре можно будет достичь времени хранения УХН в квантовых состояниях порядка секунды.

Этот новый спектрометр станет инструментом для широкого диапазона исследований в физике элементарных частиц и фундаментальных взаимодействий, квантовой механики, физики поверхности и методических приложений. В рамках коллаборации GRANIT проведены работы по настройке детекторов спектрометра, а также было принято участие в работах по вводу в эксплуатацию и настройке источника УХН спектрометра.

В 2012 году коллаборация занималась вводом в эксплуатацию различных частей спектрометра GRANIT. Первым важным шагом должно стать гарантированно устойчивая работа источника УХН, предназначенного для спектрометра, и его эффективной стыковки с установкой GRANIT. Проведены работы по оптимизации и наладке работы гелиевого источника.

#### Эксперимент по прямому измерению сечения рассеяния нейтрона на нейтроне.

Совместно с Gettysburg College (Gettysburg, Pennsylvania, США) проведен завершающий этап работы по анализу данных первой попытки измерения сечения n-n рассеяния, осуществленной на Уральском импульсном реакторе ЯГУАР с целью изучения зарядовой симметрии ядерных сил. Показано, что наблюденный аномально сильный эффект возрастания интенсивности рассеяния с ростом энергии импульса ЯГУАРа может быть объяснен радиационной десорбцией водорода с поверхности алюминиевого канала установки под действием мощной дозы гамма излучения во время импульса реактора. Получена величина коэффициента десорбции,  $\eta(\gamma) = 0.02$ , что согласуется с литературными данными из других экспериментов. Выполнен анализ литературы по обезгаживанию и методам обработки поверхностей металлов, указавший на возможность снижения коэффициента  $\eta(\gamma)$  до величины приемлемой для измерения сечения n-n рассеяния.

## Работа по изучению временной зависимости константы электромагнитного взаимодействия.

В совместной работе с Госуниверситетом Северной Каролины (NCSU, Raleigh, North Carolina, USA) выполнены работы по использованию изотопных данных из зон природного реактора в Окло для изучения изменения со временем фундаментальной константы электромагнитного взаимодействия «альфа». Результаты для «альфа» зависят от плохо известной температуры активных зон во время работы реактора (10<sup>9</sup> лет тому назад). Было показано, что используемая «лютециевая термометрия», основанная на сильной температурной зависимости сечения выжигания <sup>176</sup>Lu и, соответственно, на изменении в концентрации изотопов <sup>176</sup>Lu и <sup>175</sup>Lu, страдает от недостаточной точности сечений захвата нейтронов лютецием-175 с образованием лютеция-176 в основном и изомерном состояниях. Выполнено моделирование потока гамма квантов в реакторе Окло с результатом, что их величина недостаточна для того, чтобы влиять на выжигание <sup>176</sup>Lu посредством гамма квантов, как это имеет место в звездах при мощных вспышках гамма излучений.

### II. Теоретические исследования.

## Исследование нейтронных потоков, генерируемых нейтронными источниками на базе линейных ускорителей электронов.

В 2012 году продолжалось исследование получения нейтронов и радиоизотопов на источниках, использующих линейные ускорители электронов. Исследованы основные физические характеристики процесса получения нейтронов посредством облучения потоком



электронов материалов с большими атомными номерами. Рассмотрено тормозное излучение электронов, которое производит фотоядерные реакции. Экспериментальные данные, полученные в исследованиях фотоядерных реакций, используются для описания выхода нейтронов при поглощении  $\gamma$ -излучения ядрами. Распределение фотонейтронов по энергиям исследуется на основе существующих теоретических моделей. Нейтроны, статистически распределенные по энергии, составляют основную часть всех получаемых нейтронов, доля прямых нейтронов также учитывается в расчетах. Спектр нейтронов, средняя энергия и полный выход нейтронов вычисляются в зависимости от энергии и тока электронов и от характеристик облучаемых образцов. Исследование выполнено без обращения к "численной Монте-Карло симуляции". Результаты вычислений удовлетворительно согласуются с результатами соответствующих экспериментальных измерений.

#### О возможности повысить поток нейтронов ИРЕН.

С использованием программы FLUKA выполнены расчеты выходов нейтронов из вольфрамовой и урановой мишеней разной конфигурации, результаты для вольфрамовой мишени дали возможность сопоставить их с экспериментальными данными, полученными ранее на бустере ИБР-30 по программе ЭКОН. Показана возможность увеличения выхода нейтронов в 2 – 4 раза без использования второй секции ускорителя, если тормозную мишень из вольфрама или урана окружить двумя слоями из 18 плутониевых стержней.

#### Работы по волновой оптике.

Предложен новый эффективный способ аналитического описания электромагнитных волн в анизотропных средах. Показано, как рассчитывать отражение и преломление на границе раздела между изотропной и анизотропной средами. Исследовано расщепление волн при отражении и преломлении и появления поверхностных волн. Обсуждаются поверхностные волны Дьяконова и способы их наблюдения. Показывается как рассчитывать отражение и пропускание плоско параллельных одноосных пластин.

#### III. Методические и прикладные исследования.

#### Исследование свойств полупроводниковых детекторов и сцинтилляторов.

В 2012 году изготовлены альфа и гамма детекторы из быстрых неорганических сцинтилляторов LFS на основе микропиксельных лавинных фотодиодов с высокой плотностью пикселей(15000 пихел/мм<sup>2</sup>).

Регистрация альфа частиц исследована с помощью быстрых неорганических сцинтилляторов LFS-3 (2 x 2·x 10 мм) на основе микропиксельных лавинных фотодиодов при комнатной температуре. Полученное энергетическое разрешение для альфа частиц с энергией 5.5МэВ от радиоактивного источника <sup>241</sup>Ат составило 9%. Амплитудный спектр показан на Регистрация гамма-излучения осуществлялась рис.24 (слева). с помощью LFS-8 сцинтиллятором (3х3х0.5мм3) на основе микропиксельных лавинных фотодиодов в широком энергетическом диапазоне (59.6-662кэВ) при комнатной температуре. Энергетические разрешение равняется 11.5% для 662 кэВ гамма квантов от радиоактивного источника <sup>137</sup>Cs. Амплитудный спектр показан на рис. 24 (справа). Результаты показали, что такие детекторы можно использовать в позитрон-эмиссионных сканерах, для контроля радиоактивного загрязнения в различных средах и общественной безопасности (Associated Particle Imaging для обнаружения взрывчатых веществ и наркотиков).





Кроме этого, для измерения осколков деления и легких заряженных частиц, испускаемых в процессе деления, создан стенд из тонкого прострельного кремниевого ∆Е детектора толщиной порядка 12 мкм и 600 мкм кремниевого детектора Timepix (Е) в котором энергии частиц полностью поглощается (**рис. 25**).



Такой стенд предназначен для изучения возможности применения метода Е-∆Е в комбинации с позиционно-чувствительным детектором высокого разрешения Timepix для изучения процесса деления. Этот метод позволяет идентифицировать легкие заряженные частицы по заряду и массе, а также отделять их от фоновых событий, связанных с рассеянием осколков на подложке. Одной из наиболее сложных задач при создании данного стенда явилась организация схемы совпадений для одновременной регистрации ∆Е и Е сигналов. Детектор Е (Timepix) имеет собственную систему считывания, которая позволяет регистрировать время для каждого события, но не предполагает интеграцию с внешними электронными блоками. Сигнал от ∆Е детектора считается с помощью настольного оцифровщика CAEN (12 бит, 250МГц/выб), который также позволяет регистрировать время прихода события. На данном этапе совпадения организованы за счет анализа временных меток двух типов событий, записанных на компьютер, в off-line режиме. Временное разрешение этого метода недостаточно



для эффективной организации совпадений. Ведется работа по созданию более эффективной схемы совпадений.

#### Аналитические исследования с использованием методов нейтронной спектрометрии.

На импульсном источнике резонансных нейтронов ИРЕН продолжались работы по развитию и применению методов элементного и изотопного анализа с использованием нейтронной спектрометрии. Измерениями пропускания нейтронов через образцы проводился анализ содержания бора в керамиках из нанокомпозитных материалов, изготовленных в Белорусском государственном университете (Минск). Новые многофункциональные материалы сочетают в себе свойства эффективного нейтронного протектора с высокой термостойкостью и механической прочностью.

Совместно с Государственным астрономическим институтом им. Штернберга МГУ методом резонансной спектрометрии продолжались исследования предположительно космической пыли в пробах, взятых с ледника Алтая.

По запросу Центральной геологической лаборатории Министерства природных ресурсов и энергетики Монголии проведен анализ руды на содержание редкоземельных элементов.

#### Ядерно-физические аналитические методики на базе пучков заряженных частиц.

Неразрушающие ядерно-физические аналитические методики, базирующиеся на пучках заряженных частиц низких энергий, широко используются для исследования глубинных профилей элементов при решении разного рода технических и научно-экспериментальных задач. Их аналитические возможности были исследованы на специально подобранных образцах. Методика резерфордовского обратного рассеяния ионов гелия позволяет измерять глубинные профили почти всех элементов с достаточно высоким разрешением по глубине.

Как можно видеть в таблице, в результате обработки одного спектра рассеянных ионов гелия была получена информация о глубинных профилях 7 элементов, начиная от углерода и заканчивая висмутом, с атомными концентрациями от 1 до 100 ат.%. В образце обнаружены два слоя: слой окиси титана толщиной 140 нм и слой кобальта толщиной около 100 нм, нанесенные на кремниевую подложку. Между этими двумя слоями обнаружен промежуточный слой, толщиной около 20 нм, состоящий из всех трех элементов.

Таолица №1.								
Толщина слоя	Глубина,	Концентрация элементов, ат.%						
10 <sup>15</sup> ат./см <sup>2</sup>	НМ	С	0	Si	Ti	Со	Br	Bi
50	5,5	8,0				89,3	1,0	1,7
100	16,6	5,0				94	1,0	
760	101,2					100		
100	117,5		40		30	30		
650	255,3		70		30			
5000	10301,5			100				

Тонкий слой на поверхности образца содержит небольшое количество примесных элементов: углерода – 9x10<sup>15</sup> ат./см<sup>2</sup>, брома – 1,5x10<sup>15</sup> ат./см<sup>2</sup> и висмута – 8,5x10<sup>14</sup> ат./см<sup>2</sup>. Этот слой является демонстрацией, как преимуществ методики резерфордовского обратного рассеяния, так и ее недостатков. Наблюдаемое в эксперименте количество атомов висмута показывает, что методика резерфордовского обратного рассеяния оказывается чувствительной к такому количеству атомов тяжелого элемента, которое меньше их количества, содержащегося



в монослое. С другой стороны, довольно значительное количество (~10<sup>16</sup> ат./см<sup>2</sup>) атомов углерода не обеспечивает заметного выхода рассеянных ионов гелия.

Улучшение аналитических возможностей методики резерфордовского обратного рассеяния иногда достигается путем повышения начальной энергии ионов гелия. Так, например, чувствительность методики к атомам кислорода можно увеличить путем повышения энергии ионов гелия выше 3,045 МэВ. Энергетическая зависимость сечения рассеяния имеется узкий резонанс с сечением в максимуме, превышающим сечение резерфордовского рассеяния в 17 раз. Для нашего электростатического генератора эта энергия является вполне доступной. Измерения при нескольких энергиях, превышающих резонансную, позволяет детально исследовать глубинный профиль кислорода в приповерхностном слое образца.

В образце TiO\Pt\Si выполнено исследование глубинного профиля кислорода с помощью резонанса в упругом рассеянии ионов гелия с энергией 3,045 МэВ на атомах кислорода. Показано, что путем сканирования по энергии вблизи резонанса обнаружены 3 слоя толщиной 10 – 30 нм, содержащие кислород с концентрацией 50 – 60 – 67 ат. % и один слой с концентрацией кислорода около 10 ат. %. Измерение концентрации кислорода выполнено с точностью 2 ат. %.

Последовательный анализ образца на пучке протонов и ионов гелия позволяет повысить точность определения концентрации легких элементов и увеличить глубину анализа. Для демонстрации этих возможностей был использован образец, состоящий из двух слоев Ag и LiNbO<sub>3</sub>, нанесенных на кремниевую подложку. Последовательное исследование двухслойного образца на пучке ионов гелия и протонов позволило не только получить информацию об элементном составе этих двух слоев с общей толщиной около 2,5 мкм, но и увеличить глубину анализа образца до величины примерно 20 мкм. Обработка двух спектров показала наличие заметной концентрации кремния как в слое Ag, так и в слое LiNbO<sub>3</sub>. Переход между этими слоями толщиной около 100 нм имеет промежуточный состав с примесью Si.

С помощью методик RBS и ERD исследовано влияние облучения быстрыми нейтронами с дозой 1,4x10<sup>14</sup> н/см<sup>2</sup> на характеристики SiC и SiC(N) пленок. Обнаружено изменение проводимости слоев в 100 раз, в то время как концентрация элементов и толщина слоев в образцах не претерпела заметных изменений.

С помощью ядерно-физических аналитических методик проводилось исследование глубинных профилей концентрации дейтерия в образцах, предназначенных для исследования астрофизического S-фактора и экранирующего электронного потенциала в реакции *d*(*d*, *n*)<sup>3</sup>Не на мишенях из дейтеридов титана, тантала и циркония.

#### Аналитические исследования на реакторе ИБР-2.

В подотчетный период разрабатывался пакет программ для комплексной автоматизации нейтронного активационного анализа на реакторе ИБР-2, включающий в себя базу данных, сервисные программы для заполнения базы данных, программы для регистрации веса образцов, измерения спектров, расчета концентраций элементов. В процессе работы с программами проводилась их модернизация. Исследовались различные нестандартные случаи, возникающие при обработке гамма спектров программой Genie 2000 (Canberra). Начата разработка механической части устройства для смены образцов на детекторах и продолжена работа по модернизации пневмотранспортной установки.

Проведены измерения плотности потоков тепловых и резонансных нейтронов в каналах облучения пневмотранспортной установки РЕГАТА и на некоторых пучках нейтронов в новых экспериментальных условиях после завершения реконструкции ректора ИБР-2.

В рамках международной программы «Атмосферные выпадения тяжелых металлов в



Европе – оценки на основе анализа мхов-биомониторов» в 2012 году завершен анализ и опубликованы работы, отражающие вклад сектора НАА в европейский атлас по Македонии, Болгарии, Хорватии и Сербии. В европейский атлас переданы также данные по некоторым областям России (Тихвин, Кострома, Иваново, Москва).

В 2012 году в рамках совместного с Египтом проекта «Оценка экологической ситуации в дельте р. Нил с использованием ядерно-физических аналитических методов» завершен массовый многоэлементный анализ почв и донных отложений, отобранных в различных регионах дельты Нила и вдоль его русла. Исследованы также почвы из оазиса Сива в Сахаре. Полученные результаты представляют интерес для геологов и экологов Египта с точки зрения новой информации об элементах, концентрации которых определены впервые.

В рамках договора о сотрудничестве с Институтом биологии южных морей (Севастополь) проведен анализ образцов макроводорослей-биомониторов в прибрежной зоне Черного моря, от полуострова Тарханкут до Керченского полуострова с целью оценки состояния прибрежной экосистемы Крыма.

Впервые получены результаты многоэлементного анализа мхов-биомониторов и лишайников из района гг. Стелленбош и Кейптаун, ЮАР, для оценки атмосферных загрязнений в этом регионе. Для оценки состояния водной экосистемы этого же региона был проведен анализ образцов моллюсков и устриц из двух заливов Индийского океана. Предварительные результаты показали эффективность выбранных объектов для разработки системы биомониторинга в условиях развивающегося порта в Кейптауне.

Подготовлен и опубликован обзор по результатам более чем 20-летнего сотрудничества СННАПИ и аналитического центра Геологического института РАН в области исследования качества продуктов питания ядерно-физическими аналитическими методами. Аналогичные исследования начаты совместно с Тбилисским государственным университетом им. И. Джавахишвили, Грузия.

Совместно со специалистами Бухарестского университета были проанализированы образцы мало изученных лессовых отложений глубиной до 20 метров из Юго-Восточной Добруджи для оценки изменения элементного состава этого вида почв за последние 1,2 млн лет. Результаты ИНАА, проведенного на реакторе ИБР-2 в 2012 году, в сочетании с данными ЭПP, PΦA, сканирующей микроскопии, радиометрического электронной И термолюминесцентного анализа позволили сделать целый ряд выводов, отраженных в работе (Duliu et al., 2012a). Было установлено, что образцы разного возраста имеют сходный элементный состав, что свидетельствует о происхождении выветриваемой пыли из одного и того же наиболее вероятного источника, - гор Мачин, расположенных на севере Добруджи. На международном семинаре ИСИНН-20 была доложена работа по изучению донных отложений и горных пород двух полузакрытых (semiclosed) экосистем: приледникового озера Быля (горы Фэгэраш) и озера кратерного происхождения Св. Ана (горы Харгита) (Duliu et al., 2012b).

В 2012 году на установке РЕГАТА проведен НАА двух торфяных колонок (природных планшетов), отобранных в Западной Сибири, с целью обнаружения космической пыли. Эти исследования в комплексе с результатами электронной сканирующей микроскопии свидетельствуют о возможном присутствии частиц внеземного происхождения. Был проанализирован также материал, полученный с помощью магнитных ловушек при таянии высокогорного ледника на Алтае со следами вещества внеземного происхождения.

В рамках проекта РФФИ совместно с МГУ (НИИ и Музей антропологии им. Д.Н. Анучина) выполнен НАА волос представительной группы детей Онгудайского района республики Алтай, а также почв из мест их проживания с целью установления возможных корреляций элементного состава и выявления эндемических особенностей влияния геохимической среды на организм человека.

nual Report

В сотрудничестве с биофизиками Института физики им. Э. Андроникашвили Грузинского государственного университета им. И. Джавахишвили и Университета им. И. Чавчавадзе в 2012 году продолжались исследования по разработке методов синтеза наночастиц золота и серебра некоторыми новыми штаммами бактерий - экстремофилов и сине-зеленой водорослью *Spirulina platensis*. В комплексе с рядом оптических и аналитических методов нейтронный активационный анализ использовался для разработки технологии синтеза наночастиц исследуемыми микроорганизмами. С целью оценки возможности применения полученных наноматериалов для медицинских и фармацевтических целей методом НАА на реакторе ИБР-2 исследовался также элементный состав микробиальных образцов, содержащих наночастицы золота и серебра.

Совместно с Научно-практическим центром НАНБ по материаловедению Национальной академии наук Беларуси и специалистами по рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии университета в Галаце, Румыния, выполнена работа по изучению изменения характеристик нитридов в системе Li-N при различном давлении синтеза. Было показано, что увеличение давления азота в процессе формирования нитридов приводит образованию структур с повышенным содержанием азота в объеме и с более мелким размером кристаллита.

На базе СНААПИ в 2012 году проводился Практикум для студентов старших курсов Университета «Дубна» и студентов и учителей Международных Летних Школ (май-июнь, июль и сентябрь 2012 года), организуемых УНЦ ОИЯИ, для слушателей V Высших курсов стран СНГ "Синхротронные и нейтронные исследования наносистем (СИН-нано)" (17июня - 5 июля 2012, Москва-Дубна), а также для Международной научной школы для молодежи по нанотехнологии (сентябрь, 2012). За отчетный период на базе сектора были выполнены две курсовых и три бакалаврских работы. В секторе выполняются пять кандидатских диссертаций.





## ПЕРСПЕКТИВНЫЕ РАЗРАБОТКИ И СОЗДАНИЕ ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРОВ ИБР-2

#### Холодные замедлители.

В первом квартале 2012 года в рамках проекта комплекса холодных замедлителей реактора ИБР-2М на полномасштабном испытательном стенде были проведены эксперименты по моделированию загрузки мезитиленовых шариков в камеру-имитатор замедлителя при различных режимах работы. Была произведена также модернизация автоматизированной системы сбора и регистрации контрольной и измерительной информации с датчиков системы контроля холодного замедлителя. Кроме того, улучшению подверглись основные технологические системы и узлы холодного замедлителя.

На основании полученных результатов был выработан режим работы холодного замедлителя, который определяет основные предельно допустимые физические параметры во время его эксплуатации, и проведен пуск первого холодного замедлителя КЗ-202 на основе ароматических углеводородов на модернизированном реакторе ИБР-2М (**Рис. 26**).



Рис. 26. Фото комплекса замедлителей нейтронов КЗ-202 в направлении пучков № 7,8,10 и 11: 1 – водяной предзамедлитель, 2 – водяные гребенчатые замедлители, 3 – холодный замедлитель (видна только поверхность вакуумного кожуха), 4 – водяные постзамедлители.



Основные физические параметры замедлителя КЗ-202 во время загрузки камеры замороженными мезитиленовыми шариками: 1) массовый расход гелия в транспортном трубопроводе составил 1,5 г/сек, температура - не менее 80К; 2) максимальная скорость подачи шариков из дозатора в транспортный трубопровод не превышала 8 штук/сек. Контроль движения шариков по трубопроводу производился с помощью датчиков дифференциального давления. Наблюдение за процессом заполнения камеры шариками (мониторирование) осуществлялось путем получения нейтронного образа камеры замедлителя на двухкоординатном ПЧД методом «камера-обскура» (**Рис. 27**).

После заполнения камеры замедлителя реактор был выведен на мощность 2 МВт. Средняя температура замедлителя составила 30 К. В результате измерений спектров нейтронов установлено, что выход длинноволновых нейтронов с поверхности криогенного замедлителя по сравнению с водяным замедлителем увеличился до 13 раз (**Рис. 28**). Продолжаются работы по определению максимального времени работы на одной загрузке материала холодного замедлителя.





### Расчеты и моделирование спектрометров.

В течение 2012 года продолжалось усовершенствование специальных VITESS модулей, позволяющих моделировать поведение спина нейтрона в произвольных магнитных полях. В эти модули были добавлены временные зависимости магнитных полей для моделирования спинэхо спектрометров с временно-зависящими (импульсными) магнитными полями (стационарное поле при этом рассчитывается внешней программой). Произведено большое количество симуляций частей нового спин-эхо спектрометра с вращающимися магнитными полями на пучке РЕФЛЕКС для реактора ИБР-2М (в сотрудничестве с В.Боднарчуком и А.Рубцовым, НЭО НИКС ЛНФ) в реальных магнитных полях, рассчитанных внешней программой. Проведено сравнение с первыми экспериментами (одно плечо спин-эхо спектрометра), при этом получено хорошее совпадение экспериментальных данных с модельными, рассчитанными новыми VITESS модулями. На основе проведенных симуляций и расчетов выработаны дальнейшие рекомендации по инжинирингу узлов спин-эхо спектрометра с вращающимися магнитными полями.

Выполнен первый этап оригинального проекта: погружение VITESS модулей в магнитное поле. При этом была разработана специальная библиотека VITESS подпрограмм, позволяющих реализовать данную задачу. К настоящему времени завершена разработка модуля "поляризационное зеркало в магнитном поле" (**Рис. 29**) и проведено его тестирование, модуль будет включен в следующие версии VITESS. Все вышеописанные работы были проведены в сотрудничестве с проф. А.Иоффе (JCNS-Мюнхен).



Были разработаны 4 новых VITESS модуля, позволяющих моделировать и рассчитывать временную фокусировку нейтронов для времяпролетных спектрометров на импульсных источниках. Один из модулей позволяет рассчитать поверхность временной фокусировки для выбранной конфигурации времяпролетного спектрометра в декартовых или полярных системах



координат. С помощью других модулей можно рассчитать аппроксимирующие поверхности для поверхности временной фокусировки. При этом возможна аппроксимация плоскостью/плоскостями, цилиндром/цилиндрами и сферой/сферами. Данный комплекс модулей находится в стадии тестирования. На **Рис. 30** приведен пример построения идеальной поверхности временной фокусировки. В 2012 г. в комплекс VITESS введен и адаптирован из программы MCSTAS модуль для моделирования газонаполненного ПЧД.



#### Тестовый пучок и новый фурье-дифрактометр.

Продолжались работы по созданию на 13 канале реактора ИБР-2М нового фурьедифрактометра высокого разрешения, основанного на узлах спектрометра FSS (GKSS, Geesthacht, Germany). В связи решением о создании на соседнем 14 канале нового спектрометра NIS, были скорректированы проекты размещения установок и разработана новая схема биологической защиты 13 и 14 каналов, разработаны чертежи, изготовлены и смонтированы элементы защиты. К сожалению, до сих пор не решены проблемы, связанные с транспортировкой оборудования FSS из Санкт-Петербурга в Дубну.

#### Криогеника.

Завершены работы по созданию установки для очистки He<sup>3</sup> (**Рис. 31**). Установка предназначена для очистки и подготовки He<sup>3</sup> для вторичного использования в детекторах нейтронов. Смесь газов из детекторов, содержащая He<sup>3</sup>, сохраняется в резервуарах установки и при помощи криогенной системы и системы перекачки гелий очищается от других газов. Затем с помощью специального криогенного насоса He<sup>3</sup> компремируется до давления 80бар, достаточного для заправки новых детекторов. На установке проведены пуско-наладочные работы и начата ее эксплуатация.



Проведено исследование возможности создания криогенной головки на пульсационной трубе в лабораторных условиях. В результате была изготовлена одноступенчатая криогенная головка. соединенная С компрессором Leybold RW4000. Конечная температура, которая достигается на этой головке, составляет 48К. Головка используется на криогенном стенде

#### НЭОКС ИБР-2М.

Начата разработка горизонтального криостата, предназначенного для охлаждения камер высокого давления с сапфировыми наковальнями на дифрактометре ДН-6.



Реконструкция нейтроноводов и модернизация систем автоматизации спектрометров на 7 канале ИБР-2М.

В 2012 г. завершено изготовление и выполнен монтаж 80-метрового нейтроновода НЕРА-ПР (Рис. 32). Произведена юстировка оптических элементов.



реконструкции (Эпсилон – желтый цвет, СКАТ - синий и НЕРА-ПР – зеленый; на переднем плане детекторная система НЕРА-ПР).



Рис. 33. Фото коллиматоров детекторов и гониометра Huber на спектрометре эпсилон.

Изготовлена регулируемая диафрагма нейтронного пучка. Управление диафрагмой осуществляется шаговыми двигателями, подключенными к РС через контроллер и преобразователь CAN/USB. Выполнена также модернизация многосчетчиковой детекторной системы НЕРА-ПР. Измерены амплитудные спектры и счетные характеристики гелиевых счетчиков детектора (36 прямоугольных счетчиков, 24 счетчика СНМ-17 и 4 мониторных счетчика). По результатам измеренний характеристик произведен отбор счетчиков в группы по газовому усилению и рабочему напряжению, а также определены пороги дискриминации для каждого счетчика.

Введена в эксплуатацию система управления коллиматорами детекторов и гониометром Huber на спектрометре ЭПСИЛОН (Рис. 33). При этом впервые в составе исполнительных механизмов спектрометров ЛНФ были использованы шарико - винтовые передачи (ШВП) и шаговые двигатели с управляемым электромагнитным тормозом. ШВП состоят из ходового винта, гайки с интегрированными шариками и механизмом возврата шариков. Такие передачи наиболее часто используются в прецизионном оборудовании. Они служат для преобразования вращательного движения в поступательное или наоборот. При этом они обеспечивают высокую точность и большой КПД. Выполнена программно-аппаратная разработка, позволяющая управлять тормозом с использованием уже применяемых на спектрометрах ИБР-2М контроллеров шаговых двигателей.

Общее количество каналов управления исполнительными механизмами спектрометров на 7 канале ИБР-2М достигло 72 (ЭПСИЛОН – 32, СКАТ – 4 и НЕРА-ПР – 36 каналов). Системы автоматизации экспериментальных установок на 7 канале контролируют также состояние прерывателей, шибера, показания вакуумных датчиков и других элементов спектрометров. В настоящее время на ЭПСИЛОН и НЕРА-ПР установлены новые DAQ-системы для точечных детекторов, завершаются наладочные работы и проводятся тестовые измерения.


Отлажены на стенде и подготовлены к переносу на пучки комплекты аппаратуры систем автоматизации и систем сбора данных для спектрометров СКАТ, ГРЕЙНС и ДН-2 (RTD). Для ГРЕЙНС выполнен также монтаж и проведены испытания 2-х поляризаторов и 2-х диафрагм, а для ДН-2 разработаны чертежи системы коллимации пучка. В состав исполнительных механизмов спектрометра RTD входят:

- платформа с детектором с углами поворота 0-180 град. (1 канал управления и 1 угловой датчик);

- гониометр Huber (1 канал управления);

- гониометр ГКС-100 (10 каналов управления, включая резерв для подключения диафрагмы нейтронного пучка и коллиматоров точечных детекторов).

#### Детекторы.

Завершен проект создания газового кольцевого секционированного детектора для дифрактометра ДН-6. В 2012 г. по проекту выполнены следующие основные работы:

 разработаны и изготовлены механические узлы для крепления и юстировки детектора, а также установлена его фоновая защита;

выполнена наладка 96-канальной электроники сбора и накопления данных;

— разработаны программы для тестирования детектора, модернизировано программное обеспечение накопления данных и разработан новый программный интерфейс;

- проведены тестовые испытания детектора на 66 канале ИБР-2М с рабочими смесями при различных давлениях He<sup>3</sup>.

В ноябре проведены измерения образцов с кольцевым детектором в фоновой защите с рабочей смесью (4,0 бар <sup>3</sup>He + 500 мбар Ar + 30 мбар CO<sub>2</sub>). На **Рис. 34** представлены спектры измеренных образцов. В настоящее время детектор передан физикам для дальнейшего тестирования и проведения рабочих измерений.



Рис. 34. Спектры измеренных образцов а) V, б) LaB6, в) LaB6 с коррекцией по ванадию.

Произведена замена вышедших из строя позиционно-чувствительных детекторов на ФДВР и РЕФЛЕКС. Изготовлены и переданы в ИЯИ, Ржеж, Чехия две детекторные системы, включающие в себя 2Д ПЧД, детекторную электронику, электронику сбора и накопления данных, а также программное обеспечение. На дифрактометре ДН-2 (RTD) введена в эксплуатацию детекторная система с 2Д ПЧД (чувствительная область 225х225 мм<sup>2</sup>) и завершено изготовление кольцевого гелиевого детектора обратного рассеяния (**Рис. 35**), в декабре будут проведены испытания этого детектора на пучке. Изготовлен и испытан сцинтилляционный счётчик на основе ND-экрана со съёмом светового сигнала с помощью спектросмещающих волокон. Начата подготовка к изготовлению сцинтилляционных счётчиков для детектора "Астра". Был проведен ряд работ по модернизации чистого помещения, его площадь увеличена до 10 м<sup>2</sup>.





Проведены измерения профилей нейтронных пучков на каналах 2, 4, 6а, 6б, 7, 9, 11, 12 модернизированного реактора ИБР-2М. Измерения проводились в зонах пучков вывода помощью С двухкоординатного ПЧД-монитора тепловых нейтронов. Для каждого пучка были измерены средняя интенсивность, координатное И временное распределения нейтронных потоков.

#### Системы сбора данных.

В 2012 г. продолжались работы по внедрению нового поколения систем сбора и накопления данных и систем автоматизации экспериментов на спектрометрах ИБР-2М. В соответствии с планом-графиком этих работ, утвержденном на совместном заседании Научнотехнических советов отделов КС и НИКС, основные работы на всех спектрометрах должны быть выполнены в 2012-2013 г.г. Это означает, что в указанный период DAQ-системы или будут сданы в эксплуатацию, или будут изготовлены и отлажены на стенде все электронные блоки, firmware программы и программы пускового минимума, а работы по программному обеспечению Sonix+ для конкретных спектрометров будут завершены в согласованные с заинтересованными физиками сроки.

В текущем году введены или подготовлены к сдаче в эксплуатацию DAQ-системы для точечных детекторов спектрометров HEPA-ПР, RTD (ДН-2), ЭПСИЛОН, СКАТ, ДН-6, ДИН-2ПИ, РЕФЛЕКС и ФСД (для разработки и отладки программ корреляционного анализа и проведения методических исследований). Все указанные системы, за исключением РЕФЛЕКС и ФСД, состоят из двух типов блоков — одного цифрового, способного регистрировать и накапливать данные от 1 до 240 точечных детекторных элементов, и нескольких 32-хканальных аналоговых блоков, в которых осуществляются прием, дискриминация, преобразование и передача информации дифференциальными сигналами малых напряжений (LVDS) от предусилителей детекторов в цифровой блок MPD-32. В аналоговом блоке осуществляется также переход от разъемов LEMO на ленточный кабель. В качестве примера на **Рис.36** показана блок-схема 96-канальной DAQ-системы для кольцевого детектора дифрактометра ДН-6, а на **Рис.37** - фотография блоков этой системы, установленных в крейте NIM.



На спектрометрах РЕФЛЕКС и ФСД установлены блоки MPD-16, в которых печатные платы с аналоговой и цифровой электроникой смонтированы в едином каркасе. Блок MPD-16 предназначен для спектрометров с числом детекторных элементов не более 16. Блоки MPD-32 и MPD-16 программно совместимы.

В блоки MPD встроен тестовый генератор, имитирующий работу системы накопления данных. Это позволяет провести быструю проверку работоспособности аппаратуры перед сеансом, а также её автономную отладку без подключения детекторных элементов. Передача данных между электроникой сбора данных и портом USB 2.0 осуществляется через интерфейсный блок по последовательной волоконно-оптической линии связи (на **Рис. 37** волоконно-оптический кабель оранжевого цвета). Скорость передачи данных – 1.25 Гбит/сек., максимальная удаленность компьютера – до 100м.



Рис. 37. Фото электронных блоков МРД-32.

Электроника блоков MPD унифицирована, специфические особенности каждого спектрометра учитываются при программировании FPGA. Напомним основные параметры блоков МПД:

- Частота временной дискретизации всех сигналов (детекторные, старт реактора и др.) программируемая (максимум 62,5 МГц);
- Максимальное число детекторных элементов 240;
- максимальная скорость регистрации 8·10<sup>6</sup> соб./сек.;
- внутренняя гистограммная память блока накопления 64 Мбайта;
- максимальная задержка начала регистрации относительно вспышки реактора 0,268 сек (программируется, квант времени - 16нсек); с такой же точностью программируются ширина канала для гистограммной памяти и величина временного окна, в котором регистрируются нейтроны.

На фурье-дифрактометре ФСД ведутся испытания «List Mode»-анализатора на базе блока MPD-16 для накопления «сырых» данных в списочном режиме и отладка программ обработки. Предполагается, что в ближайшем будущем электроника MPD заменит существующую DSP электронику на всех фурье-дифрактометрах ИБР-2M. **Рис. 38** иллюстрирует хорошее совпадение спектров низкого разрешения, измеренных DSP- и MPD-анализаторами.





#### Развитие комплекса Sonix+.

Подготовлены версии Sonix+ и начата их опытная эксплуатация на спектрометрах, где установлены новые DAQ-системы. Сложность этих работ заключается в том, что на многих спектрометрах одновременно с заменой регистрирующей и накопительной электроники меняется также аппаратура управления исполнительными механизмами спектрометров и системами окружения образца, а также осуществляется переход от OS-9 к Windows. Это требует определенных усилий и от физиков, и от инженеров и, в конечном итоге, их совместной работы при тестировании электроники и программного обеспечения в течение одного-двух реакторных циклов.

Среди других работ по программному обеспечению можно отметить следующие:

 Подготовлена тестовая программа для испытаний кольцевого детектора на спектрометре ДН-6 (испытания прошли успешно и детектор вместе с DAQ-системой был сдан в эксплуатацию).

— Разработана технология создания программных компонентов и методика их использования для создания систем юстировки спектрометров реактора ИБР-2М. Подготовлены варианты программ юстировки для спектрометров ЮМО, РЕМУР, РЕФЛЕКС. Программа юстировки на ЮМО была использована при настройке нового привода кольцевого коллиматора.

— Продолжались работы по совершенствованию программы визуализации данных. Подготовлен новый вариант программы SpectraViewer для точечных детекторов и ПЧД на основе PyQT и Matplotlib. Программа внедрена на спектрометрах ЮМО, РЕФЛЕКС, НЕРА-ПР, ЭПСИЛОН, ДИН-2ПИ. Примеры использования программы SpectraViewer показаны на Рис. 39, 40, и 41.



Annual



— Подготовлена начальная версия программы Journal для автоматической регистрации измерений на спектрометрах. Программа проходит испытание на спектрометре ЮМО.





#### Локальная вычислительная сеть.

Главная задача в развитии ЛВС в текущем году — обеспечение возможности работы конечных пользователей на скорости до 1 Гбит/сек в основных сегментах сети (здания 42,42a,43(IREN),44,117, 119), — успешно выполнена. Обеспечена также бесперебойная работа всего сетевого оборудования как на спектрометрах ИБР-2М, так и в офисах персонала Лаборатории.

Продолжились начатые в 2011 г. работы по модернизации ЛВС ЛНФ. Основными причинами для модернизации сети являются следующие:

- Переход в сети ОИЯИ к скоростям 10 Гбит/сек.
- Стремительный рост производительности и возможностей персональных компьютеров.
- Возросшие требования к информационному обеспечению пользователей.
- Модернизация реактора ИБР-2 и его спектрометров; создание новых инструментов; тенденция к накоплению сырых данных.



• Обеспечение доступа и совместного использования сетевых устройств, архивов данных и пакетов программ.

• Массовое использование Интернет

Основной целью текущей модернизации сети является: **a)** локализация потоков данных и выделение сегментов в подсети с целью обеспечения максимально возможной пропускной способности коммуникационного оборудования; **б)** обеспечение передачи информации со скоростью до 10 Гбит/сек. Этапы модернизации:

- Замена коммутационного оборудования 3 и 2 уровня в основных сегментах сети ЛНФ (здания 42, 42а, ИБР-2М,119).
- Замена серверов и дальнейшее расширение сети.
- В настоящее время первый этап в основном выполнен. Логическая схема модернизированной сети по состоянию на 1 декабря 2012 г. показана на **Рис.42**.

Отметим особенности новой конфигурации ЛВС:

- ✤ В связи с увеличением потока данных от спектрометров ИБР-2М потребовалось подключить его непосредственно к центральному коммутатору сети, чтобы обеспечить скорость до 10 Гбит/с.
- ✤ На порядок увеличена пропускная способность на всех участках сети (со 100 Мбит/сек. до 1 Гбит/сек. и с 1 Гбит/сек. до 10 Гбит/сек. соответственно).
- Приобретен и установлен новый сервер SuperMicro 6047, предназначенный, в первую очередь, для хранения данных. Объем дисковой памяти сервера составляет 72 Тбайта.





# 2. ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ

### ИМПУЛЬСНЫЙ РЕАКТОР ИБР-2

#### Информация о работе исследовательской ядерной установки ИБР-2

1. Получена лицензия Ростехнадзора №ГН-03-108-2614 от 27.04.2012 г. на эксплуатацию исследовательской ядерной установки ИБР-2.

2. В соответствии с условиями действия лицензии на эксплуатацию исследовательской ядерной установки ИБР-2 в течение года специализированными организациями совместно с персоналом установки выполнялись плановые работы по оценке технического состояния и определению остаточного ресурса технологического оборудования установки.

3. Проведена модернизация системы охлаждения кожуха подвижного отражателя ПО-3: Изменена схема разгрузки насосов со сбросом части воды непосредственно в бак дистиллята и произведена замена насосов системы охлаждения кожуха модулятора реактивности ПО-3.

С мая 2012 г. проводятся регулярные циклы работы реактора ИБР-2 на физический эксперимент на мощности 2 МВт при работе КЗ-202 в режиме водяного или криогенного замедлителя в соответствии с планом-графиком физического пуска холодного замедлителя.

В таблице 2 представлены параметры ИЯУ ИБР-2 во время проведения реакторных циклов.

№ цикла	Период работы реактора	Режим замедлителя	Мощность реактора, МВт	Время работы реактора на мощности, час	Время работы реактора на физический эксперимент, час
1	май, 21 - июнь, 1	водяной	2	247	241
2	июль, 18 - июль, 29	водяной	2	272	264
3	сентябрь, 24 - сентябрь, 28 октябрь, 3 - октябрь, 9	криогенный криогенный	2	244	201
4	октябрь, 22 - ноябрь, 1	водяной	2	179	171
5	ноябрь, 12 - ноябрь, 24	водяной	2	290	281
6	ноябрь, 28 - декабрь, 4	криогенный	2	171	131
7	декабрь, 13 - декабрь, 21	криогенный	2	189	182
Total:				1592	1471

Таб. 2. данные по работе ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент

• С 21.05. по 01.06.2012 г. проведен 1-й цикл работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент на мощности 2 МВт при работе криогенного замедлителя КЗ-202 в режиме водяного замедлителя. В течение цикла работы произошло 2 срабатывания аварийной защиты (АЗ) из-за посадки напряжения в цепи внешнего питания установки. Причина срабатывания АЗ – нарушение электроснабжения в городских электросетях.

• С 18.06. по 29.06.2012 г. проведен 2-й цикл работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент на мощности 2 МВт при работе КЗ-202 в режиме водяного замедлителя. Без нарушений.

• С 24.09. по 09.10.2012 г. проведен 3-й цикл работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент. В течение цикла проводились испытания КЗ-202 в соответствии с «Программой пуска и испытаний криогенного замедлителя реактора ИБР-2М КЗ-202» на мощности 2 МВт. В течение цикла работы произошло 2 срабатывания аварийной защиты из-за посадки напряжения в цепи питания установки. Причина срабатывания АЗ – нарушение электроснабжения в городских электросетях.



# 2. ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ

• С 22.10. по 01.11.2012 г. проведен 4-й цикл работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент на мощности 2 МВт при работе КЗ-202 в режиме водяного замедлителя. В течение цикла работы произошло 3 срабатывания аварийной защиты. Два срабатывания АЗ произошли вследствие остановки подвижного отражателя ПО-3 из-за сбоя в работе устройства стабилизации оборотов и отключения электромагнитной порошковой муфты. Одно срабатывание по сигналу снижения уровня натрия в корпусе реактора, вызванного нарушением в работе электронного устройства обработки сигнала уровня натрия в корпусе реактора. Во всех случаях срабатывания АЗ неисправные узлы были заменены на запасные и предприятием-разработчиком произведен необходимый ремонт и проверка их исправности.

• С 12.11. по 24.11.2012 г. проведен 5-й цикл работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент на мощности 2 МВт при работе КЗ-202 в режиме водяного замедлителя. В течение цикла работы произошло одно срабатывание аварийной защиты из-за посадки напряжения в цепи питания установки. Причина срабатывания АЗ – нарушение электроснабжения в городских электросетях.

• С 28.11. по 4.12.2012 г. и с 13.12. по 21.12.2012 г. проведены 6-й и 7-й циклы работы ИЯУ ИБР-2 на физический эксперимент. В течение циклов проводились испытания КЗ-202 в соответствии с «Программой пуска и испытаний криогенного замедлителя реактора ИБР-2М КЗ-202» на мощности 2 МВт. Без нарушений.

### Информация о работе системы криогенного замедлителя

1. В период 24.01.÷25.01.2012 г. выполнена замена водяного гребенчатого замедлителя ВЗ-302 (нейтронные каналы 7÷11) на криогенный замедлитель КЗ-202.

2. Смонтированы криогенный трубопровод для подачи шариков мезитилена С<sub>9</sub>H<sub>12</sub> в камеру замедлителя, оборудование для слива жидкого С<sub>9</sub>H<sub>12</sub> из камеры КЗ-202, криостат с теплообменником и газодувкой гелия. Проведены вакуумные испытания смонтированного оборудования.

3. Совместно со специализированной организацией выполнена наладка КГУ-700/15. В результате работ получены следующие результаты.

3.1. Минимальная достигнутая температура гелия на выходе из КГУ (при работе «сама на себя») Т <sub>min</sub> = 17,6 К.

3.2. Измерена производительность компрессора «KAESER». В зависимости от режима работы она составила 660 – 770 м<sup>3</sup>/ч.

3.3. Разработана и установлена компьютерная система контроля параметров (температура, давление, аварийная сигнализация, объем гелия в газгольдере, обороты турбин) работы КГУ 700/15.

3.4. Проведены эксперименты по захолаживанию камеры замедлителя, где получены минимальные температуры до камеры и после камеры 29 К и 32,8 К соответственно. Термометры установлены в 3-х метрах от камеры замедлителя. При этим температура на выходе из КГУ составила 21,1 К. Данные приведены при работе реактора на мощности 2 МВт и полностью загруженной камере замедлителя мезитиленом после 24 часов непрерывной работы.

3.5. Наибольшая длительность непрерывной работы КГУ 700/15 на охлаждение КЗ 202, в соответствии с программой испытаний, составила 160 часов.

3.6. Проведены проверки срабатывания аварийной сигнализации и автоматической защиты турбин установки КГУ 700/15.

3.7. Проведены проверки работоспособности запасного турбинного модуля КГУ 700/15. Работа турбины удовлетворительная.



# 2. ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ

3.8. Проведено обучение и аттестация персонала на знание устройства и инструкций по эксплуатации КГУ 700/15, а так же действия персонала при аварийных ситуациях.

3.9. Криогенная гелиевая установка КГУ 700/15 комиссионно принята в эксплуатацию и полностью готова к работе.

4. Разработана «Программа пуска и испытаний криогенного замедлителя КЗ-202 ИБР-2М» и эксплуатационная документация по КГУ-700 и КЗ-202. Назначена группа пуска и испытаний. Рабочая комиссия разрешила проведение пуска КЗ-202.

5. Начат пуск КЗ-202 при работе реактора на мощности. 10.07.2012 г. состоялся пробный пуск на W = 500 кВт при средней температуре в камере КЗ 30 К. В сентябре - октябре выполнение программы пуска было продолжено на W = 2 МВт. Было проведено 4 цикла испытаний: один - продолжительностью 39 часов (3,7 МВт·суток), второй – 133 часа (11,8 МВт·суток), третий – 131 часа (10,9 МВт·суток) и четвертый 159 часа (13,2 МВт·суток).

### УСТАНОВКА ИРЕН

В 2012 г. установка ИРЕН отработала более 1500 часов на физический эксперимент. Были продолжены методические работы по подготовке экспериментов на импульсном источнике резонансных нейтронов ИРЕН. Проведены испытания многодетекторной системы для измерения нейтронных сечений «Ромашка»-1 и установки АУРА для исследования (n,e) рассеяния. Активно велись прикладные работы с применением методов нейтронной спектроскопии. Было продолжено сотрудничество с научными центрами России и странучастниц ОИЯИ в области подготовки и проведения физических экспериментов и разработки для этих целей нового оборудования.



#### ОПУБЛИКОВАННЫЕ СТАТЬИ ОТДЕЛ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД 1. Атомная и магнитная структура (дифракция)

- 1. Балагуров А.М., Нейтронография: задачи и способы решения. Природа, 2012, т. 7, с. 14-25.
- Балагуров А.М., Мамсурова Л.Г., Бобриков И.А., То Тхань Лоан, Помякушин В.Ю., Пигальский К.С., Трусевич Н.Г., Вишнев А.А., Эффекты структурного разупорядочения в мелкокристаллических ВТСП YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub>. ЖЭТФ, 2012, т.141 (6), с. 1144-1155. (Balagurov A.M., Mamsurova L.G., Bobrikov I.A., Loan To Thanh, Pomjakushin V.Yu., Pigalskii K.S., Trusevich N.G., Vishnev A.A., Disordering Effects in Atomic Structure of Fine-Crystalline HTSC YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub>. JETP, 2012, v. 114 (6), pp. 1001-1011.)
- Bogdanov S.G., Gerasimov E.G., Skryabin Yu.N., Sherstobitova E.A., Sikolenko V.V., Schedler R., Pirogov A.N., Commensurate–Incommensurate Magnetic Phase Transition Induced in TbNi₅ by an External Magnetic Field. Physics of Metals and Metallography, 2012, 113, 228.
- Burzo E., Vlaic P., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Dang N.T., Lukin E.V., Savenko B.N., Magnetic properties of TbCo2 compound at high pressure. Journal of Alloys and Compounds, 2012, accepted for publication.
- 5. Clementjev E.S., Alekseev P.A., Efimov V.V., Troyanchuk I.O., Ivanov A.S., Lazukov V.N., Sikolenko V.V., Crystal electric fields effects in  $Pr_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ . Journal of Surface Investigations, 2012, 6, 553.
- Данг Н.Т., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Лукин Е.В., Савенко Б.Н., Структурные и магнитные фазовые переходы при высоких давлениях в Pr0.1Sr0.9MnO3. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования, 2012, №10, с.37-40. (Dang N.T., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Jirák Z., Lukin E.V., Savenko B.N., High pressure effect on the crystal and magnetic structure of Pr0.1Sr0.9MnO3manganite, 2012, JETP Volume 6, Issue 5, pp 817-820)
- Данг Н.Т., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Савенко Б.Н., Дубровинский Л.С., Лате С., Индуцированный давлением структурный фазовый переход в манганите La0.25Ca0.75MnO3. Известия Тульского государственного университета. Естественные науки, 2012, Выпуск 1. стр.184-193.
- Джабаров С.Г., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Мамедов А.И., Савенко Б.Н., Мехтиева Р.З., Лате К., Структурные исследования Р-Т фазовой диаграммы ниобата натрия. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования, 2012, №6, с.1-7. (Jabarov S.G., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Belushkin A.V., Mammadov A.I., Savenko B.N.,. Mekhtieva R.Z, Lathe C., 2012, Structural studies of the P-T phase diagram of sodium niobate, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, Volume 6, Issue 3, pp 546-551.)
- Джабаров С.Г., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Мамедов А.И., Мехтиева Р.З., Лукин Е.В., Савенко Б.Н., Лате К., Индуцированное давлением изменение типа фазового перехода в титанате свинца: структурный аспект. Электронная обработка материалов, 2012, т.48, №1 с.83-87. (Jabarov S.G., Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Mamedov A.I., Mehdieva R.Z., Lukin E.V., Savenko B.N., Lathe C., 2012, Pressure-induced change in the order of the phase transition in lead titanate: Structural aspects, Surface

Engineering and Applied Electrochemistry, Volume 48, Issue 1, pp 69-73.)

- Джабаров С.Г., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Мамедов А.И., Данг Т.Н., Мехтиева Р.З., Савенко Б.Н., Лате К., Влияние высокого давления и температуры на кристаллическую структуру манганита висмута BiMnO3. News of Baku University, 2012, №2, 101.
- Khomchenko V.A., Troyanchuk I.O., Karpinsky D.V., Das S., Amaral V.S., Tovar M., Sikolenko V., Paixao J.A., Structural transitions and unusual behavior in Mn-doped Bi<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>FeO<sub>3</sub> perovskites. J. Appl. Phys., 2012, 112, 084102.
- 12. Кичанов С.Е., Фролова Е.В., Шевченко Г.П., Козленко Д.П., Белушкин А.В., Лукин Е.В., Малашкевич Г.Е., Рахманов С.К., Глазков В.П., Савенко Б.Н., Исследование структурных особенностей Y3AI5O12:Ce3+/Lu2O3 кристаллофосфора при его формировании коллоидно-химическим методом. Физика твердого тела, 2012, принято в печать.
- Kozlenko D.P., Kusmartseva A.F., Lukin E.V., Keen D.A., Marshall W.G., de Vries M.A., Kamenev K.V., From quantum disorder to magnetic order in an s=1/2 kagome lattice: a structural and magnetic study of herbertsmithite at high pressure. Phys. Rev. Lett., 2012, 108(18), 187207.
- Kozlenko D.P., Kichanov S.E., Lukin E.V., Dang N.T., Smirnov A.I., Bykova E.A., Dubrovinsky L.S., Kamenev K.V., Liermann H.P., Morgenroth W., Savenko B.N., High pressure effects on the crystal structure, magnetic and vibrational properties of multiferroic RbFe(MoO4)2. Physic Review B, 2012, submitted.
- 15. Лошак Н.В., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Вонсицки Я.В., Наврочик В., Лукин Е.В., Лате К., Савенко Б.Н., Булавин Л.А, Структурные изменения в хлорпропамиде при высоком давлении. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования, 2012, № 12, с.7-10. (Loshak N.V., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Wonsicki J., Nawrocik W., Lukin E.V., Lathe C., Savenko B.N., Bulavin L.A., Structural changes in chlorpropamide at high pressure, 2012, JETP Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron TechniquesVolume 6, Issue 6, pp 951-953)
- 16. Лошак Н.В., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Вонсицки Я.В., Наврочик В., Лукин Е.В., Лате К., Савенко Б.Н., Булавин Л.А., Изменения в кристаллической структуре хлорпропамида при воздействии температуры и высокого давления. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования, 2012, направлено в журнал. (Loshak N.V., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Wonsicki J., Nawrocik W., Lukin E.V., Lathe C., Savenko B.N., Bulavin L.A., 2012 Structural changes in chlorpropamide at high pressure, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, Volume 6, Issue 6, pp 951-953 )
- Pirogov A.N., Bogdanov S.G., Rosenfeld E.V., Park J.G., Choi Y.N., Lee S., Prokes K., Golosova N.O., Sashin I.L., Kydrevatykh N.V., Skryabin Yu.N., Vokhmyanin A.P., Effects



- Pirogov A.N., Bogdanov S.G., Seongsu Lee, Je-Geun Park, Choi Y.N., Lee H., Grigorev S.V., Sikolenko V.V., Sherstobitova E.A., Schedler R., Determing the magnetic ground state of TbNi₅ single crystal using polarized neutron scattering technique. Journal of Mag.Mat.Mat., 2012, 324, 3811.
- Samoylenko S.A., Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Belushkin A.V., Haramus V.M., Trusova E.A., Shevchenko G.P., Gurin V.S., Bulavin L.A., Rakhmanov S.K., Savenko B.N., The studies of nanoparticles formed in silicate glasses doped by cerium and titanium oxides by means of small angle neutron scattering. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012017.
- Scheffzük Ch., Hempel H., Frischbutter A., Walther K., Schilling F.R., A device for sample rotation under external load for the simultaneous strain and orientation dependent material properties by means of TOF neutron diffraction. Journal of Physics, 2012, Conference Series 340, 012038.
- Sikolenko V.V., Efimov V.V., Troyanchuk I.O., Karpinsky D.V., Neutron Scattering studies of magnetic properties of the Pr<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Co<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>O<sub>3</sub> solid solution. Journal of Surface Investigation, 2012, 6, 713.
- 22. Sikolenko V., Efimov V., Troyanchuk I.O., Karpinsky D.V., Bushinsky M.V., Sheptyakov D., Structural and magnetic

#### 2. Наноструктурированные материалы (малоугловое рассеяние и дифракция)

- Anghel L., Balasoiu M., Ishchenko L.A., Stolyar S.V., Kurkin T.S., Rogachev A.V., Kuklin A.I., Kovalev Yu.S., Raikher Yu.L., Iskhakov R.S., Duca G., Characterization of biosynthesized nanoparticles produced by Klebsiella oxytoca. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351(1), 012005(7).
- Anghel L., Balasoiu M., Ishchenko L.A., Stolyar S.V., Rogachev A.V., Kurkin T.S., Kuklin A.I., Raikher Yu.L., Iskhakov R.S., Arzumanian G.M., SAXS Studies of Ultrasonicated Dispersions of Biomineral Particles Produced by Klebsiella oxytoca. Solid State Phenomena, Trans Tech Publications, 2012, 190, 621-624.
- Balasoiu M., Lebedev V.T., Orlova D.N., Bica I., Raikher Yu.L., SANS investigation of a ferrofluid based silicone elastomer microstructure. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351(1), 012014(9).
- Balasoiu M., Kuklin A.I., SANS contrast variation method applied in experiments on ferrofluids at MURN instrument of IBR-2 reactor. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351(1), 012012(10).
- Bica I., Balasoiu M., Kuklin A.I., Anisotropic silicone Rubber Based Magnetorheological Elastomer with Oil silicone and Iron Microparticles, Solid State Phenomena. Trans Tech Publications, 2012, 190, 645-648.
- 32. Булавін Л.А., Мороз К.О., Недяк С.П., Петренко В.І., Рівняння стану магнітної рідинної системи на основі води та магнетиту, стабілізованої лауриновою кислотою. Український фізичний журнал, 2012, 57(3), 351-355. (Bulavin L.A., Moroz K.O., Nedyak S.P., Petrenko V.I., The equation of state for a water-based magnetic fluid stabilized by lauric acid. Ukr. J. Phys., 2012, 57(3), 350-354.)



properties of  $La_{0.5}Ba_{0.5}CoO_{3\text{-d}}$  cobaltites. J. Phys. Conf. Series, 2012, IV quarter.

- То Тхань Лоан, Балагуров А.М., Левин Д.М., Краус М.Л., Бобриков И.А., Ву Ван Хай, Нгуен Хю Шинь, Структура и свойства сложного магнитного оксида La<sub>2/3</sub>Pb<sub>1/3</sub>Mn<sub>1-</sub> <sub>x</sub>Co<sub>x</sub>O<sub>3</sub>. Известия Тульского Государственного Университета, 2012, Вып. 2. с.194 – 206.
- Troyanchuk I.O., Karpinsky D.V., Bushinsky M.V., Sikolenko V., Efimov V., Cervellino A., Raveau R., The ferromagnetic and antiferromagnetic phases in anion deficient La<sub>0.5-x</sub>Pr<sub>x</sub>Ba<sub>0.5</sub>CoO<sub>3-d</sub> cobaltites. J. Appl. Phys., 2012, 112, 013916.
- Чан Т.А., Козленко Д.П., Кичанов С.Е., Лукин Е.В., Jirak Z., Савенко Б.Н., Влияние высокого давления на кристаллическую структуру и спектры рамановского рассеяния света манганита Pr<sub>0.8</sub>Na<sub>0.2</sub>MnO<sub>3</sub>. Известия Тульского Государственного Университета, 2012, Выпуск 1. стр.194-202.
- 26. Новак Д.М., Смирнов Л.С., Колесников А.И., Воронин В.И., Бергер И.Ф., Лапташ Н.М., Васильев А.Д., Флёров И.Н., Уточнение кристаллической структуры высокотемпературной фазы G0 в  $(NH_4)_2WO_2F_4$ . Кристаллография, 2012, принято в печать. (Novak D.M., Smirnov L.S., Kolesnikov A.I., Voronin V.I., Berger I.F., Laptash N.M., Vasil'ev A.D., Flerov I.N., Refinement of the crystal structure of the high-temperature phase G<sub>0</sub> in  $(NH_4)_2WO_2F_4$ (powder, X-ray, and neutron scattering), Crystallography Reports, Volume 58, Issue 1, pp 129-134)
- Iacobescu G.E., Balasoiu M., Bica I., Investigation of magnetorheological elastomer surface properties by atomic force microscopy. JINR Preprint, 2012, E14-2012-54.
- lacobescu G.E., Balasoiu M., Bica I., Investigation of magnetorheological elastomer surface properties by atomic force microscopy. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2012, accepted.
- 35. Казначеевская А.А., Кизима О.А., Булавин Л.А., Томчук А.В., Гарамус В.М., Авдеев М.В., Реорганизация кластерного состояния в растворе C60/Nметилпирролидон/вода: сравнительная характеристика данных динамического светорассеяния и малоуглового рассеяния нейтронов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2012, принята к печати.
- 36. Карпенко О.Б., Снегір С.В., Кизима О.А., Тропін Т.В., Авдеев М.В., Покровський В.О., Особливості іоноформування фулерену С60в мас-спектроміріі з лазерною десорбцію/іонізацію. Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии, 2012, принята к печати. (A.B. Karpenko, S.V. Snegir, O.A. Kyzyma, T.V. Tropin, M.V. Avdeev, V.A. Pokrovskiy, "Specific ion formation of fullerene C60 in mass spectrometry with laser desorption/ionization", Journal of nanosystems, nanomaterials, nanotechnology, 2012 (accepted, in Ukrainian)
- 37. Карпенко О.Б., Трачевський В.В., Філоненко О.В., Лобанов В.В., Авдеев М.В., Тропін Т.В., Кизима О.А., Снегір С.В., ЯМР-дослідження нерівноважного стану фулерену С60 в N-метил-2-піролідоні. Укр. фіз. журн., 2012, т. 57 №8, стр. 863-866. (О.В. Karpenko, V.V. Trachevskij, O.V. Filonenko, V.V. Lobanov, M.V. Avdeev, T.V. Tropin, O.A. Kyzyma, S.V. Snegir, "NMR study of non-

equilibrium state of fullerene C60 in N-methyl-2-pyrrolidone", Ukr. J. Phys., V. 57, No. 8, pp. 860-863 ,2012)

- Kichanov S.E., Kozlenko D.P., Belushkin A.V., Reutov V.F., Samoilenko S.O., Jirák Z., Savenko B.N., Bulavin L.A., Zubavichus Y.V., A study of formation of iron nanoparticles in aluminium matrix with helium pores. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012013.
- Kyrey T.O., Kyzyma O.A., Avdeev M.V., Tropin T.V., Korobov M.V., Aksenov V.L., Bulavin L.A., Absorption Characteristics of Fullerene C60 in N-Methyl-2-Pyrrolidone/Toluene Mixture. Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2012, Vol. 20, 341-344.
- Kyzyma O.A., Kyrey T.O., Avdeev M.V., Korobov M.V., Bulavin L.A., Aksenov V.L., Non-reversible solvatochromism in N-methyl-2-pyrrolidone/toluene mixed solutions of fullerene C60. Chem. Phys. Lett., 2012, accepted.
- Melnikova L., Mitroova Z., Timko M., Kovac J., Koralewski M., Pochylski M., Avdeev M.V., Petrenko V.I., Garamus V.M., Almasy L., Kopcansky P., Physical characterization of iron oxide nanoparticles in magnetoferritin. Magnetohydrodynamics, 2012, accepted.
- 42. Нагорный А.В., Петренко В.И., Авдеев М.В., Булавин Л.А., Рошта Л., Аксенов В.Л., Об определении структурных параметров полидисперсных магнитных жидкостей по данным рассеяния малоуглового нейтронов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2012, в печати. (А.V.Nagornyi, M.V.Avdeev, L.A.Bulavin, V.I.Petrenko, L Rosta, V.L.Aksenov. On determination of structural parametrs of polydisperse ferrofluids by small-angle neutron scattering Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques (2012), in press.)
- 43. Нагорный А.В., Петренко В.И., Булавин Л.А., Авдеев М.В., Аlmasy L., Rosta L., Аксенов В.Л., Структура магнитной жидкости магнетит/олеиновая кислота/декалин с избытком кислоты по данным малоуглового рассеяния нейтронов. Физика Твердого Тела, 2012, принята к печати. (A.V.Nagornyi, V.I.Petrenko, L.A.Bulavin, M.V.Avdeev, L.Almasy, L.Rosta, V.L.Aksenov. Structure of magnetite/oleic acid/decalin magnetic fluids with surfactant excess by small-angle neutron scattering data. Physics of the Solid State (2012), accepted.)
- Petrenko V.I., Avdeev M.V., Bulavin L.A., Vekas L., Rosta L., Garamus V.M., Willumeit R., Aksenov V.L., Diagnostic and analysis of aggregation stability of magnetic fluids for biomedical applications by small-angle neutron scattering. J. Phys.: Conf. Ser, 2012, 345, 012028.
- 45. Петренко В.И., Авдеев М.В., Турку Р., Нан А., Векаш Л., Аксенов В.Л., Рошта Л., Булавин Л.А., Структура порошков магнитных наночастиц с полимерным покрытием на основе замещенных пирролов по данным малоуглового рассеяния нейтронов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные нейтронные и исследования, 2012, в печати. (V.I.Petrenko, M.V.Avdeev, R.Turcu, A.Nan, L.Vekas, V.L.Aksenov, L.Rosta, L.A.Bulavin. Powder structure of magnetic nanoparticles with substituted pyrrole copolymer shells by small-angle neutron scattering. Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques (2012), in press.)
- 46. Stan C., Cristescu C.P., Balasoiu M., Duginov V.N.



- А.В., Авдеев 47. Томчук М.В., Аксенов В.Л., Булавин С.Н., Рожкова H.H., Schreiber Л.А., Ивашевская N., Schreiber J., Сравнительная характеризация водных дисперсий детонационных наноалмазов методом малоуглового рассеяния нейтронов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные нейтронные И исследования, 2012, №10, стр. 41-44. О.V. Tomchuk, М.V. Avdeev, V. L. Aksenov, V.M. Garamus, L.A. Bulavin, S.N. Ivashevskaya, N.N. Rozhkova, N. Schreiber, J. Schreiber, 2012, Comparative structural characterization of the water dispersions of detonation nanodiamonds by small-angle neutron scattering, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, Volume 6, Issue 5, pp 821-824
- Tropin T.V., Jargalan N., Avdeev M.V., Kyzyma O.A., Eremin R.A., Sangaa D., Aksenov V.L., Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: experimental and theoretical study of C60/NMP solution. JINR Preprint, 2012, in press.
- Tropin T.V., Jargalan N., Avdeev M.V., Kyzyma O.A., Eremin R.A., Sangaa D., Aksenov V.L., Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: experimental and theoretical study of C60/NMP solution. J. Mol. Liq., 2012, Vol. 175, pp. 4-11.
- 50. Тропин Т.В., Жаргалан Н., Авдеев М.В., Кизима О.А., Сангаа Д., Аксенов В.Л., Расчет функций распределения кластеров по размерам и данных МУРН для раствора C60/NMП. Физика твердого тела, 2012, принята к печати. (T.V. Tropin, N. Jargalan, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, D. Sangaa, V.L. Aksenov, "The calculation of clustersize distribution functions and SANS data for C60/NMP solution", Physics of Solid State, (2012), accepted).
- 51. Тропин Т.В., Кирей Т.А., Кизима Е.А., Феоктистов А.В., Авдеев М.В., Булавин Л.А., Рошта Л., Аксенов В.Л., Исследование смешанных растворов С60/NMП/Толуол методамиУФ-Вид спектроскопии и малоуглового рассеяния нейтронов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (Т.V.Tropin, T.O. Kyrey, O.A. Kyzyma, A.V. Feoktistov, M.V. Avdeev, L.A. Bulavin, L. Rosta, V.L. Aksenov, "Experimental Investigation of C60/NMP/Toluene Solutions by UV-Vis Spectroscopy and Small-Angle Neutron Scattering", Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2013) в печати.
- 52. Шуленина А.В., Авдеев М.В., Беседин С.П., Волков В.В., Хойду А., Томбац Е., Аксенов В.Л., Распределение по размерам агрегатов наночастиц в водной магнитной жидкости из данных атомно-силовой микроскопии. Кристаллография 2012, 57(10), 943-953. А.V. Shulenina, M.V. Avdeev, S.P. Besedin, V.V. Volkov, A. Hajdu, E. Tombacz, V.L. Aksenov, 2012, Size distribution of nanoparticle aggregates in an aqueous magnetic fluid based on atomic-force microscopy data, Crystallography Reports, Volume 57, Issue 6, pp 836-840
- 53. Шуленина А.В., Авдеев М.В., Аксенов В.Л., Велигжанин А.А., Зубавичус Я.В., Хойду А., Томбац Е., Исследование структуры биосовместимых магнитных наножидкостей методами рассеяния синхротронного излучения, Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2012. 2. 38–43. А.V



Shulenina, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, A.A. Veligzhanin, Ya.V. Zubavichus, A. Hajdu, E. Trombacz, 2012, A structural

# radiation-based X-ray scattering techniques, Mosco University Physics Bulletin , Volume 67, Issue 2 , pp 186-191

#### 3. «Мягкая материя», жидкости (малоугловое рассеяние и дифракция)

- 54. Avdeev M.V., Aksenov V.L., Gažová Z., Almásy L., Petrenko V.I., Gojzewski H., Feoktystov A.V., Šipošová K., Antošová A., Timko M., Kopčanský P., On the determination of the helical structure parameters of amyloid protofilaments by small-angle neutron scattering and atomic-force microscopy. J. Appl. Cryst., 2012, accepted.
- 55. Булавін Л.А., Соловйов Д.В., Горшкова Ю.Е., Жигунов О., Іваньков О.І., Горделій В.І., Куклін О.І., Структурний перехід в рідинній системі вода-ліпіди. Український фізичний журнал, 2012, 57, 623-627
- 56. Cherny Alexander Yu., Anitas Eugen M., Osipov Vladimir A., and Kuklin Alexander I. Small-angle scattering from generalized self-similar Vicsek fractals. Journal of Physics: conference series, 351, 2012.
- 57. Eremin R., Kholmurodov Kh., Avdeev M., Petrenko V., Yasuoka K., Molecular dynamics simulations on trans- and cis-decalins: the effect of partial atomic charges and adjustment of "real densities". International Journal of Chemistry, 2012, 4(1), 14-22.
- 58. Еремин Р.А., Холмуродов Х.Т., Петренко В.И., Авдеев M.B.. Молекулярно-динамическое моделирование растворов монокарбоновых кислот в декалине. Препринт ОИЯИ Р17-2012-23, 2012, 1-14.
- 59. Еремин Р.А., Холмуродов Х.Т., Петренко В.И., Авдеев М.В., Расчет объемных свойств декалинов и жирных кислот в декалине по данным молекулярнодинамического моделирования. Журнал Физической Химии, 2012, в печати.
- 60. Еремин Р.А., Холмуродов Х.Т., Петренко В.И., Rosta L., Авдеев М.В., Анализ малоуглового рассеяния нейтронов кислоты в бензоле раствором стеариновой С использованием молекулярно-динамического моделирования. Физика Твердого Тела, 2012, принята к печати
- 61. Еремин Р.А., Холмуродов Х.Т., Петренко В.И., Авдеев Молекулярно-динамическое M.B.. моделирование взаимодействия растворитель-растворенное вещество в неполярных растворах олеиновой кислоты. Поверхность. синхротронные Рентгеновские, нейтронные и исследования, 2012, принята к печати.
- 62. Филиппова С.Н., Сургучева Н.А., Ермакова Е.В., Киселев М.А., Терехова Л.П., Синева О.Н., Галатенко О.А., Забелин А.В., Гальченко В.Ф., Изучение фазовоструктурного состояния фосфолипидных фракций актинобактерий в связи с условиями их хранения. Микробиология, 2012, принята в печать.
- 63. Грузинов А.Ю., Киселев М.А., Ермакова Е.В., Забелин А.В., Термотропные фазовые переходы в модельных мембранах верхнего слоя кожи, построенных на основе церамида 6. Физику твердого тела, 2012, направлена.
- 64. Gorshkova Y.E., Ivankov O.I., Kuklin A.I., Gordeliy V.I., Investigation of DESO/LIPID membranes interaction by X-Ray scattering. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351.012006.

65. Ivankov O.I., Soloviov D.V., Gorshkova Y.E., Zhigunov A., Bulavin L.A., Gordelii V.I., Kuklin A.I., Phase transition in DPPC/POPC lipid mixtures by SANS and SAXS, Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Alushta, Ukraine, 2012, pp. 47-48.

study of biocompatible magnetic nanofluid with synchrotron

3. ПУБЛИКАЦИИ

Moscow

- 66. Иваньков О.И., Соловьев Д.В., Горшкова Ю.Е., Жигунов А., Булавин Л.А., Горделий В.И., Куклин А.И., Исследование фазовых переходов в смеси липидов ДПФХ/ПОФХ методами малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния, XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция "Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного ростояния", Санкт-Петербург, Россия, 2012, pp. 123.
- 67. Киселев М.А., Ермакова Е.В., Грузинов А.Ю., Забелин А.В., Формирование длиннопериодной фазы модельных мембранах верхнего слоя кожи. ЖЭТФ, 2012, направлена.
- Kuklin A.I., Murugova T.N., Ivankov O.I., Rogachev A.V., Ishchenko A.V., Mishin A.V., Soloviov D.V., Kovalev Y.S., 68 Gordelii V.I., Phase transition in DPPC/POPC lipid mixtures by SANS and SAXS. Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Alushta, Ukraine, 2012, pp. 56.
- Kuklin A.I., Murugova T.N., Ivankov O.I., Rogachev A.V., 69 Soloviov D.V., Kovalev Y.S., Ishchenko A.V., Zhigunov A., Kurkin, Gordeliy V.I., Comparative study on low resolution structures of apoferritin via SANS and SAXS. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012009.
- 70. Murugova T.N., Ivankov O.I., Ossina N.K., Islamov A.K., Zhigunov A., Agladze K.I., Structure and properties of aggregates of photosensitive molecules AzoTAB in water solution and complexes AzoTAB with RNA. Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Alushta, Ukraine, 2012, pp. 61-62.
- 71. Муругова Т.Н., Иваньков О., Осина Н.К., Исламов А.Х., К.И., Куклин А.И., Агладзе Исследования мицеллообразования азобензен триметиламмоний бромида методом малоуглового рассеяния нейтронов. Труды МФТИ, 2012, в печати.
- 72. Муругова Т.Н., Иваньков О.И., Осина Н.К., Исламов А.Х., Жигунов А., Агладзе К.И., Структура и свойства агрегатов фоточувствительного поверхностно-активного вещества азотаб в растворе и его комплексов с РНК. XXII Международное совещание И Международная молодежная конференция "Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного ростояния", Санкт-Петербург, Россия, 2012, pp. 30.
- 73. Петренко В.И., Авдеев М.В., Garamus V.M., Kubovcikova М., Булавин Л.А., Timko М., Almasy L., Аксенов В.Л., Kopcansky P., Структура амилоидных агрегатов лизоцима по данным малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Физика Твердого Тела, 2012, принята.
- Soloviov D.V., Gorshkova Y.E., Ivankov O.I., Zhigunov A.N., 74. Bulavin L.A., Gordelii V.I., Kuklin A.I., Ripple Phase Behavior



in Mixtures of DPPC/POPC lipids: SAXS and SANS Studies. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012010.

75. Soloviev A.G., Murugova T.N., Islamov A.H., Kuklin A.I., FITTER. The package for fitting a chosen theoretical multiparameter function through a set of data points. Application to experimental data of the YuMO spectrometer. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012027, 1-15.

#### 4. Тонкие пленки (рефлектометрия и поляризованные нейтроны)

- 78. Боднарчук И.А., Боднарчук В.И., Ярадайкин С.П., Оценка сечения рассеяния нейтронов на спиновых волнах в тонких ферромагнитных слоях. Физика Твердого Тела, 2012, принята к печати
- 79. Kozhevnikov S.V., Ott F., Radu F., Data representations of Zeeman spatial beam splitting in polarized neutron reflectometry. Journal of Applied Crystallography, 2012, 45, 814-825.
- 80. Kozhevnikov S.V., Radu F., Nikitenko Yu.V., Aksenov V.L., Reflection of Neutrons from a Magnetic Fulm Placed in Static and Oscillating Magnetic Fields Journal of Surface Investigation. X\_ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2012, Vol. 6, No. 5, pp. 784–795.
- 81. Kozhevnikov S.V., Ignatovich V.K., Ott F., Rühm A., Major J., Experimental determination of the neutron channeling length in a planar waveguide, ЖЭТФ, 2012, направлено.
- 82. Kozhevnikov S.V., Keller T., Khaydukov Yu.N., Ott F., Rühm A., Thiaville A., Torrejón J., Vázquez M., Major J., Use of waveguides for polarized neutron studies at the micrometric scale. Journal of Instrumentation, 2012, submitted.
- 83. Kozhevnikov S.V., Keller T., Khaydukov Yu.N., Ott F., Rühm A., Major J., Polarizing Fe-Co-Fe planar waveguides for the production of neutron microbeams. Physics Procedia, 2012, submitted.

#### Атомная и магнитная динамика (неупругое нейтронное рассеяние)

- 90. Baddour-Hadjean R., Smirnov M.B., Smirnov K.S., Kazimirov V., Gallardo-Amores J.M., Amador U., Arroyo-de Dompablo M.E., Pereira-Ramos J.P., Lattice dynamics of β-V2O5: raman spectroscopic insight into atomistic structure of a high pressure vanadium pentoxide polymorph. Chemistry of Materials, 2012, 51, 3194.
- 91. Bator G., Sawka-Dobrowolska W., Sobczyk L., Owczarek M., Pawlukojć A., Grech E., Nowicka-Scheibe J., Hydrogen bonded NHO chains formed by chloranilic acid (CLA) with 4,40-di-t-butyl-2,20-bipyridyl (dtBBP) in the solid state. Chemical Physics, 2012, 392, 114-121.
- 92. Blagoveschenkii N.M., Novikov A.G., Savostin V.V., Selfdiffusion in liquid lithium from coherent quasielastic neutron scattering. Physica B, 2012, 407, 4567.
- 93. Благовещенский Н.М., Новиков А.Г., Савостин В.В., Самодиффузия в жидких литии и свинце из данных по когерентному квазиупругому рассеянию нейтронов. ФТТ, 2012, направлено в журнал.
- 94. Благовешенский Н.М., Новиков А.Г., Рожкова Н.Н., Анапиз квазиупругого рассеяния нейтронов концентрированной водной дисперсией наноалмазов. ФТТ, 2012, направлено в журнал.

- 76. Stepanek M., Angelov B., Ivankov O., Hajduova J., Slouf M., Co-assembly of double hydrophilic block polyelectrolyte with oppositely charged surfactant. Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Alushta, Ukraine, 2012, pp. 25.
- 77. Tropin T.V., Schmelzer J.W.P., Gutzow I., Schick C., On the Theoretical Determination of the Prigogine-Defay Ratio in Glass Transition. J. Chem. Phys., 2012, Vol. 136, 124502/14.

- 84. Nikitenko Yu.V., Magnetic Neutron-Wave Resonator, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2012, 6, 805-816.
- 85 Rühm A., Kozhevnikov S.V., Ott F., Radu F., Major J., Magnetic planar waveguides as combined polarizers and spin-flippers for neutron microbeams. NIM A (submited). Preprint JINR E13-2012-115 (2012).
- Rühm A., Kozhevnikov S.V., Ott F., Radu F., Maior J., 86 Magnetic planar waveguides as combined polarizers and spin-flippers for neutron microbeams. NIM A (submited).
- 87. Кожевников С.В., Раду Ф., Никитенко Ю.В., Аксёнов В.Л., Отражение нейтронов от магнитной плёнки, помещённой в статическое и осциллирующее магнитные поля. Рентгеновские, Поверхность. синхротронные и нейтронные исследования, 2012, 10, 1-13.
- 88. Кожевников C.B., Ott F., Torrejón J., Vázquez M., Thiaville А., Применение поляризованного микропучка нейтронов для исследования магнитной микроструктуры. ФТТ, 2012, направлено. Препринт, 2012, ОИЯИ Р14-2012-116.
- 89. Никитенко Ю.В., Магнитный резонатор нейтронной волны. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2012, №10, 25-36

# 95. Bujakiewicz-Korońska R., Hetmańczyk Ł., Garbarz-Glos B.,

- Budziak A., Kalvane A., Bormanis K., Drużbicki K., Low temperature measurements by infrared spectroscopy in CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> ceramic. Central European Journal of Physics, 2012, 1-7.
- 96. Дубовский О.А., Орлов А.В., Генерация солитонов и бисолитонов нового типа в кристаллах ультразвуком и гиперзвуком. Письма в ЖЭТФ, 2012, т.96, в.7, стр.509-Orlov A.V., Ultrasound and hypersound 514. (O.A., generation of new-type solitons and bisolitons in crystals, JETP Letters , Volume 96, Issue 7 , pp 461-466)
- 97. Дубовский О.А., Семенов В.А., Орлов А.В., Солитонная микродинамика теплопроводности плутония и урана в области температур мартенситных фазовых переходов. ФТТ, 2013, т.55, в.2, с.354-365.
- 98. Дубовский О.А., Орлов А.В., Перспективы нейтронной спектрометрии генерируемых ультразвуком гиперзвуком связанных мультифононных солитонов и бисолитонов нового типа. ФТТ, 2012, направлено в журнал.
- 99. Drużbicki K., Mikuli E., Kocot A., Ossowska-Chruściel M. D., Chruściel J., Zalewski S., Complex Vibrational Analysis of an Antiferroelectric Liquid Crystal Based on Solid State Oriented Quantum Chemical Calculations and Experimental Molecular

Annual

Spectroscopy. Journal of Physical Chemistry A, 2012, 116, 7809-7821.

- 100. Drużbicki K., Kocot A., Mikuli E., Ossowska-Chruściel M.D., Chruściel J., Temperature-Dependent Infrared Spectroscopy Studies of a Novel Antiferroelectric Liquid-Crystalline Thiobenzoate. Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116, 11332-11343
- 101. Hetmanczyk Ł., Górska N., Hetmanczyk J., Mikuli E., Natkaniec I., Phase transitions in [Co(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> investigated by neutron scattering methods. Chemical Physics, 2012, accepted.
- 102. Juszyńska E., Hołderna-Natkaniec K., Massalska-Arodź M., Natkaniec I., Ściesińska E., Ściesiński J., Formation of hydrogen bonds; hydroxyl and methyl groups dynamics in 2, 2-dimethylbutan-1-ol and 2,3-dimethylbutan-2-ol: DFT, IINS and IR investigations. Acta Physica Polonica A, 2012, 122, 765-775.
- 103. Kolek Ł., Massalska-Arodź M., Majda D., Wantusiak B., Zalewski S., Kula P., Studies of Phase Diagram of a Liquid Crystal with 4-[2-(3-Fluorophenyl)ethyl]biphenyl Core of Molecules. Acta Physica Polonica A, 2012, Vol. 122, No. 2, 370-374
- 104. Новиков А.Г., Топология и водородная связанность в сверхкритической воде. ФТТ, 2012, направлено в журнал.
- 105. Pajzderska A., Chudoba D.M., Mielcarek J., Wąsicki J.

#### 6. Прикладные исследования (текстура, напряжения, геологические материалы)

- 111. Бокучава Г.Д., Папушкин И.В., Сумин В.В., Азнабаев Д., Мухаметулы Б., Шептяков Д.В., Балагуров А.М., Микродеформации в сталях с дисперсионным упрочнением. Письма в ЭЧАЯ, 2013, т.10, № 2 (179), с. 245-252.
- 112. Чуканов А.Н., Никитин А.Н., Васин Р.Н., Жачко М.В, Исследование повреждаемости углеродистой стали методом акустической эмиссии. Известия ТулГУ, Серия Естественные науки, 2012, №1 (часть 1), стр. 203-210.
- 113. Иванкина Т.И., Локаичек Т., Никитин А.Н., Сангаа Д., Нейтронографические исследования внутренних деформаций, текстуры и свойств горных пород. Ученые записки Монгольского госуниверситета, Серия Физика, 2012, стр. 67-76.
- 114. Никитин А.Н., Васин Р.Н., Иванкина Т.И., Круглов А.А., Локаичек Т., Фан Л.Т.Н., Особенности прохождения квазипродольных упругих волн через границу раздела изотропной и анизотропной сред: теоретическое и экспериментальное исследование. Кристаллография, 2012, т. 57, №4, стр. 628-637. (Nikitin A.N., Vasin R.N., Ivankina T.I., Kruglov A.A., Lokajicek T., Phan L.T.N., 2012, Peculiarities of quasi-longitudinal elastic wave propagation through the interface between isotropic and anisotropic media: Theoretical and experimental study Crystallography Reports, Volume 57, Issue 4, pp 560-568)
- 115. Никитин А.Н., Васин Р.Н., Иванкина Т.И., Круглов А.А., Τ., Фан Локаичек Л.Т.Н., Исследование сейсмоакустических свойств некоторых поликристаллических материалов, используемых в ядерных реакторах. Кристаллография, 2012, т. 57, №5, стр. 762-773. (Nikitin A.N., Vasin R.N., Ivankina T.I., Kruglov A.A., Lokajicek T., Phan L.T.N., 2012, Investigation into the seismoacoustic properties of specific polycrystalline



ual Report



- 106. Pieper J., Trapp M., Skomorokhov A., Natkaniec I., Peters J., Renger G., Temperature-dependent vibrational and conformational dynamics of photosystem II membrane fragments from spinach investigated by elastic and inelastic neutron scattering. Biochimica et Biophysica Acta, 2012, 1817, 1213-1219.
- 107. Rachwalska M., Natkaniec I., Urbanek Z.H., Majda D., Inelastic Neutron Scattering (INS) Study of Low Frequency Vibrations of Acid K Salt of (E)-2-Hydroxyimino-2-Cyanoacetic Acid Ethyl Ester and its Phase Situation by DSC Method. Z. Phys. Chem., 2012, 226, 291-314.
- 108. Семенов В.А., Дубовский О.А., Орлов А.В., Савостин Д.В., Сударев В.В., Спектр частот вольфрама при температурах 293 и 2400 К. ФТТ, 2012, направлено в журнал.
- 109. Starosta W., Sartowska B., Łyczko K., Maurin J., Pawlukojć A., Waliś L., Buczkowski M., A method for production of nanoMOF and prelimiary characterization by selected analytical techniques. Nukleonika, 2012, 57, 581-583.
- 110. Wantusiak B., Zalewski S., Suchodolski P., Chruściel J., Ossowska-Chruściel M.D., Phase transitions of new antiferroelectric bent-core thiobenzoate. Phase Transitions, 2012, Vol. 85, No. 5, 444-44

materials used in nuclear reactors, Crystallography Reports, Volume 57, Issue 5, pp 682-692)

- 116. Никитин А.Н., Локаичек Т., Круглов А.А., Васин Р.Н., Зель И.Ю., Особенности распространения ультразвука через слоистые структурно-неоднородные твердые тела. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2012, №12, стр. 11-18. (Nikitin A.N., Lokajicek T., Kruglov A.A., Vasin R.N., Zel' I.Yu., 2012, Peculiarities of ultrasound propagation through layered structurally inhomogeneous solid bodies, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, Volume 6, Issue 6, pp 954-960)
- 117. Папушкин И.В., Бокучава Г.Д., Сумин В.В., Балагуров А.М., Шептяков Д.В., Изучение микродеформации в сталях, вызванной дисперсионным упрочнением. Физика твердого тела, 2013, направлено в печать.
- 118. Sumin V.V., Papushkin I.V., Vasin R.N., Venter A., Balagurov A.M., Determination of the residual stress tensor in textured zirconium alloy by neutron diffraction. Journal of Nuclear Materials, 2012, v. 421, pp. 64 – 72.
- 119. Taran Yu.V., Balagurov A.M., Correction of a neutron diffraction peak shift due to a partial immersion of a gauge volume in an unstressed sample. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2012, v. 679, pp. 19 – 24.
- 120. Taran Yu.V., Balagurov A.M., Schreiber J., Evans A., Venter A.M., Residual stresses in biaxially fatigued austenitic stainless steel sample of cruciform geometry. Journal of Physics: Conference Series, 2012, v. 340, pp. 012099 (1-9).
- 121. Васин Р.Н., Иванкина Т.И., Круглов А.А., Локаичек Т., Никитин А.Н., Фан Л.Т.Н., Некоторые экспериментальные результаты о прохождении квазипродольных упругих волн в поликристаллическом пористом графите.

Известия ТулГУ, Серия Естественные науки, 2012, №2, стр. 177-190.

122. Васин Р.Н., Никитин А.Н., Иванкина Т.И., Нейтронографический текстурный анализ горных пород. ЭНИ "Георазрез" (georazrez.uni-dubna.ru), 2012, №3 (11)

#### 7. Инструменты и методы

- 124. Калинин И.В., Морозов В.М., Новиков А.Г., Пучков А.В., Савостин В.В., Сударев В.В., Характеристики спектрометра ДИН-2ПИ с нейтронным концентратором. ФТТ, 2012, направлено в журнал.
- 125. Kuklin A.I., Balasoiu M., Kutuzov S.A., Kovalev Y.S., Rogachev A.V., Erhan R.V., Smirnov A.A., Kirilov A.S., Ivankov O.I., Soloviov D.V., Kappel W., Stancu N., Cios M., Cios A., Gordeliy V.I., Magnetic system for small angle neutron scattering investigations of nanomaterials at YuMO-SANS instrument. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012022.
- 126. Kuklin A., Islamov A., Balasoiu M., Murugova T., Gordeliy V., Past and present of time-of-flight small-angle neutron
- 129. Никитенко Ю.В., Способ определения пространственного распределения намагниченности нанослоя. Патент № 2444727 от 10.03.2012 г.

123. Wenk H.R., Vasin R.N., Kern H., Matthies S., Vogel S.C., Ivankina T.I., Revisiting elastic anisotropy of biotite gneiss from the Outokumpu scientific drill hole based on new texture measurements and texture-based velocity calculations. Tectonophysics. 2012, Vol. 570-571, p. 123-134.

#### струменты и методы

scattering at IBR-2. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351(1), 012001(6).

- 127. Nyam-Osor M., Soloviov D.V., Kovalev Y.S., Zhigunov A., Rogachev A.V., Ivankov O.I., Erhan R.V., Kuklin A.I., Silver behenate and silver stearate powders for calibration of SAS instruments. Journal of Physics: Conference Series, 2012, 351, 012024.
- 128. Rogov A.V., Erhan R.V., Ivankov O.I., Soloviov D.V., Sirotin A.P., Kuklin A.I., Optimization of a chopper system for the 4th channel of the IBR-2M pulsed reactor. Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Alushta, Ukraine, 2012, pp. 43.

#### Патенты

130. Никитенко Ю.В., Способ исследования магнитнонеколлинеарного состояния нанослоя, Патент № 2450260 от 10.05.2012 г..

#### ОТДЕЛ КОМПЛЕКСА СПЕКТРОМЕТРОВ ИБР-2

- 131. Kulikov S., Belyakov A., Bulavin M., Mukhin K.et al. Advanced pelletized cold moderators for the IBR-2M research reactor for condense matter research. Proceedings of International Conference of AdvancedNeutron Sources, ICANS XX, 4-9 of March, Bariloche, Argenrina, id 341, 2012.
- 132. Kulikov S., Shabalin E.. Status and perspective of development of cold moderators at the IBR-2 reactor, Journal of Physics: Conference Series 351, 012023 doi:10.1088/1742-6596/351/1/012023, 2012.
- 133. Erhan R.V., Manoshin S., Pepy G., Belushkin A.V.. Monte Carlo simulations of neutron optical elements for a SANS spectrometer at the IBR-2M pulsed reactor, Journal of Neutron Research, 2012, in press.
- 134. Erhan R.V., Manoshin S., Bodnarchuk V., Belushkin A.and loffe A.. Simulations of performance of the time-gradient magnetic field spin echo SANS diffractometer at the IBR-2M pulsed reactor, Proceeding of 9th International workshop on Polarised Neutrons in Condensed Matter Investigations, PNCMI'2012, Paris, 02-05 July 2012.
- 135. Bogdzel A., et al. Experiment Automation System for a Neutron Powder Diffractometer. Preprint of the JINR P13-2012-46. Dubna, 2012. Submitted to Journal Scientific Instruments and Methods.
- 136. Shvetsov V., et al. 8-Channel System for Neutron-Nuclear Investigation by Time-of-Flight Method. Submitted to Journal Scientific Instruments and Methods.
- 137. Kirilov A.. Current state and prospects of the IBR-2M instrument control software. Preprint of the JINR P10-2011-101. Dubna, 2011. Submitted to Journal Scientific Instruments and Methods.
- 138. Veleshki S., Kirilov A., Murashkevich S., Petukhova T.. Development of components for the user interface for the

spectrometers of the IBR-2 reactor. Materials of a NOBUGS Workshop 2012, NOBUGS RAL (Didcot UK), 24-26 Sept. 2012. http://epubs.stfc.ac.uk/work details?w=63706

- 139. Маношин С.и др. Программный комплекс "VITES polarize моделирования neutron suite" для нейтронных инструментов с поляризованными нейтронами. XXII совешание Международная Международное И молодежная конференция «Использование рассеяния в исследованиях конденсированного нейтронов состояния», РНИКС-2012, 15-19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр. 174.
- 140. Рубцов А.Б., Боднарчук В.И., Маношин С.А., Ioffe A., Mattauch S.. Развитие метода нейтронного спин-эха с использованием вращающихся магнитных полей. XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния», РНИКС-2012, 15–19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр.103.
- 141. Чураков А.В.. Измерение профилей некоторых пучков ИБР-2М. XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния», РНИКС-2012, 15–19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр.105.
- 142. Богдзель А.А., Пантелеев Ц., Милков В., Белушкин А., Кирилов А.С., Журавлев В.В., Приходько В.И., Левчановский Ф.В., Буздавин А.П.. Электроника кольцевого 96-ти канального нейтронного детектора. XXII Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного



состояния», РНИКС-2012, 15–19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр.156.

- 143. Пантелеев Ц.Ц., Богдзель А.А., Милков В., Белушкин А., Кирилов А.С., Журавлев В.В., Приходько В.И., Левчановский Ф.В., Буздавин А.<u>П</u>.. Кольцевой многосекционный детектор тепловых нейтронов. XXII Международное совещание И Международная молодежная конференция «Использование рассеяния исследованиях конденсированного нейтронов в состояния», РНИКС-2012, 15-19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр. 180.
- 144. Сиротин А.П., Широков В.К., Кирилов А.С., Петухова Т.Б.. Модернизация систем управления и контроля экспериментальных установок на реакторе ИБР-2М. XXI
- 145. Международное совещание и Международная молодежная конференция «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния», РНИКС-2012, 15–19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Сборник тезисов, стр. 187.
- 146. Milkov V, Panteleev Ts., Bogdzel A., Belushkin A., Kulikov S., Zhuravlev V., Prikhodko V., Levtchanovski F., Buzdavin A. Multisection 2-π detector of termal neutrons for diffraction studies on microsamples in axial geometry. International conference nuclear power for the people, Nuclear renaissance and Fukushima, 10-13 October, 2012, Hissar, Bulgaria. To be published
- 147. Chernikov A., Buzdavin A.. Variable temperature horizontal cryostat based GM cryocooler for operating in 1.5-300 K range. 7th International Workshop on Sample Environment at Neutron Scattering Facilities, 16-20 September 2012, Sydney, Australia, Book of abstract, p.45.
- Патенты
- 148. Богдзель А., Пантелеев Ц., Милков В.. "Нейтронный спектрометр на базе протонного телескопа", патент на изобретение RU 2 445 649 C1.

#### ГРУППА ЯДЕРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

- 149. Богдзель А., Пантелеев Ц., Милков В.. "Нейтронный спектрометр на базе протонного телескопа", патент на изобретение RU 2 445 649 C1.
- 150. Пепелышев Ю.Н., Рогов А.Д., Цогтсайхан Ц.. Статистический анализ флуктуаций энергии импульсов реактора ИБР-2М. Сообщение ОИЯИ Р13-2012-131, Дубна, 2012.
- 151. Драгунов Ю.Г., Ананьев В.Д., Виноградов А.В., Долгих А.В., Едунов Л.В., Пепелышев Ю.Н., Рогов А.Д. и др. Модернизация импульсного исследовательского реактора ИБР-2. АЭ, 7/2012.- т.113, №1, стр.29-34. (Dragunov Yu. G., Tretiyakov I.T., Lopatkin A.V., Romanova N.V., Lukasevich I.B., Ananyev V.D., Vinogradov A.V., Dolgikh A.V., Yedunov L.V., Pepelyshev Yu.N.,

Modernization of the IBR-2 pulsed research reactor, Atomic Energy Volume 113, Issue 1, pp 29-38

- 152. Пепелышев Ю.Н., Тайыбов Л.А., Гарибов А.А., Мехтиева Р.Н. Экспериментальная оценка параметров кинетики ИБР-2М по стохастическим шумам мощности. АЭ, 2012, т.114, № 4, с. 202-205. (Препринт ОИЯИ Р13-2012-16. Дубна, 2012).
- 153. Ананьев В.Д., Пепелышев Ю.Н., Рогов А.Д.и др. Энергетический пуск модернизированного реактора ИБР-2 (ИБР-2М). Сообщение ОИЯИ 13-2012-42, Дубна, 2012 г.
- 154. Ананьев В.Д., Пепелышев Ю.Н., Рогов А.Д.и др. Физический пуск модернизированного реактора ИБР-2 (ИБР-2М). Сообщение ОИЯИ 13-2012-41, Дубна, 2012 г.

#### ОТДЕЛЕНИЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

#### Экспериментальные работы

- 155. Zeynalov Sh., Zeynalova O.V., Hambsch F.-J. and Oberstedt S. «A new approach to prompt fission neutron TOF data treatment», Physics Procedia 31 (2012) 132 140.
- 156. Ruskov I., Kopatch Yu.N., Panteleev Ts., Skoy V.R., Shvetsov V.N., Dermendjiev E., Janeva N., Pikelner L.B., Grigoriev Yu.V., Mezentseva Zh.V., Ivanov I., Prompt Gamma Emission in Resonance Neutron Induced Fission of <sup>239</sup>Pu, Physics Procedia, Volume 31, 2012, P. 35-42.
- 157. Zeynalov Sh., Zeynalova O., Nazarenko M.A., Hambsch F.-J., Oberstedt S., A New Design of Fission Detector for Prompt Fission Neutron Investigation AIP Conf. Proc. 1487, 405 (2012); doi: 10.1063/1.4758984
- 158. Zeynalova O.V., Zeynalov Sh., Nazarenko M.A., Hambsch F.-J. and Oberstedt S., Cross correlation method application to prompt fission neutron investigation» AIP Conf. Proc. 1487, 207 (2012); doi: 10.1063/1.4758960
- 159. Danilyan G.V., Klenke J., Krakhotin V.A., Kopatch Yu.N., Novitsky V.V., Pavlov V.S., Shatalov P.B., T- Odd Angular Correlations in the Emission of Prompt Neutrons in 235U Fission Induced by Polarized Neutrons, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 11
- 160. Gagarski A.M., Gonnenwein F., Guseva I.S., Zavarukhina T.A., Kopatch Yu.N., Kuzmina T.E., Mutterer M., Nesvizhevsky V., Petrov G.A., Soldner T., Tiurin G., T-Odd Asymmetry Effects of the Light Particles Emission in the Heavy Nucleus Ternary Fission by the Cold Polarised Neutrons, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 27
- 161. Granja C., Kraus V., Kopatch Yu., Pospisil S., Telezhnikov S.A., Online Coincidence Detection of Fission Fragments and Light Charged Particles, In: XIX International Seminar



on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 35

- 162. Grigoriev Yu.V., Khlustin D.V., Mezentseva Zh.V., Ryabov Yu.V., Investigation of the Sub-Threshold Fission Cross Section for 232Th and 238U, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 44
- 163. Sharapov E.I. et al., Parity-Violating Gamma Asymmetry in np-Capture(the npdgamma Collaboration), XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei., ISINN-19, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, E3-2012-30, (2012) p. 188-194.
- 164. Vesna V.A, Gledenov Yu.M., Lazebnik I.M., Nesvizhevsky V.V., Sedyshev P.V., Shulgina E.V. Measurement of P-odd Effect in Radiative Cross Section on Natural Lead. In: Proc. of the 19 International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei (ISINN-19), Dubna, 2012, E3-2012-30, p. 391-395.
- 165. Oprea A., Oprea K., Gledenov Yu.M., Sedyshev P.V. Evaluation of Parity Violation Effects for Thermal Neutrons Scattering on <sup>204</sup>Pb Nucleus. In: Proc. of the 19 International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei (ISINN-19), Dubna, 2012, E3-2012-30, p. 373-377.
- 166. Oprea A., Oprea K., Gledenov Yu.M., Sedyshev P.V., Sedysheva M. V. Differential Cross Section Evaluation in (n, $\alpha$ ) Reaction with Fast Neutrons Using Hauser-Feshbach Formalism. In: Proc. of the 19 International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei (ISINN-19), Dubna, 2012, E3-2012-30, p. 183-187.
- 167. Gledenov Yu.M., Nesvizhevsky V.V., Sedyshev P.V., Shul'gina E. V., Vesna V. A. A method to measure neutron polarization using P-even asymmetry of γ-quantum emission in the neutron-nuclear interaction. Ядерная физика, 2012, т.75, №7, с.836-839.
- 168. Khuukhenkhuu G., Gledenov Yu.M., Sedysheva M.V., Odsuren M. Statistical Model Analysis of  $(n,\alpha)$  Cross Sections Averaged over the fission neutron spectrum. In: Proc. of the 19 International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei (ISINN-19), Dubna, 2012, E3-2012-30, p. 391-395.
- 169. Oprea C., Oprea A., Mihul A., Cross section evaluation in the photodisintegration of 152Sm isotope Physics Procedia, ISSN:1875-3982, Изд:Elsevier, 31, III, 178-184, 2012
- 170. Суховой А.М., Хитров В.А., Основные положения и результаты применения модифицированной модели распределения ширин нейтронных резонансов в области масс 35 ≤A ≤ 249, Ядерная физика, 2013, т. 76(1), сс. 70-81.
- 171. Sukhovoj A.M., Jovancevic N., Furman W.I., Khitrov V.A. General Trend and Local Variations of Neutron Resonance Cascade Gamma-Decay Radiative Strength Functions. JINR communication E3-2012-100, Dubna, 2012.
- 172. Sukhovoj A.M., Khitrov V.A. Modified model of neutron resonances width distribution. Results of neutron reduced width approximation for mass region 35 ≤A ≤ 249, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, pp. 195-212.
- 173. Sukhovoj A. M., Furman W.I., Khitrov V.A. Modified model of neutron resonances width distribution. Estimation of the quality of results and interpretation of available physics



information, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, pp. 213-222.

- 174. Sukhovoj A.M., Khitrov V.A., Modified model of neutron resonances width distribution. Results of total gamma-widths approximation, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, pp. 223-230.
- 175. Furman W., Adam J., Artyushenko M. et al., New ADS scheme with deep subcritical multiplying core for energy production and transmutation of radioactive wastes. First experimental results and perspectives, In Book of abstracts of LXII International conference "NUCLEUS 2012", June 25-30, 2012, Voronezh, Russia, p.35, Saint-Petersburg, 2012.
- 176. Adam J., Baldin A., Berlev A., Furman W., Gundorin N. et al., Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON, In book of abstracts of the XXI International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems, Dubna, Russia, September 10-15, 2012, p. 37, Dubna 2012;
- 177. Furman W., Adam J., Baldin A., Gundorin N.et al., "Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON", In Proceedings of XXI IHEP PoS(MC2000)086
- 178. Zavorka L., Adam J., Furman W. et al., A summary of experimental results on the reactions in uranium samples irradiated with a deuteron beam of energies up to 8 GeV at the QUINTA target, PoS (Baldin ISHEPP XXI) 089
- 179. Suchopar M., Wagner V., Vrzalova J.et al., MonteCarlo simulation of natural uranium setups irradiated with relativistic deuterons by means of MCNPX code, PoS (Baldin ISHEPP XXI) 091
- 180. Артюшенко М.Ю, Воронко В.А., Гусак К.В. и «Е и Т РАО» коллаборация, Исследование пространственных распределений реакции радиационного захвата нейтронов и деления в массивной урановой мишени, облучаемой дейтронами с энергий 1-8 ГэВ (Установка «КВИНТА-М»), Препринт ОИЯИ Р1-2012-147, Дубна 2012.
- 181. Stephenson S.L, Crawford B.E., Furman W.I., Lychagin E.V., Muzichka, A.Yu, Nekhaev G.V., Sharapov E.I., Shvetsov V.N., Strelkov A.V., Levakov B.G., Lyzhin A.E., Chernukhin Yu. I., Howell C. R., Mitchell G. E., Tornow W., Showalter-Bucher R.A., Experiment on direct n-n scattering the radiation-induced outgassing complication, Neutron Spectroscopy, Nuclear Physics, Section A (2012), pp. 33-43
- 182. Mitsyna L.V., Popov A.B., Calculation of corrections for precise obtaining the n,e-scattering length from the angular anisotropy of slow neutron scattered by noble gases, In: Neutron spectroscopy, nuclear structure, related topics. XIX Int. Seminar on Interaction of neutron with nuclei. Dubna, Russia, JINR-E3-2012-30, p.113, Dubna (2012).
- 183. Gould C.R., Sharapov E.I. <sup>176</sup>Lu/<sup>175</sup>Lu thermometry for the Oklo natural reactors: A new examination of old data, Physical Review C, v. 85, 024610 1-5, (2012)
- 184. Gould C. R., Sharapov E. I. La-138/139 isotopic data and neutron fluences for Oklo RZ10 reactor, Physical Review C, v. 86, 027601 1-3, (2012)



- Gould C.R., Sharapov E.I., Sonzogni A.A. Gamma-ray fluxes in Oklo natural reactors, Physical Review C, v. 86, 054602 1-6,(2012)
- Pokotilovski Yu.N., UCN transport simulation in solid deuterium crystals, Nucl. Instr. Meth. A675 (2012) 29-33; arXiv:1111.1963[nucl-ex].
- 187. Pokotilovski Yu.N. Possible polarized neutron-nucleus scattering search for a new spin-dependent nucleon-nucleon coupling in a Fm range, Pis'ma v ZhETF 96 (2012) 221-225; JETP Lett. 96 (2012) 205-209.
- 188. Pokotilovski Yu.N., Constraints on strongly coupled chameleon fields from the experimental test of the weak equivalence principle for the neutron, Pis'ma v ZhETF 96 (2012) 841-843.
- 189. Bystritsky V.M., Bystritskii Vit.M., Dudkin G N., Filipowicz M., Gazi S., Huran J., Kobzev A.P., Mesyats G.A., Nechaev B.A., Padalko V.N., Parzhitskii S.S., Pen'kov F.M., Philippov A.V., Kaminskii V.L., Tuleushev Yu.Zh., Wozniak J., Measurement of astrophysical s-factors and electron screening potentials for d(d,n)<sup>3</sup>He reaction in ZrD<sub>2</sub>, Tid<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>o and Tad<sub>0.5</sub> targets in the ultralow energy region using plasma accelerators. Nuclear Physics A, 2012, V.889, pp.93 104.
- 190. Bystritsky V.M., Bystritskii Vit.M., Dudkin G.N., Filipowicz M., Gazi S., Huran J., Kobzev A.P., Mesyats G.A., Nechaev B.A., Padalko V.N., Parzhitskii S.S., Pen'kov F.M., Philippov A.V., Kaminskii V.L., Tuleushev Yu.Zh., Wozniak J., Measurement of astrophysical s-factors and electron screening potentials for d(d, n)<sup>3</sup>he reaction in ZrD<sub>2</sub>, TiD<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O and CD<sub>2</sub> targets in the ultralow energy region using plasma accelerators. Physics of Atomic Nuclei, 2012, V.75, No 1, pp.53 – 62.
- 191. Bystritsky V.M., Bystritskii Vit.M., Dudkin G.N., Filipowicz M., Gazi S., Huran J., Kobzev A.P., Mesyats G.A., Nechaev B.A., Padalko V.N., Parzhitskii S.S., Pen'kov F.M., Philippov A.V., Kaminskii V.L., Tuleushev Yu.Zh., Wozniak J. Investigation of Temperature Dependence of Neutron Yield and Electron Screening Potential for the d(d,n) <sup>3</sup>He Reaction Proceeding in Deuterides ZrD<sub>2</sub> and TiD<sub>2</sub>. Physics of Atomic Nuclei, 2012, V. 75, №8, pp. 913-922.
- 192. Mitsyna L.V., Popov A.B., Zhaohui Song, On the possibility to incease neutron beam flux of IREN, In: Neutron spectroscopy, nuclear structure, related topics. XIX Int. Seminar on Interaction of neutron with nuclei. Dubna, Russia, JINR-E3-2012-30, p.274, Dubna (2012).
- 193. Milkov V.M., Panteleev Ts.Ts., Bogdzel A.A., Shvetsov V.N., Kutuzov S.A., Borzakov S.B., Sedyshev P.V.. Neutron

Spectrometer Based on a Proton Telescope with Electronic Collimation of Recoil Protons. ISSN 1547 4771, Physics of Particles and Nuclei Letters, 2012, Vol. 9, No. 6–7, pp. 508–516.

- 194. Швецов В.Н., Алпатов С.В., Астахова Н.В., Еник Т.Е., Мицына Л.В., Попов А.Б., Саламатин И.М., Саламатин К.М., Седышев П.В., Сиротин А.П., ПТЭ, №5, с.54-61(2012); Instruments and Experimental Techniques, 55, No 5, pp.561-568 (2012).
- 195. Telezhnikov S.A., Kopatch Yu.N., Mezentseva Zh., Stuttge L., Goennenwein F., Mutterer M., Chernysheva E., Dorvaux O., Hanappe F., Hambsch F.-J., Investigations of the Neutron "Cross- Talk" Effect in DEMON Detectors, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 74-81.
- 196. Grigoriev Yu.V., Khlustin D.V., Mezentseva Zh.V., Vasiliev I.A., Ryabov Yu.V., Measurements of Characteristics of the Pulse Neutron Sources RADEX and IN-06 of the Moscow Meson Factory (INR RAS, Troitsk), In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 234
- 197. Grigoriev Yu.V., Khlustin D.V., Mezentseva Zh.V., Ryabov Yu.V., Measurements of Neutron Total and Capture Cross Sections at the TOF Spectrometers of the Moscow Meson Factory, In: XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Dubna, May 2011, E3-2012-30, Dubna, 2012, p. 245
- 198. Shvetsov V.N., Alpatov S.V., Astahova N.N., Gundorin N.A., Enik T.L., Mitsyna L.V., Pikelner L.B., Popov A.B., Salamatin I.M., Salamatin K.M., Samosvat G.S., Sedyshev P.V., Sirotin F.P., Multiinput encoder for recording spectra of scattered neutrons using time-of-flight method, In: Neutron spectroscopy, nuclear structure, related topics. XIX Int. Seminar on Interaction of neutron with nuclei. Dubna, Russia, JINR-E3-2012-30, p.279, Dubna (2012).
- 199. Цулая М.И., Ядерная прецессия нейтронов ядерный псевдомагнетизм. Препринт ОИЯИ РЗ-2012-114
- 200. Kozhevnikov S.V., Ignatovich V.K., Nikitenko Yu.V., Ott F., Radu F., Rühm A., Major J., Neutron magnetic resonance and non-specular reflection from a magnetic film placed in an oscillating magnetic field, Journal of Physics: Conference Series 340 (2012) 012084.
- Kozhevnikov S.V., Ignatovich V.K., Ott F., Rühm A., Major J., Experimental determination of the neutron channeling length in a planar waveguide, Preprint JINR E14-2012-117 (2012).

#### Теоретические работы

- 202. Ф.В.Игнатович, В.К.Игнатович, Оптика анизотропных сред. УФН, 182 (2012) 759–771.
- 203. Bunatian G.G., Study of the Neutron Flux Generated at E-Linac-Driven Neutron Sources.} Physics of Particles and Nuclei, 2012, Vol. {\bf 43}, (No 6), pp. 867-881.
- Ignatovich F.V., Ignatovich V.K., Pumping of electromagnetic energy via multiple total internal reflection from active media. Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei, Letters, 90 (2012) 76-79.



#### Прикладные исследования

- Kuzhir P.P., Maksimenko S.A., Lapko K.N., Lomonosov V.A., Ivashkevich O.A., Lesnikovich A.I., Sedyshev P.V., Shvetsov V.N., Kurilin A.S., Sartinska L., Silenko P., Frolov G., Solonin Yu., Bellucci S., Boron Enriched Unfired Phosphate Ceramics as Neutron Protector, Nanosci. Nanotechnol. Lett. 4 (2012) 1 – 6.
- 206. .Ивашкевич О.А, Кужир П.П., Курилин А.С., Лапко К.Н., Лесникович А.И., Ломоносов В.А., Максименко С.А., Окотруб А.Н., Седышев П.В., Швецов В.Н., Термостойкие фосфатные композиции, модифицированные микроструктурными соединениями бора и углеродными нанотрубками, в интересах прикладной ядерной физики. Доклады НАН Беларуси. 56 (3) (2012) 68-72.
- 207. Huran J., Valovic A., Kobzev A.P., Balalykin N.I., Kucera M., Haschik S., Malinovskij S., Kovacova E., Structural and physical characteristics of PECVD nanocrystalline silicon carbide thin films. Physics Procedia 32 (2012) 303 – 307.
- 208. Huran J., Balalykin N.I., Shirkov G.D., Bogacek P., Kobzev A.P., Valovic A., Malinovsky L., Sekacova M., Characterization of nanocrystalline diamond/amorphous composite carbon films prepared by PECVD technology. Physics Procedia 32 (2012) 875 – 879.
- 209. Krmar M., Radnović D., and Frontasyeva M.V., Moss biomonitoring technique used to study spatial and temporal atmospheric deposition of heavy metals and airborne radionuclides in Serbia. In D.T. Mihailovic Ed., Essays of Fundamental and Applied Environmental Topics, Nova Publishers Inc., 2012, pp. 159-192, ISBN: 978-1-61942-522-4.
- 210. Gorbunov A.V., Lyapunov S.M., Okina O.I., Frontasyeva M.V., Pavlov S.S.. Nuclear and related analytical techniques in ecology: impact of geoecological factors on the balance of trace elements in the human organism. Physics of Particles and Nuclei, Vol. 43, No. 6, pp. 783–824. ISSN 1063\_7796, 2012. © Pleiades Publishing, Ltd., 2012. Original Russian Text © A.B. Горбунов, С.М. Ляпунов, О.И. Окина, М.В. Фронтасьева, С.С. Павлов. Ядерно-физические методы анализа в экологии: воздействие геоэкологических факторов на микроэлементный баланс организма человека. Published in Fizika Elementarnykh Chastits i Atomnogo Yadra, 2012.
- 211. Oprea C., Velichkov A., Oprea I.A., Filosofov D.V., Szalanski P.J., The TDPAC method used to study the molecular dynamics in vegetal oils, Proceedings of the XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN19), JINR Publishing Department, 365-372, 2012
- 212. Oprea C., Gustova M.V., Maslov O.D., Belov A.G., Oprea I.A., Mihul A., Nuclear Analytical Methods as Interface of Environmental and Traceability Evaluations, Proceedings of the XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN19), JINR Publishing Department, 2012, 396-402
- Oprea C., Gustova M.V., Oprea I.A., Trace Heavy Metal Uptake by Crop Roots, Proceedings of the XIX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN19), JINR Publishing Department, 2012, 378-382,
- 214. Дмитриев А.Ю., Павлов С.С., Автоматизация количественного определения содержания элементов в образцах методом нейтронного активационного анализа

на реакторе ИБР-2 в ЛНФ ОИЯИ. Письма в ЭЧАЯ. Том 10, № 1(178), 2013, с. 58-64.

- 215. Spiric Z., Frontasyeva M., Steinnes E., Stafilov T., Multielement atmospheric deposition study in Croatia, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Taylor & Francis, Vol. 92, No. 10, 2012, p. 1200–1214.
- 216. Barandovski L., Frontasyeva M.V., Stafilov T., Sajn R., Pavlov S.S., Enimiteva V., Trends of atmospheric deposition of trace elements in Macedonia studied by the moss biomonitoring technique. Journal of Environmental Science and Health, Part A. Taylor & Francis, Vol. 47, 2012, p. 2000–2015.
- 217. Mankovska B., Oszlani J., Goryainova I., Frontasyeva M.V., Kastier P., Regional variation in environmental element concentrations in Slovakia derived from analysis of roe deer teeth (Capreolus capreolus L.). Ekologia (Bratislava), Vol. 31, No. 2, 2012, p. 138-149.
- 218. Saitanis C.J., Frontasyeva M.V., Steinnes E., Palmer M.W., Ostrovnaya T.M., Gundorina S.F., Spatiotemporal distribution of airborne elements monitored with the moss bags technique in the Greater Thriasion Plain, Attica, GreeceEnvironmental Monitoring and Assessment (2012): 1-14, April 11, 2012. https://springerlink3.metapress.com/content/9545wk4363670 m36/resourcesecured/?target=fulltext.pdf&sid=ngvgiag0mtcze3w4vfix1zlg&

secured/?target=fulltext.pdf&sid=ngvgiag0mtcze3w4vfix1zlg& sh=www.springerlink.com

- Lazo P., Vasjari M., M.V. Frontesayeva, T. Stafillov, F. Malaj, I. Gjika, Z. Goryainova, K. Baceva. The study of atmospheric deposition of heavy metals in Tirana and Vlora cities, Albania, by moss biomonitoring technique. Fresenius Environmental Bulletin, Vol. 21, No. 8a, 2012, p. 2170-2177.
- 220. Aleksiayenak Yu.V., Frontasyeva M.V., Florek M., Sykora I., Holy K., Masarik J., Jeskovsky M., Brestakova L., Steinnes E., Faanhof A., Ramatlhape K.I., Distribution of <sup>137</sup>Cs and <sup>210</sup>Pb in moss collected from Belarus and Slovakia. Accepted by Journal of Environmntal Radioactivity.
- 221. Maslyuk V.T., Svatyuk N.I., Stets M.V., Frontasyeva M.V., Parlag O.O.. Statistical regularities in the distribution of radionuclides in sediments of transcarpathia mountain rivers. Accepted by Journal of Environmntal Radioactivity.
- 222. Harmens H., Ilyin I., Mills G., Aboal J.R., Alber R., Blume O., Coşkun M., Temmerman L. De, Fernández J.Á., Figueira R., Frontasyeva M., Godzikj B., Goltsova N., Zeran Z., Korzekwa S., Kubinn E., Kvietkus K., Leblond S., Liiv S., Magnússon S.H., Maňkovská B., Nikodemus O., Pesch R., Poikolainen J., Radnović D., Rühling Å., Santamaria J.M., Schröder W., Spiric Z., Stafilov T., Steinnes E., Suchara I., Thöni L., Turcsányi G., Tabors G., Yurukova L., Zechmeister H.G., Country-specific correlations across Europe between modelled atmospheric cadmium and lead deposition and concentrations in mosses. Accepted by Environmental Pollution, Vol. 166, 2012, p. 1-9.
- 223. Kalabegishvili T.L., Kirkesali E.I., Rcheulishvili A., Ginturi E.N., Murusidze I.G., Pataraya D.T., Gurielidze M.A., Tsertsvadze G.I., Gabunia V.N., Lomidze L.G., Gvarjaladze D.N., Frontasyeva M.V., Pavlov S.S., Zinicovskaia I.I., Raven M.J., Seaga N.M.F., Faanhof A., Synthesis of Gold Nanoparticles by Some Strains of Arthrobacter genera. Journal of Material Sciences and Engineering. A, 2 (2), 164-173, 2012



#### КОНФЕРЕНЦИИ

#### ОТДЕЛ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

- Aksenov V.L., Snegir S.V., Kyzyma O.A., Tropin T.V., Petrenko V.I., Korobov M.V., Avdeev M.V., «On the ionization of C<sub>60</sub> fullerene in laser desorption/ionization massspectrometry: influence of solvation». International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials, IWEPNM-2012, 3-10 March, 2012, Kirchberg, Austria, poster report.
- Avdeev M.V., Petrenko V.I., Aksenov V.L., Bulavin L.A., Almásy L., Rosta L., Garamus V.M., Willumeit R., Vékás L., «Analysis of aggregation stability of magnetic fluids and their components by small-angle neutron scattering», 10<sup>th</sup> Conference on Colloidal Chemistry 10CCC, Budapest, Hungary, August 29-31, 2012. Invited report.
- Avdeev M.V., «Small-angle neutron scattering». 6<sup>th</sup> Central European Training School on Neutron Scattering CETS 2012, May 14-19, Budapest, Hungary. Invited lecture.
- Avdeev M.V., «Particle interaction in polydisperse magnetic fluids: experimental aspects». EMLG/JMLG Annual Meeting "Molecular Association in Fluid Phases and at Fluid Interfaces", September 5 – 9, 2012, Eger, Hungary. Key lecture.
- Avdeev M.V., «Structure Analysis of Disordered Systems by Small-Angle Scattering», International conference "Molecular aspects of Solid State and Interfacial electrochemistry MolE", August 26-31, 2012, Dubna, Russia. Invited lecture.
- Avdeev M.V., Aksenov V.L., Tomchuk O.V., Bulavin L.A., Garamus V.M., Osawa E., «The continuous sp<sup>3</sup>–sp<sup>2</sup> spatial transition in detonation nanodiamond as revealed by small-angle neutron scattering from its liquid dispersions. International small-angle scattering conference», 18-23 November, 2012, Sydney, Australia, poster report.
- Avdeev M.V., Tomchuk O.V., Hajdu A., Feoktystov A.V., Garamus V.M., Nagornyi A.V., Rosta L., Tombacz E., «SANS comparison of aggregate structure in magnetic fluids with electrostatic and sterical stabilization under physiological conditions». International small-angle scattering conference, 18-23 November, 2012, Sydney, Australia, poster report.
- Adveev M.V., Petrenko V.I., Aksenov V.L., Garamus V., Almasy L., Rosta L., Timko M., Kopcansky P., «Structure analysis of biologically relevant nanosystems by small-angle neutron and x-ray scattering». 19<sup>th</sup> Conference of Slovak Physical Society, September 3-6, 2012, Presov, Slovakia. Invited talk.
- Авдеев М.В., «Магнитные наночастицы в растворах для медикобиологических применений». V Высшие Курсы Стран СНГ Синхротронные и нейтронные исследования наносистем СИН-НАНО 2012, 17-27 июня 2012, Москва-Дубна. Приглашенная лекция.
- Авдеев М.В., Аксенов В.Л., Томчук А.В., Булавин Л.А., Гарамус В.М., Осава Е., «Неоднородность структуры детонационного наноалмаза по данным малоуглового рассеяния нейтронов», XXII Международное совещание «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния» (РНИКС-2012). 15-19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Россия. Приглашенный доклад.
- 11. Balagurov A.M., «Neutron TOF diffraction at pulsed sources:



achievements, troubles, prospects». Seminar of Laboratory for neutron scattering, PSI, 08 ноября, 2012

- Balagurov A.M., «Neutron scattering as a tool for atomic and magnetic structural characterization». International conference "Molecular aspects of Solid State and Interfacial electrochemistry MolE", August 26-31, 2012, Dubna, Russia.
- Balagurov A.M., «Structural studies of single crystals and powders at pulsed neutron sources». First Baltic School on Application of Neutron and Synchrotron Radiation in Solid State Physics and Material Science (BSANS-2012), Riga, Latvia, October 1-4, 2012.
- Балагуров А.М., «Дифракция нейтронов и электрохимия: status quo». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 - 20 октября 2012 г., Зеленогорск.
- Балагуров А.М., «Нейтронная фурье-дифрактометрия высокого разрешения: опыт работы». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 - 20 октября 2012 г., Зеленогорск.
- 16. Балагуров А.М., Бескровный А., Журавлёв В.В., Миронова Г.М., Неов Д., Шеверёв С., «Дифрактометр для исследований переходных процессов в реальном времени на реакторе ИБР-2М». Исследования на нейтронных и синхротронных источниках. «XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), Зеленоград, Санкт-Петербург, 15-20 октября 2012 года.Устный доклад.
- Балашою М., «µSR Study of magnetic fluids based on the Fe3O4 and CoFe2O4 nanoparticles dispersed in water». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад
- Балашою М., «10 years from JINR-Romania Workshop on Advanced Materials and their Characterization». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Biogenic nanoparticles produced by bacteria Klebsiella Oxytoca: structure investigations». The V International Conference-Symposium Ecological Chemistry 2012, March 2-3, 2012, Chisinau, Republic of Moldova. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Elastomer matrix structure modifications induced by ferrofluid addition». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Inorganic microbial nanoparticles structure investigations». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Investigation of magnetorheological silicone rubber-based elastomers by means of synchrotron USAXS». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical

Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад.

- Балашою М., «Magnetic field and particle concentration textural effects on ferrofluid based silicone elastomer microstructure by means of SANS». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Magnetic nanoparticle structure determination from a contrast variation small angle scattering of non polarized neutrons experiment». DUBNA-NANO 2012 International Conference, July 9-14, 2012. Стендовый доклад.
- 25. Балашою М., «Nuclear methods in magnetic nanodispersions diagnostics for technical and medical applications». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад
- 26. Балашою M., «On the modelling of the magnetic nanoparticles influence on elastomer matrix from SAS data». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад.
- Балашою М., «SANS and synchrotron characterization of nanoparticles produced by bacteria Klebsiella Oxytoca». 2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад.
- 28. Балашою M., «SAXS studies of biomineral particles produced by bacteria klebsiella Oxytoca». The V International Conference-Symposium Ecological Chemistry 2012, March 2-3, 2012, Chisinau, Republic of Moldova. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Small-angle x-ray scattering and spectroscopic studies of biogenic ferrihydrite nanoparticles».
   2nd European Nuclear Physics Conference, IFIN-HH, 17-21 September 2012, Bucharest, Romania. Стендовый доклад.
- Балашою М., «Structural investigations of biogenic ferrihydrite nanoparticles using ATSAS programm model calculations». DUBNA-NANO 2012 International Conference, July 9-14, 2012. Стендовый доклад.
- 31. Благовещенский Н.М., Новиков А.Г., Рожкова Н.Н., «Анализ квазиупругого рассеяния нейтронов концентрированной водной дисперсией наноалмазов», Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.51.
- 32. Благовещенский Н.М., Новиков А.Г., Савостин В.В., «Самодиффузия в жидких литии и свинце из данных по когерентному квазиупругому рассеянию нейтронов» Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.155.
- 33. Боднарчук В.И., «Оценка сечения рассеяния нейтронов на спиновых волнах в тонких ферромагнитных слоях». XXII Совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния, РНИКС-2012, 15-20 октября, 2012, Гатчина, Россия. Устный доклад.

- Bokuchava G.D., Kozlenko D.P., Balagurov A.M., Savenko B.N., «Neutron Imaging at IBR-2 Pulsed Reactor: First Results and Neutron Imaging Instrument Project», NIUS2012 - ESS Neutron Imaging User Symposium, 15-18 April 2012, Bad Zurzach, Switzerland.
- 35. Бокучава Г.Д., Папушкин И.В., Сумин В.В., Балагуров А.М., «Изучение анизотропного уширения дифракционных пиков на RTOF дифрактометре». XXII Совещание и по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г. Гатчина, 15-19 октября 2012 года.
- 36. Чан Туан Ань, «Влияние высокого давления на кристаллическую структуру и спектры рамановского рассеяния света манганита Pr0.8Na0.2MnO3». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад.
- Чурьянова А.Г., Дудзиц Д., «НЕРА спектрометр неупругого рассеяния термических неутронов». Международная молодежная научная школа «Современная нейтронография», г. Дубна, 24-28. 09. 2012г.
- 38. Данг Н.Т., «Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру манганита Pr0.7Sr0.3MnO3». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад.
- 39. Данг Н.Т., «Кристаллическая и магнитная структура мультиферроика RbFe(MoO4)2 при высоких давлениях и температурах». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Стендовый доклад.
- Джабаров С.Г., «Исследование влияния высокого давления на кристаллическую структуру мультиферроика BiMnO3». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад.
- 41. Джабаров С.Г., «Исследование структурных изменений в мультиферроике BiMnO3 при высоком давлении». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Устный доклад.
- 42. Дружбицки К., Микули Э., Коцот А., Оссовска-Хрущиел М.Д., Хрущиель Я., Залевски С., Худоба Д., «Complex vibrational spectroscopic studies of an antiferroelectric (S)-2-octile 4-S-(4'decyloxybiphenyl-4-tiocarboxy)benzoate based on modern quantum chemical calculations and infrared and Raman spectroscopy». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов, г. Дубна, 6-11.02.2012 г.
- 43. Дубовский О.А., Орлов А.В., «Перспективы нейтронной спектрометрии генерируемых ультразвуком И гиперзвуком связанных мультифононных солитонов и бисолитонов нового типа». Тезисы докладов XXII Совещания Международного Международной и молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного (РНИКС-2012), состояния г.Гатчина. c.26.



- Дубовский О.А., Семенов В.А., Орлов А.В., «Солитонная 44. и мультифононная микродинамика теплопроводности плутония и урана в области температур мартенситных фазовых переходов». Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.122.
- 45. Фан Л.Т.Н., Никитин А.Н., Локаичек Т., Иванкина Т.И., Васин Р.Н., Круглов А.А. «Теоретические и исследования экспериментальные особенностей распространения квазипродольных упругих волн через границу раздела изотропной И анизотропной текстурированной сред». Труды XVI научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ, стр. 229-232, г. Дубна, Россия. 2012.
- Горшкова Ю.Е., «Unbinding transition of lipid membranes at low concentration of Ca<sup>2+</sup> ions». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад,
- Горшкова Ю.Е., «Исследование спонтанного перехода мультислойных мембран ДМФХ в одиночные везикулы в присутствии ионов Ca<sup>2+</sup> в жидкой фазе». РНИКС-2012, ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия. Стендовый доклад.
- Холдерна-Натканиец К., Возьниак-Брашак А., Юрга Я., Барановски М., Натканиец И., «Dynamical heterogeneity of PBT nanocomposities with decylamine- and tetracyanoethene–fullerene adducts by <sup>1</sup>H NMR». Nuclear magnetic Resonance in Condensed Matter, NMRCM 2012 9<sup>th</sup> Meeting "NMR in Heterogeneous Systems", Saint Petersburg, 9-13 July 2012.
- 49. Ivankina T.I., Nikitin A.N., «Application of neutron diffraction in geosciences: experimental experience at the IBR-2 reactor». Семинар преподавателей и аспирантов Высшей естественно-научной школы. г.Париж, 27.05.2012.
- 50. Иванкина Т.И., «Нейтронографический тектурный анализ горных пород литосферы Земли: опыт исследования на реакторе ИБР-2 (Дубна) ». Памяти проф.А.Н.Никитина. XIII международная конференция "Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле", ГЕОХИ РАН, ИГЕМ РАН, ИФЗ РАН, ГО «Борок» ИФЗ РАН, 1-4 октября 2012, Москва, Россия.
- 51. Иванкина Т.И., Локаичек Т., Зель И., «Влияние микроструктуры на анизотропию упругих свойств горных пород: моделирование слоистых текстурированных сред». XIII международная конференция "Иизикохимические и петрофизические исследования в науках о Земле", ГЕОХИ РАН, ИГЕМ РАН, ИФЗ РАН, ГО «Борок» ИФЗ РАН, 1-4 октября 2012, Москва, Россия.
- 52. Иваньков O., «Phase transition in DPPC/POPC lipid mixtures by SANS and SAXS». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад.
- 53. Иваньков О., «Исследование фазовых переходов в смеси липидов ДПФХ/ПОФХ методами МУРН и МУРР». 46-ая Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния, ФГБУ ПИЯФ им. Б.П. Константинова, 12-17 марта 2012, Рощино, Россия. Стендовый доклад

- Иваньков О., «Исследование фазовых переходов в смеси липидов ДПФХ/ПОФХ методами МУРН и МУРР». РНИКС-2012, ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия. Стендовый доклад.
- 55. Jargalan N., Tropin T.V., Avdeev M.V., Kyzyma O.A., Sangaa D., Aksenov V.L., «Theoretical study of fullerene cluster formation in  $C_{60}$ /NMP solutions». International Conference on Materials Science, ICMS-2012, 20-23 August, 2012, Ulaanbaatar, Mongolia. Poster report.
- Jargalan N., Tropin T.V., Avdeev M.V., Kyzyma O.A., Sangaa D., Aksenov V.L., «Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: study of C<sub>60</sub>/NMP solution». XXII Совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния, РНИКС-2012, 15-20 октября, 2012, Гатчина, Россия. Стендовый доклад.
- 57. Калинин И.В., Морозов В.М., Новиков А.Г., Пучков А.В., Савостин В.В., Сударев В.В., «Характеристики спектрометра ДИН-2ПИ с нейтронным концентратором», Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.88.
- Keppler R., Ullemeyer K., Behrmann J.H., «Texture analysis of polyphase rock samples applying whole pattern deconvolution: methodical aspects». Deutsche Neutronenstreutagung, Bonn (Germany), 2012, 24.-26.09.12. p. 83.
- Kiselev M.A., «Possibilities of the neutron and synchrotron radiation for the characterization of the lipid nanosystems».
   20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultracold Neutrons, Related Topics (ISINN-20) », Alushta, Ukraine, May 21-26, 2012. Oral report.
- Kiselev M.A., «Possibilities of the neutron and synchrotron radiation for the characterization of the lipid nanosystems». International conference Dubna-Nano12, Dubna, Russia, July 9-14, 2012. Oral report.
- Kiselev M.A., «Application of neutron scattering for the problems of drug delivery through the skin». International Summer School and Workshop "Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure" September 3-7, Alushta, Crimea, Ukraine. Oral report.
- Kiselev M., Ermakova E., Gruzinov A., Zabelin A., Ipatova O., «Characterization of the phospholipid transport nanosystem via small-angle X-ray scattering at synchrotron». Internatiobal workshop "Molecular Simulation Studies in Material and Biological Sciences", September 9-12, Dubna (JINR)-Moskow (IBC), Russia. Oral report.
- 63. Киселев М.А., «Наноструктура и свойства модельных мембран верхнего слоя кожи stratum corneum». Исследования на нейтронных и синхротронных источниках. «XXII совещание по использованию нейтронов рассеяния исследованиях в (РНИКС-2012). конденсированного состояния Зеленоград, Санкт-Петербург, 15-20 октября 2012 года. Приглашенный доклад



- 64. Кичанов С.Е., «Исследование структурных особенностей кристаллофосфора Y3Al5O12:Ce3+/Lu2O3 при его формировании коллоидно-химическим методом». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад
- 65. Кичанов С.Е., «Структурный аспект формирования оптических свойств в кристаллофосфорах Y3AI5O12:Ce3+/Lu2O3». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Устный доклад.
- Kozhevnikov S.V., Keller T., Khaydukov Yu.N., Ott F., Rühm A., Major J., «Polarizing Fe-Co-Fe planar waveguides for the production of neutron microbeams». Polarized Neutrons for Condensed Matter Investigations (PNCMI), 2-5 July 2012, Paris, France. Oral report
- 67. Кожевников C.B., Ott F., Torrejón J., Vázquez M., Thiaville А., «Применение поляризованного микропучка нейтронов исследования магнитной для микроструктуры». Исследования на нейтронных и синхротронных совещание по источниках. «XXII использованию в нейтронов рассеяния исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15-19 октября 2012, Санкт-Петербург, Россия. Устный доклад
- Куклин А.И., «The exchange of irons by ferritin: possibility and reality via SANS and SAXS». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Устный доклад
- 69. Лисичкин Ю.В., Сахарова Л.А., Туманов А.А., «Динамика молекулы воды, адсорбированной кремнеземом и смолой СГК-7». Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.35.
- Lokajicek T., Nikitin A.N., Ivankina T.I., Zel I.Yu., «Anisotropy of elastic wave velocities of synthetic monomineralic aggregates based on ultrasonic measurements». Proceedings of the 33<sup>rd</sup> General Assembly of the European Seismological Commission, p.42, 29-24 August, Moscow.
- Лошак H.B., «The studies of polymorphic transitions in chlorpropamide at high pressure». 16th International Seminar on Neutron Scattering Investigation in Condensed Matter, 12 May 2012, Poznan, Poland, Oral report.
- 72. Лошак Н.В., «Исследование структурных изменений в хлорпропамиде при высоком давлении». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Стендовый доклад.
- 73. Лошак Н.В., «Структурные изменения в хлорпропамиде при высоком давлении». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад
- 74. Лукин Е.В., «Эксперименты по радиографии на нейтронных пучках реактора ИБР-2». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года

г. Гатчина, Ленинградской обл.. Устный доклад.

- 75. Лукин Е.В., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Белушкин А.В., Савенко Б.Н., Бокучава Г.Д., «Эксперименты по радиографии на нейтронных пучках реактора ИБР-2», XXII Совещание и по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г. Гатчина, 15-19 октября 2012 года.
- 76. Лушников С.А., Филиппова Т.В., Бобриков И.А., Балагуров А.М., Глазков В.П., Соменков В.А., «Структура гидрида на основе ИМС СеNi<sub>3</sub> с высоким содержанием водорода». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 - 20 октября 2012 г., Зеленогорск.
- 77. Муругова Т.Н., «Structure and properties of aggregates of photosensitive molecules AzoTAB in water solution and complexes AzoTAB with RNA». International Summer School and Workshop Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, 3 – 7 September, 2012, Alushta, Ukraine. Стендовый доклад.
- Муругова Т.Н., «Исследование структурных параметров мицелл фоточувствительного поверхностно-активного вещества АЗОТАБ». РНИКС-2012, ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия. Устный доклад.
- 79. Муругова Т.Н., «Исследование структурных параметров мицелл фоточувствительного поверхностно-активного вещества АЗОТАБ». 46-ая Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния, ФГБУ ПИЯФ им. Б.П. Константинова, 12-17 марта 2012, Рощино, Россия. Стендовый доклад.
- Нагорный А.В., Петренко В.И., Авдеев М.В., Булавин Л.А., Аксенов В.Л., «Применение модели «ядрооболочка» для определения структурных параметров классических магнитных жидкостей по данным малоуглового рассеяния нейтронов». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов (ОМУС-2012). 06 -11 февраля 2012 г., Дубна, Россия. Устный доклад.
- 81. Нагорный А.В., Петренко В.И., Булавин Л.А., Almasy L., Авдеев М.В., Rosta L., Аксенов В.Л., «Структура магнитной жидкости магнетит/олеиновая кислота/декалин с избытком кислоты по данным рассеяния малоуглового нейтронов». XXII совещание Международное и Международная молодежная конференция "Использование рассеяния исследованиях конленсированного нейтронов в состояния" (РНИКС-2012). 15-19 октября 2012 г., Санкт-Петербург, Россия. Устный доклад.
- Натканец И., Холдерна-Натканец К., Худоба Д.М., «Neutron spectroscopy and DFT studies of dynamics of methyl groups in dimethyl-pyridine crystals». 16<sup>th</sup> International Seminar on "Neutron Scattering Investigation in Condensed Matter", Познань, Польша, 10-12.05.2012r
- 83. Натканец И., Холдерна-Натканец К., Худоба Д.М., «Neutron spectroscopy and DFT studies of dynamics of methyl groups in dimethylpyridine (lutidine) crystals». XXII Совещание и Международная молодежная конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях



конденсированного состояния (РНИКС-2012), Zelenogorsk, 15-19 октября 2012г.

- 84. Неов Д., Бескровный А., Шеверёв С.. «Моделирование нейтронного пучка на дифрактометре RTD реактора ИБР-2М методом Монте-Карло». Исследования на нейтронных и синхротронных источниках. «XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), Зеленоград, Санкт-Петербург, 15-20 октября 2012 года. Стендовый доклад.
- Никитенко Ю.В., «Magnetic layer in neutron wave resonator». Polarized Neutrons for Condensed Matter Investigations (PNCMI), 2-5 July 2012, Paris, France. Oral report.
- Никитин А.Н., Иванкина Т.И. «Нейтронные и акустические исследования горных пород из глубоких и сверхглубоких скважин». Международная научная конференция «Геофизическая разведка – 2012». 12-13 июля 2012, г.Дубна, Московская обл.
- Никитин А.Н., Локаичек Т., Круглов А.А., Васин Р.Н., Зель И.Ю. «Особенности распространения ультразвука через слоистые структурно-неоднородные тела». Труды XVI научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ, стр. 204-207, г. Дубна, Россия. 2012.
- 88. Новиков А.Г., «Топология и водородная связанность в сверхкритической воде», Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.178.
- Павлюкойч А., Батор Г., Собчык В., «The studies of low frequency vibrational spectra on the selected charge transfer molecular complexes and their components by using inelastic neutron spectroscopy». XXII Совещание и Международная молодежная конференция по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), Zelenoqorsk, 15-19 октября 2012г.
- 90. Папушкин И.В., Бокучава Г.Д., Сумин В.В., Балагуров А.М., Шептяков Д.В., «Микродеформации в сталях с дисперсионным упрочнением», XXII Совещание и по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), г. Гатчина, 15-19 октября 2012 года.
- Petrenko V.I., Avdeev M.V., Bulavin L.A., Garamus V.M., Kyzyma O.A., Koneracka M., Kopcansky P., «Structure and interaction of poly(ethylene glycol) in aqueous solutions». Small-angle neutron scattering data. 9th International IUPAC Conference on Polymer-Solvent Complexes and Intercalates: POLYSOLVAT-9, 11-14 September, 2012, Kyiv, Ukraine, poster report.
- Petrenko V.I., Avdeev M.V., Turcu R., Vekas L., Bulavin L.A., Aksenov V.L., Rosta L., «Structure of liquid and solid ferrocolloids by small-angle neutron scattering», 6<sup>th</sup> Central European Training School on Neutron Scattering, CETS-2012, 14-19 May, 2012, Budapest, Hungary, poster report.
- 93. Петренко В.И., Авдеев М.В., Almasy L., Timko M., Garamus V.M., Булавин Л.А., Аксенов В.Л., Корсалsky Р., «Структура амилоидных протофиламентов лизоцима по данным малоуглового рассеяния нейтронов и

- 94. рентгеновских лучей». XXII Международное совещание "Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния", РНИКС-2012, 15-19 октября, 2012, Санкт-Петербург, Россия, устный доклад.
- 95. Руткаускас А.В., «Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру сложного кобальтита YBaCo2O5.5». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад.
- 96. Руткаускас А.В., «Исследование кристаллической и магнитной структуры сложного кобальтита YBaCo2O5.5». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Стендовый доклад.
- 97. Савенко Б.Н., «Спектрометр для исследования при высоких давлениях ДН-6: текущий статус». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Стендовый доклад.
- 98. Сагань Я.И., «Исследование структурных изменений в молекулярном кристалле PyHBF4 при высоком давлении». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния.г. Гатчина, Ленинградской обл., 15-19 октября 2012 года. Стендовый доклад.
- 99. Садыков Р.А., Балагуров А.М., Помякушин В.Ю., Шабунина Г.Г., «Структурное и магнитное двухфазные состояния шпинели ZnCr<sub>2</sub>Se<sub>4-x</sub>». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 - 20 октября 2012 г., Зеленогорск.
- 100. Самойленко С.А., «Исследование структурных аспектов кластерообразования в силикатных стеклах при допировании оксидами церия и титана». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов 06 - 11 февраля 2012 года, г.Дубна, Россия. Устный доклад.
- 101. Самойленко С.А., «Кластерообразование в силикатных стеклах, допированных оксидами церия и титана». XXII СОВЕЩАНИЕ по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния. 15-19 октября 2012 года, г. Гатчина, Ленинградской обл.. Устный доклад.
- 102. Sangaa D., Bobrikov I.A., Simkin V.G., Balagurov A.M., Lee C.H., Hu C.W., Chen T.Y., Sevjidsuren G., «Neutron Diffraction Study of LiFePO<sub>4</sub> Cathode Material Doped With Vanadium Oxide». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 - 20 октября 2012 г., Зеленогорск.
- Schilling F.R., Scheffzük Ch., Walther K., Sikolenko V., Belushkin A.V., Frischbutter A., «EPSILON-MDS - The German high resolution TOF diffractometer at the pulsed neutron source IBR-2M». Deutsche Neutronenstreutagung, Bonn (Germany), 24.-26.09.2012.
- 104. Семенов В.А., Дубовский О.А., Орлов А.В., Савостин Д.В., Сударев В.В., «Спектр частот вольфрама при температурах 293 и 2400 К». Тезисы докладов XXII Международного Совещания и Международной молодежной конференции по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного



состояния (РНИКС-2012), г.Гатчина, с.144.

- 105. Соловьев Д.В., «Нейтронные и Р-V-Т исследования жидкостных фосфолипидных систем». РНИКС-2012, ПИЯФ, Санкт-Петербург, Россия. Стендовый доклад.
- 106. Tomchuk O.V., Avdeev M.V., Aksenov V.L., Bulavin L.A., «Small-angle scattering on polydisperse nanoparticles with diffusive surface». Central European Training School on Neutron Scattering, 14-18 May, 2012, Budapest, Hungary, poster report.
- 107. Томчук А.В., Авдеев М.В., Аксенов В.Л., Булавин Л.А., «Малоугловое рассеяние на полидисперсных частицах с диффузной поверхностью». XVI научная конференция молодых ученых и специалистов ОМУС-2012, 6-11 февраля, 2012, Дубна, Россия. Устный доклад.
- 108. Томчук А.В., Авдеев М.В., Аксенов В.Л., Булавин Л.А., «Малоугловое рассеяние на системах наночастиц с диффузной поверхностью». 46-ая Школа ПИЯФ по физике конденсированного состояния, 12-17 марта, 2012, ФГБУ ПИЯФ им. Б.П. Константинова, Рощино, Россия. Стендовый доклад.
- Tropin T.V., «Kinetics of relaxation in glass-forming melts: Some more problems», Group seminar, Polymer Physics Group of Rostock University, 20 February, Rostock, Germany, 2012.
- 110. Tropin T.V., Schmelzer J.W.P., Gutzow I., Schulz G., Schick C., «On the Theoretical Determination of the Prigogine-Defay Ratio in Glass Transition and Glass Transition in Polystyrene Investigated in a Broad Frequency and Cooling Rate Range: Experiment and Theory». XVI Research Workshop "Nucleation Theory and Applications", 1-30 April, 2012, JINR, Dubna, Russia, oral report.
- Tropin T.V., Schmelzer J.W.P., Gutzow I., Schick C., «On the theoretical determination of the Prigogine-Defay ratio in glass transition». Lähnwitzseminar on Calorimetry, 10-15 June, 2012, Rostock, Germany, poster report.
- 112. Тропин Т.В., «Кинетика роста кластеров фуллерена в растворах». V Высшие курсы стран СНГ для молодых ученых, аспирантов и студентов старших курсов по современным методам исследований наносистем и материалов «Синхротронные и нейтронные исследования наносистем», СИН-нано-2012, 17 июня – 5 июля, 2012, Москва-Дубна, Россия, приглашенная лекция.
- 113. Тропин Т.В., Авдеев М.В., «Малоугловое рассеяние нейтронов на объемных наносистемах». Молодежная научная школа «Проблемы физики твердого тела», ПФТТ-2012, 7-10 сентября, 2012, Дубна, Россия, приглашенная лекция.
- 114. Тропин Т.В., Аксенов В.Л., «Теоретические подходы к описанию кинетики образования и роста кластеров». 46-я школа ПИЯФ по Физике Конденсированоого Состояния, ФКС-2012, 12-17 марта, 2012, Санкт-Петербург, Россия, Приглашенная лекция

- 115. Тропин Т.В., Жаргалан Н., Авдеев М.В., Кизима О.А., Еремин Р.А., Сангаа Д., Аксенов В.Л., «Кинетика роста кластеров фуллерена в полярных растворах: экспериментальное и теоретическое исследование раствора С<sub>60</sub>/NMП», VII Международная научная конференция «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения», 25-28 сентября, 2012, Иваново, Россия, устный доклад.
- 116. Тропин Т.В., Теоретические подходы к описанию кинетики образования и роста кластеров, Тематический семинар, НЭО НИКС ЛНФ, 27 февраля, Дубна, 2012.
- 117. Vasin R.N., Ullemeyer K., «Evaluation of Crystallographic Preferred Orientations applying whole pattern deconvolution method». 14<sup>th</sup> Symposium Tectonics, Structural Geology and Geology of Crystalline Rocks Abstract Book. Kiel, p. 103, 26-30 марта 2012.
- Vasin R., Ullemeyer K., «Evaluation of Crystallographic Preferred Orientations applying whole pattern deconvolution method». Symposium Tektonik Strukturgeologie Kristallingeologie (TSK14), Kiel (Germany), 4.18, 26-30.03.2012.
- 119. Walther K., Scheffzük Ch., Schilling F.R., Sikolenko V., Bulkin A.P., Kudryashev V.A., Sirotin A.P., Belushkin A.V., Frischbutter A., «The new neutron guides at the7th beamline of the fast pulsed reactor IBR-2M in Dubna». Deutsche Neutronenstreutagung, Bonn (Germany), 24.-26.09.2012.
- 120. Васин Р.Н. «Новый подход к анализу данных текстурного дифрактометра СКАТ». Труды XVI научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ, стр. 190-193, г. Дубна, Россия. 2012.
- 121. Васин Р.Н., «Обработка дифракционных данных методом Ритвельда. Учебно-практическое занятие для новичков, часть 2: программа MAUD». Учебный семинар по обработке дифракционных спектров для молодых сотрудников. НЭО НИКС ЛНФ, 20.04.2012.
- 122. Васин Р.Н., Балагуров А.М., Папушкин И.В., Сумин В.В., «Анизотропия упругих свойств и остаточные напряжения в реакторных материалах». Сборник тезисов XLVI школы ФГБУ ПИЯФ по физике конденсированного состояния, стр. 67. Гатчина, 2012.
- 123. Васин Р.Н., Никитина А.Н., Иванкина Т.И., «Нейтронографический текстурный анализ горных пород». Международная научная конференция «Геофизическая разведка – 2012». 12-13 июля 2012, г.Дубна, Московская обл.
- 124. Таран Ю.В., Сабиров Б.М., Балагуров А.М., «Residual stresses induced in titanium-steel and niobium-steel bilayer pipes manufactured by explosive welding: neutron diffraction investigations». XXII совещание по использованию рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния (РНИКС-2012), 15 20 октября 2012 г., Зеленогорск.

#### ГРУППА ЯДЕРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Republic, 16-19 October, 2012.

125. Pepelyshev Yu.N., Tayıbov L.A., Vinogradov A.V. Experimental Estimation of the IBR–2M-Reactor Kinetic Parameters from Stochastic Power Noise / Proceedings of the International Meeting «Reactor Noise Knowledge Transfer for Research and Test Reactors», Prague, Czech



126. Пепелышев Ю.Н., Рогов А.Д., Нейтронно-физические расчеты во время физического и энергетического пуска модернизированного реактора ИБР-2(ИБР-2М), Межведомственный XXIII семинаре «Нейтроннофизические проблемы атомной энергетики с замкнутым топливным циклом (Нейтроника-2012)» (г. Обнинск, 30 октября – 02 ноября 2012 г.).

- Sidorkin S., Koptelov E., Rogov A., Neutron Source of INR RAS, the status and the further developments, International Collaboration on Advanced Neutron Sources (ICANS-XX), March 4 - 9, 2012, Bariloche, Río Negro, Argentina
- 128. Furman W., Adam J., Artyushenko M., Rogov A. et al., "New ADS scheme with deep subcritical multiplying core for energy production and transmutation of radioactive wastes. First experimental results and perspectives". In Book of abstracts

#### ОТДЕЛЕНИЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ 131. Ahmadov F., Ahmadov G., Madatov R., Sadygov Z., Shvetsov V., Tiutiunnikov S., Kopach Yu., Zhezher V., «Silicon micro-pixels avalanche photodiodes and scintillation detectors». 20th International Seminar on Interaction of Structure, Ultr

- «Silicon micro-pixels avalanche photodiodes and scintillation detectors», 20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultra cold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21–26, 2012.
- 132. Garibov A., Sadygov Z., Madatov R., Mechtiyeva R., Guliyev E., Ahmadov F., Ahmadov G., Tiutiunnikov S., Shvetsov V., Zhezher V., Kopach Yu., «New generation of alpha and gamma detectors», The V International Conference on "Perspectives of Peaceful Use of Nuclear Energy.
- 133. Ruskov I.et al., «Fluctuation of the prompt gamma-ray emission yield in resonance neutron induced fission of <sup>239</sup>Pu», 20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultra cold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21 – 26, 2012,
- 134. Ruskov I., Hambsch F.-J., Oberstedt S., Bevilacqua R., Vidali M., «<sup>239</sup>Pu(n, ) and <sup>239</sup>Pu(n,f) induced by resonance neutrons with energies from 3eV to 200eV», EUFRAT Users Meeting, 11.11.2012, EC-JRC-IRMM, Geel, Belgium.
- 135. Ruskov I.et al., «A setup for the investigation of the resonance neutron induced fission of <sup>239</sup>Pu», THEORY-2 Scientific Workshop on Nuclear Fission Dynamics and the Emission of Prompt Neutrons and Gamma Rays" 28-30.11.2012, Biarritz, France
- 136. Vesna V.A, Gledenov Yu.M., Oprea A., Oprea C., Sedyshev P.V., Shulgina E.V. Search for P-odd Effects in the Interaction of Polarized Neutrons with Natural Lead. 20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultra cold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21–26, 2012.
- 137. Oprea C., Oprea A. I., «Parity violation effects in nuclear reactions induced by neutrons on lead isotopes», 4<sup>th</sup> International Interdisciplinary Chaos Symposium on Chaos and Complex Systems (CCS2012), April 29-May 02, Antalya, Turkey, Eds. L. Cuhaci, Gursel Hacibekiroglu: 255, 2012.
- 138. Oprea A., Oprea C., Gledenov Yu.M., Sedyshev P.V., Sedysheva M.V., «Cross Sections Analysis in  $(n,\alpha)$  Reaction with Fast Neutrons on <sup>64</sup>Zn Nucleus», 20th International

# 3. ПУБЛИКАЦИИ

of LXII International conference "NUCLEUS 2012", June 25-30, 2012, Voronezh, Russia, p.35, Saint-Petersburg, 2012

- 129. Adam J., Baldin A., Berlev A., Furman W., Gundorin N., Rogov A.et al., "Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON". In book of abstracts of the XXI International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems, Dubna, Russia, September 10-15, 2012, p. 37, Dubna 2012;
- 130. Furman W., Adam J., Baldin A., Gundorin N., Rogov A.et al., "Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON", In Proceedings of XXI IHEP <u>PoS(MC2000)002</u>

#### Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultra cold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21 – 26, 2012.

- 140. Oprea C., Oprea A., «Parity violation effects for thermal neutron scattering on <sup>35</sup>Cl», 8<sup>th</sup> BPU General Conference, July 5-7, 2012, Mamaia, Romania.
- 141. Oprea A., Oprea C., «Parity violation effects in nuclear reactions at low energy», Thirty First International Workshop on Nuclear Theory IWNT31-2012, June 24-30, 2012, Rila, Bulgaria.
- 142. Oprea I., Oprea C., «Search of parity violation effects in neutron reaction on natural Lead», 2<sup>rd</sup> European Nuclear Physics Conference, September 17-21 2012 Bucharest, Romania
- 143. Oprea C., Oprea A.I., Mihul A., Potlog M., «Monte Carlo evaluation of parity violation effects in neutron reactions, 2<sup>nd</sup> European Nuclear Physics Conference, September 17-21, 2012 Bucharest, Romania.
- 144. Khuukhenkhuu G., Gledenov Yu.M., Sedysheva M.V., Odsuren M., Munkhsaikhan J., Delgersaikhan T. «Systematical Analysis of (n,α) Reaction Cross Sections for 6-20 MeV Neutrons». 20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei: «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultra cold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012.
- 145. Oprea C., Oprea A., Gamma-1 Workshop, European Commission / Joint Research Centre/ Institute for Reference Materials and Measurements/ Geel - Belgium & Institute of Physics /Faculty of Science/ Novi Sad /Republic of Serbia, Novi Sad, Serbia Cross section evaluation in the photodisintegration of 152Sm isotope, Mihul, 2012
- 146. Oprea C., Oprea A., Mihul A., Detailed balance principle in the photodisintegration reaction of <sup>152</sup>Sm. Book of abstracts, Thirty First International Workshop on Nuclear Theory IWNT31-2012, June 24-30, 2012, Rila, Bulgaria
- 147. Oprea C., Oprea A. I., Evaluation of penetrability coefficients in reactions with fast neutrons. National Physics Conference CNF-2012 July 8-10, 2012, Mamaia, Romania: P44



- 148. Oprea I., Oprea C., Cross section for fast neutrons reactions on medium and heavy nuclei for astrophysics. 2<sup>nd</sup> European Nuclear Physics Conference, September 17-21, 2012 Bucharest, Romania: ID197.
- 149. Jovancevic N., Sukhovoj A.M., Khitrov V.A., The most probable mean values of level density and radiative strength function of 28Al compound-state cascade gamma-decay In: XX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Abstracts, Dubna, May 2012, E3-2012-36, Dubna, 2012, p. 49.
- 150. Jovancevic N., Furman W.I., Sukhovoj A.M., Khitrov V.A., General Trend and Local Variations of Neutron Resonance Cascade Gamma-Decay Radiative Strength Functions. In: XX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, Abstracts, Dubna, May 2012, E3-2012-36, Dubna, 2012, p. 88.
- 151. Lychagin E. et al. Temperature dependence of UCN "small heating" probability and spectrum of up-scattered UCN at surface of fombline Y-HVAC 18/8 oil. ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012.
- 152. Sharapov E.I., Gould C.R., Sonzogni A.A., XX International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei. "Oklo phenomenon and nuclear data", ISINN-20, Abstracts. Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, E3-2012-36, (2012) p. 84.
- 153. Pokotilovski Yu. "Possible polarized neutron-nucleus scattering search for a new spin-dependent nucleon-nucleon coupling." ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012.
- 154. Pokotilovski Yu. "Possible polarized neutron-nucleus scattering search for a new spin-dependent nucleon-nucleon coupling." ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012.
- 155. Frank A. "Precise UCN spectroscopy using neutron Fabry Perrot interferometers." ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21 -26, 2012.
- 156. Kulin G. "New UCN experiment for test of the equivalence principle for free neutron." ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012.
- 157. Furman W. On the behalf of "Energy & Transmutation RAW" collaboration. "Recent results of experiments with massive uranium target setup QUINTA at Nuclotron." ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21–26, 2012.
- 158. Furman W., Adam J., Artyushenko M. et al., "New ADS scheme with deep subcritical multiplying core for energy production and transmutation of radioactive wastes. First experimental results and perspectives", In Book of abstracts of LXII International conference "NUCLEUS 2012", June 25-30, 2012, Voronezh, Russia, p.35, Saint-Petersburg, 2012.
- 159. Adam J., Baldin A., Berlev A., Furman W., Gundorin N. et al., "Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON", In book of abstracts of the XXI International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems, Dubna, Russia, September 10-15, 2012, p. 37, Dubna 2012.
- 160. Кобзев А.П., Вахтель В.М., Работкин В.А, Аналитические возможности ядерно – физических методик. Доклад на 62 Международной конференции «Ядро 2012» «ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ, АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

- 161. (62 Совещание по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра) Воронеж, 25 – 30 июня 2012 года.
- 162. Huran J., Shvetsov V. N., Kobzev A. P., Borzakov S. B., Boháček P., Kleinová A., Sekáčová M., Balalykin N. I., The effect of neutron irradiation on the structural and electrical characteristics of SiC and SiC(N) films prepared by plasma enhanced chemical vapor deposition. Доклад на 19 Международной конференции по электростатическим ускорителям и пучковым технологиям «ESACCEL 2012», Обнинск, 13 – 15 ноября 2012 года.
- 163. Кобзев А.П., Исследование глубинных профилей кислорода в нанослоях оксидов. Доклад на 19 Международной конференции по электростатическим ускорителям и пучковым технологиям «ESACCEL 2012», Обнинск, 13 – 15 ноября 2012 года.
- 164. Oprea C., Oprea A. I., Neural network model based on chaos theory and application to multivariate factor analysis. Proceedings of the 4<sup>th</sup> International Interdisciplinary Chaos Symposium on Chaos and Complex Systems (CCS2012), April 29-May 02, Antalya, Turkey, 2012. Eds. L. Cuhaci, Gursel Hacibekiroglu: 203.
- 165. Oprea C., Oprea A. I., 20th Internanional Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN20), Frank Laboratory for Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research (FLNP - JINR), Ukraine, Alushta Proposal for experiments on evaluation of neutron capture cross section of light nuclei, 2012.
- 166. Duliu O.G., Lyapunov S.I., Gorbunov A.V., Ricman C., Brustur T., Frontasyeva M.V., Culicov O.A., Iovea M., On the heavy elements content of sediments and rocks from two semiclosed ecosystems: proglacial lake Bâlea (Făgăraş Mountains) and crater lake St. Ana (Harghita Mountains), oral contribution to the ISINN 20, Alushta, May, 2012.
- 167. Duliu O.G., Dumitras D., Costea C., Frontasyeva M.V., Culicov O.A., Tugulan L., Chirosca A., INAA, EPR, XRD, SEM and TL investigation of loess/paleosoil sequences of Eastern Dobrudja, Romania, oral contribution to the 2nd European Nuclear Physics Conference, Bucharest, September, 2012.
- 168. Aničić Urošević M., Vuković G., Razumenić I., Goryainova Z., Frontasyeva M., Tomašević M., Popović A., Active moss biomonitoring of small scale inner city spatial distribution of ambient trace elements in Belgrade urban area. Book of Abstracts, BIOMAQ Conference, November 12-14, 2012, Antwerp, Belgium.
- 169. Barandovski L., Stafilov T., Frontasyeva M., Šajn R., Bačeva K., Mihajlov M., Steinnes E., Moss biomonitoring of trace elements in the atmosphere in the Republic of Macedonia a survey in 2010, IX Conference of the Society of Physicists of Macedonia, Book of Abstracts, 20-23 September 2012, Ohrid.
- 170. Kusan V., Frontasyeva M., Stafilov T., Spiric Z., Visualization and mapping ICP Vegetation moss survey results in Croatia. SDI Days, 8th Cartography and Geoinformation Conference, Book of Abstracts. http://nipp.kartografija.hr/index.php?id=304&language=en, 2012 Zagreb, Croatia, 25-29 September, http://nipp.kartografija.hr/index.php?id=300 1 http://nipp.kartografija.hr/index.php?id=301&items=48 (01.10.2012).



- 171. Kusan V., Frontasyeva M., Stafilov T., Spiric Z., ICP Vegetation moss survey of urban forests in Zagreb, IUFRO conference: Forest for cities, forest for people – Perspectives on urban forest governance, Zagreb 27.28 September 2012, Book of Abstracts, I. Balenović (Ed.), p. 70, ISBN 978-953-7909-00-0. http://www.sumins.hr:8080/IUFRO2012/
- 172. Špirić Z., Frontasyeva M., Steinnes E., Stafilov T., Multielement atmospheric deposition study in Croatia, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, International Journal of Environmental Analithical Chemistry, 2012 Vol. 92, No. 10, p. 1200-1214.
- 173. Kušan V., Frontasyeva M., Stafilov T., Špirić Z., Visualization and mapping ICP Vegetation moss survey results in Croatia, 4th Croatian NSDI and INSPIRE Day and 8th Cartography and Geoinformation Conference, AGISEE SDI Workshop Zagreb 2012, "South-East European Spatial Data Infrastructures facing INSPIRE", Zagreb, September 25-29, 2012.
- 174. Kušan V., Frontasyeva M., Stafilov T., Špirić Z., ICP Vegetation moss survey of urban forests in Zagreb; IUFRO Conference "Forests for cities, forests for people – Perspectives on urban forest governance", Zagreb Croatia, 27-28 September 2012, Book of Abstracts, I. Balenović (Ed.), ISBN 978-953-7909-00-0; p. 70.
- 175. Ene A., Pantelică A., Frontasyeva M.V., Sion A., Nuclear analytical techniques for the determination of trace elements in soils. Book of Abstracts, 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO - ICAC'2012 Analytical Chemistry for a Better Life, 18-21 September 2012, Targoviste, Romania.
- 176. Setnescu T., Bancuta I., Setnescu R., Bancuta R., Chilian A., Popescu I.V., Culicov O., Frontasyeva M., Characterization of some therapeutic muds collected from different Romanian sites. Book of Abstracts, 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO - ICAC'2012 Analytical Chemistry for a Better Life, 18-21 September 2012, Targoviste, Romania.
- 177. Radulescu C., Stihi C., Popescu I.V., Busuioc G., Culicov O., Frontasyeva M., Gheboianu A.I., Analysis of heavy metals in fruiting bodies of several wild mushrooms and soils underneath by atomic spectroscopy. 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO - ICAC'2012 Analytical Chemistry for a Better Life, 18-21 September 2012, Targoviste, Romania.
- 178. Frontasyeva M.V., Air pollution studies in Russia based on moss analysis: past, present and future. EuCheMS Chemistry Congress, August 26-30, 2012, Prague, Czech Republic.
- 179. Frontasyeva M.V., Living Ethics for the global chemistry youth. EuCheMS Chemistry Congress, August 26-30, 2012, Prague, Czech Republic.
- 180. Aničić M., Vuković G., Razumenić I., Goryainova Z.I., Frontasyeva M.V., Tomašević M., Popović A., Active moss biomonitoring of trace element distribution in Belgrade canyon streets. Book of Abstracts, ICURPT 2012: International Conference on Urban, Regional Planning and Transportation. Amsterdam, Netherlands, May 13-14, 2012.
- 181. Kalabegishvili T.L., Kirkesali E.I., Rcheulishvili A.N., Ginturi E.N., Murusidze I.G., Pataraya D.T., Gurielidze M.A., Frontasyeva M.V., Zinicovscaia I.I., Gritsyna V.T., Development of biotechnology for microbial synthesis of gold

and silver nanoparticles. Book of Abstracts, XI International Conference on Nanostructured Materials Nano 2012, Rhodes, Greece, August 26-31, www.nano2012.org

- 182. Pantelica A., Frontasyeva M.V., Ene A., Ciortea C., Gugiu M., Ghita D., Elemental concentrations in tree leaves as trace element bioaccumulators in air pollution preventing determined by PIXE technique. Book of Abstracts, 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO ICAC'2012 Analytical Chemistry for a Better Life. http://www.icstm.ro/ICAC2012. September 18-21, Targoviste, Romania).
- 183. Ene A., Pantelica A., Frontasyeva M., Cantaragiu A., Nuclear and imaging techniques used in material sciences. Book of Abstracts, ISINN-20, Alushta, Crimea, 26-30 May, 2012. , ISBN 978-5-9530-0321-6, p. 100.
- 184. Ene A., Frontasyeva M., Sion A., Combined XRF-NAA techniques for the quantification of trace elements in soils, 20th International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, dedicated to the memory of Ilia M. Frank and Fedor L. Shapiro, the founders of the laboratory of Neutron Physics. "Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultracold Neutrons, Related Topics" ISINN-20, Alushta, Ukraine, May 21-26, 2012, Poster presentation (P100), 24.05., Abstracts of the Seminar, Dubna, JINR, 2012, ISBN 978-5-9530-0321-6, p. 36.
- 185. Frontasyeva M.V., The moss technique for mapping atmospheric deposition patterns of trace elements and radionuclides in relation to the Fukushima nuclear disaster. The First International Conference on Radiation and Dosimetry in Various Fields of Research (RAD 2012)". Nis, Serbia, April 25-27, 2012. www.rad2012.elfak.rs.
- 186. Frontasyeva M.V., NAA for Life Sciences at FLNP JINR. The 5th International Conference on Ecological Chemistry 2012, Chisinau, Republic of Moldova, March 2-3, 2012. http://ecochem2012.mrda.md/.
- 187. Kalabegishvili T.L., Murusidze I., Pataraya D.T., Ginturi E., Frontasyeva M.V., Kirkesali E.I., Duca Gh., Zinicovscaia I., Mercury adsorption by Arthobacter globiformis and Spirulina platensis. The 5th International Conference on Ecological Chemistry 2012, Chisinau, Republic of Moldova, March 2-3, 2012. http://ecochem2012.mrda.md/.
- 188. Zinicovscaia I., Chromium removal from wastewater using microalga Spirulina platensis, Nostok and Porphyridium. The 5th International Conference on Ecological Chemistry 2012, Chisinau, Republic of Moldova, March 2-3, 2012. http://ecochem2012.mrda.md/.
- 189. Duliu O.G., Culicov O.A., Oaie G., Frontasyeva M.V., Cristache C., Heavy metall pollutionof the euxinic Black Sea Sediments. The 5th International Conference on Ecological Chemistry 2012, Chisinau, Republic of Moldova, March 2-3, 2012. http://ecochem2012.mrda.md/.
- 190. Duliu O., Dumitras D., Costea C., Frontasyeva M.V., Kulicov O., Chirosca L., INAA, EPR, XRD, SEM and TL investigation of loess/paleosoil sequences of Eastern Dobrudja, Romania. Book of Abstracts, 2nd European Nuclear Physics Conference, EuNPC2012 (16-21 September, 2012). http://www.nipne.ro/indico/contributionDisplay.py?contribld=1 42&sessionId=12&confld=0
- 191. Culicov O., Frontasieva M., Duliu O.G., Tugulan L.C., Dumitras D., Costea C., INAA, radiometric, xRD and sem investigation of Southern Dobrudja (Romania) loesspaleosoil deposits. 19th International Conference on



Radionuclide Metrology and its Applications (IICRM2013), 17-21 June 2013, Antwerp, Belgium.

- 192. Frontasyeva M., Moss biomonitoring in Russia: past, present and future. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 25.
- 193. Lazo P., Vasjari M., Stafillov T., Frontesyeva M.V., Terpo M., Baceva K., Moss biomonitoring in Albania: present and future. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 32.
- 194. Lazo P., Vasjari M., Frontesyeva M.V., Stafillov T., Malaj F., Gjika I., Moss bag biomonitoring in Albania. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 52.
- 195. Spiric Z., Frontasyeva M., Stafilov T., Kusan V., Steinnes E., Vuckovic I., Moss biomonitoring in Croatia 2010. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 59.
- 196. Spiric Z., Kusan V., Barisic D., Vekic B., Frontasyeva M., Atmospheric deposition of airborne radionuclides in Croatia studied by the moss biomonitoring technique. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 39.
- 197. Stafilov T., Barandovski L., Frontasyeva M., Šajn R., Steinnes E., Moss biomonitoring of atmospheric pollution with heavy metals in the Republic of Macedonia. The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 40.
- 198. Mankovska B., Oslanyi J., Frontasyeva M.V., Goryainova Z., Concentration of elements in teeth of roe deer (Capreolus capreolus L.). The 25th UNECE ICP Task Force Meeting (January 31-February 2, 2012, Brescia, Italy). Book of Abstracts, 2012, p. 54.
- 199. Frontasyeva M.V., Neutron Activation Analysis for Life Sciences and Materials Science at the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia. The 8th General Conference of Balkan Physical Union, 8th BPU8, 5-7 July 2012, Constanta, Romania; Section Nuclear Physics, Poster S1\_P07, Book of Abstracts, ISBN 978-606-598-181-2. http://wwwold.univ-
- ovidius.ro/bpunpconferences2012/Imagini/programBPU.pdf
- 200. Pantelica A., Culicov O.A., Frontasyeva M.V., Badita C.R., INAA of leaves and stems of green vegetables, 20<sup>th</sup> International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN-20), «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultracold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21–26, 2012, http://isinn.jinr.ru/20/prog.html,

Poster presentatio, 24.05., Abstracts of the Seminar, Dubna, JINR, 2012, ISBN 978-5-9530-0321-6.

- Pantelica A., Culicov O.A., Frontasyeva M.V., Calinescu I.C., Industrial impact on some root vegetables studied by INAA, 20<sup>th</sup> International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei (ISINN-20), «Fundamental Interactions & Neutrons, Nuclear Structure, Ultracold Neutrons, Related Topics», Alushta, Ukraine, May 21 –26, 2012, http://isinn.jinr.ru/20/prog.html, Poster presentation, 24.05., Abstracts of the Seminar, Dubna, JINR, 2012, ISBN 978-5-9530-0321-6.
- 202. Pantelica A., Culicov O.A., Frontasyeva M.V., Ene A., Badita C.R., Elemental concentrations in root vegetables and host soil determined by Instrumental Neutron Activation Analysis (INAA), The 8th General Conference of Balkan Physical Union, 8th BPU8, 5 7 July 2012, Constanta, Romania; Section Nuclear Physics, Poster S1\_P05, Book of Abstracts, p. 41-42, ISBN 978-606-598-181-2, http://wwwold.univ-ovidius.ro/bpunpconferences2012/Imagini/programBPU.pdf.
- 203. Pantelica A., Frontasyeva M.V., Ene A., Ciortea C., Gugiu M., Ghita D., Elemental concentrations in tree leaves as trace element bioaccumulators in air pollution preventing determined by PIXE technique, 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO ICAC'2012-Analytical Chemistry for a Better Life, 18-21 September 2012, Targoviste, Romania.
- 204. Ene A., Pantelica A., Frontasyeva M., Sion A., Nuclear analytical techniques for the determination of trace elements in soils. The 1<sup>st</sup> International Conference on Analytical Chemistry RO - ICAC'2012-Analytical Chemistry for a Better Life, 18-21 September 2012, Targoviste, Romania. Book of Abstracts, Bibliotheca Publishing House, Targoviste, 2012, ISBN 978-973-712-705-1, p. 268-169.
- 205. Florek M., Holý K., Masarik J., Sýkora I., Mankovska B., Oszlany J., Frontasyeva M.V., Pavlov S. S., Some results of cooperation between Slovakia and FLNP JINR in the Environmental Research (2000–2012), International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei, Alushta, May 21-26, 2012.
- 206. Maňkovská B., Oszlanyi J., Frontasyeva M., Florek M., Anráš P., Moss biomonitoring in Slovakia: past, present and future. International Seminar on Interaction of Neutron with Nuclei, Dubna, Alushta, May 21-26, 2012.
- 207. Furman W., Adam J., Baldin A., Gundorin N., Rogov A.et al., "Recent results of study of ADS with 500 kg natural uranium target assembly QUINTA irradiated by deuterons with energies from 1 to 8 GeV at JINR NUCLOTRON", In Proceedings of XXI IHEP PoS(MC2000)002



# 4. ПРЕМИИ И СТИПЕНДИИ

### **PA3HOE**



#### Л. Ангел

Премия за лучший стендовый доклад в разделе «Прикладная ядерная физика» 2-ой Европейской конференции по ядерной физике была присуждена Л. Ангел (ЛНФ ОИЯИ; Институт химических исследований Академии наук Молдовы, Кишинев, Молдова) за работу «Моделирование молекулярной динамики железосодержащего лактоферрина человека», соавтор Р. Эрхан (ЛНФ ОИЯИ; Национальный институт физики и ядерной технологии им. Х.Хулубея, Бухарест, Румыния).

На каждой сессии ПКК по физике конденсированных сред и ядерной физике проводится конкурс на лучший стендовый доклад среди молодых ученых. Доклад З.И.Горяйновой «Биомониторинг в Албании с помощью мхов и ГИС технологий» был в числе трех лучших стендовых докладов, отобранных для устного представления на сессии Ученого совета ОИЯИ.

### СТИПЕНДИИ ОИЯИ И ЛНФ

С 2010 г. Объединение молодых ученых и специалистов ОИЯИ проводит ежегодный конкурс «Молодежные гранты ОИЯИ». В 2012 г. среди победителей от ЛНФ:

- грант для молодых сотрудников с ученой степенью
   Р.Н. Васин
   А.И. Иваньков
- грант для молодых научных сотрудников Ю.В. Алексеёнок А.Е. Верхоглядов И.И. Зиньковская
  - Г.В. Кулин

- грант для молодых специалистов А.В. Кутергин М.В. Булавин Е.В. Лукин К.А. Мухин
- грант для молодых рабочих Д.В. Кокунов Д.А. Коровин

С 2002 г. в ЛНФ присуждается стипендия имени академика СССР и первого директора ЛНФ И.М.Франка с целью стимулирования научных и методических исследований молодых ученых. В 2012 г. стипендия им. И.М.Франка присуждена:

В области ядерной физики: С.В. Горюнов В области физики конденсированного состояния: С.Е. Кичанов В области методических исследований: И.В. Бажажина



# 4. ПРЕМИИ И СТИПЕНДИИ

С 2006 г. в ЛНФ ежегодно присуждается стипендия имени выдающегося ученого, членакорреспондента АН СССР Ф.Л. Шапиро. Стипендия присуждается по направлениям: физика УХН, поляризованные нейтроны и нейтронная спектроскопия.

В 2012 г. стипендия им. Ф.Л.Шапиро присуждена:

По направлению «Поляризованные нейтроны» А.И. Иваньков

### По направлению «Нейтронная спектроскопия» 3.И. Горяйнова

### ПРЕМИЯ ЛНФ

#### Физика ядра:

Вторая премия Третья премия «Квантовые аспекты бинарного и тройного «Исследование мгновенных нейтронов деления деления ядер» с помощью модернизированного детектора Авторы: В. И. Фурман, А. Л. Барабанов осколков деления». Авторы: Ш. Зейналов, О. Зейналова, М. А. Третья премия Назаренко, Ф.-Й. Хамбш, С. Оберстедт «О возможных нейтронных экспериментах по поиску новых взаимодействий, зависящих от спина». Автор: Ю. Н. Покотиловский. Прикладные и методические работы: Первая премия Вторая премия «Первый в мире шариковый холодный «Нейтронный спектрометр на базе протонного замедлитель». телескопа С электронной коллимацией Авторы: В. Д. Ананьев, А. А. Беляков, М. В. протонов отдачи». Булавин, А. Е. Верхоглядов, Е. Н. Кулагин, С. А. Авторы: В. М. Милков, Ц. Ц. Пантелеев, А. А. Куликов, А. А. Кустов, А. А. Любимцев, К. А. Богдзель, В. Н. Швецов, С. А. Кутузов, С. Б. Мухин, Т. Б. Петухова, А. П. Сиротин, А. Н. Борзаков, П. В. Седышев. Федоров, Е. П. Шабалин, Д. Е. Шабалин, В. К. Широков.

#### Поощрительные премии

«Представление данных незеркального рассеяния и пространственного расщепления пучка нейтронов» Авторы С. В. Кожевников, Ф. Отт, Ф. Раду «Корреляционная времяпролетная спектрометрия ультрахолодных нейтронов» Автор: Ю. Н. Покотиловский

#### Физика конденсированных сред:

Первая премия	<u>Вторая премия</u>					
«Теоретические и экспериментальные	«Влияние высокого давления на структуру и					
исследования нейтронных волноводов и их	атомную динамику молекулярных и ионных					
применение для развития зондовой нейтронной	сегнетоэлектриков»					
микроскопии».	Авторы: Д. П. Козленко, С. Е. Кичанов, А. В.					
Авторы: В. К. Игнатович, С. В. Кожевников, Ю.	Белушкин, С. Г. Джабаров, Б. Н. Савенко, Е. В.					
В. Никитенко.	Лукин.					
<u>Третья премия</u>						
«Дополняющие исследования мезоморфных	и физико-химических свойств нового					
антиферроэлектрика MHPSBO10»						
Авторы: К. Дружбицки, Е. Микули						





### ПРЕМИЯ ОИЯИ

Премия ОИЯИ присуждается ежегодно за лучшие научные, научно-методические и научнотехнические прикладные работы. В 2012 следующие научные работы, представленные сотрудниками ЛНФ, удостоены премий ОИЯИ:

#### В области научно-методических исследований:

#### Первая премия

«Физический и энергетический пуск модернизированного реактора ИБР-2 (ИБР-2М)». Авторы: В.Д. Ананьев, А.В. Виноградов, А.В. Долгих, Л.В. Едунов, Ю.Н. Пепелышев, А.Д. Рогов, С.А. Царенков, А.А. Заикин, И.Т.

Третьяков, Н.В Романова.

#### Вторая премия

«Комплексный метод исследования перспективных функциональных материалов с помощью квантовой химии, нейтронного рассеяния и оптической спектроскопии». Авторы: В.Ю. Казимиров, М.Б. Смирнов, А.М. Балагуров, И. Натканец.

### В области экспериментальной физики:

### Вторая премия

«Преломление и отражение поляризованных нейтронов от неколлинеарных и некомпланарных магнитных систем».

Авторы: В.Л. Аксенов, В.И. Боднарчук, В.К. Игнатович, С.В. Кожевников, Д.А. Корнеев, Ю.В. Никитенко, А.В. Петренко, Ф. Раду, А.А. Фраерман.



# 5. СОБЫТИЯ



Л. Чер (НЦБ, Венгрия)

- Белушкин А.В. (ЛНФ, ОИЯИ) (18.01.2012)
  Модернизированный импульсный реактор ИБР-2: текущее состояние и будущие перспективы
- Козленко Д.П. (ЛНФ, ОИЯИ) (18.01.2012) Комплекс спектрометров реактора ИБР-2М: текущее состояние и направления развития
- Подурец К.М. (НИЦ КИ) (*18.01.2012*)

### СЕМИНАРЫ ЛНФ

Нейтронная радиография: методы и применения

- Штробль М. (ESS) (*18.01.2012*) Возможности нейтронной радиографии на источниках с длинным импульсом.
- Никитин В.А. (ЛФВЭ, ОИЯИ) (*25.01.2012*) Физика фундаментальных частиц материи – вид с птичьего полёта
- Кхием Л.Х. (Вьетнамский институт физики) (05.04.2012)
   Вьетнамская Академия Науки и Технологии. Текущий статус ядерных исследований во Вьетнаме
- Чер Л. (БНЦ, Венгрия) (18.02.2012)
  Обзор научной деятельности
  Будапештского Нейтронного Центра
- Харрисон А. (ILL, Франция) (09.10.2012)
  Развитие и новые возможности научных исследований в ИЛЛ
- Максименко С.А. (Институт ядерных проблем БГУ, Беларусь) (07.12.2012) Термостойкие фосфатные композиции, модифицированные соединениями бора: применение в качестве защиты от электромагнитного и ионизирующего излучения

### ПАМЯТНЫЕ МЕРОПРИЯТИЯ



29 сентября 2012 одна из аллей ОИЯИ на площадке ЛЯП была названа в честь выдающегося польского ученого, академика Польской академии наук, профессора Института ядерной физики (Краков) Ежи Яника, научная деятельность которого была неразрывно связана с

С Лабораторией нейтронной физики. момента образования Лаборатории профессор Е. Яник активно участвовал в создании и развитии экспериментальных установок на нейтронных источниках ЛНФ, основал Лаборатории R польскую нейтронную группу принимал И непосредственное участие в проведении экспериментов ПО нейтронной спектроскопии конденсированных сред.

Профессор Е. Яник в течение многих лет возглавлял нейтронный комитет и являлся членом Ученого совета ОИЯИ. Он воспитал несколько поколений ученых, которые продолжают исследования в ОИЯИ и в других ведущих нейтронных центрах мира.



### 5. СОБЫТИЯ

### КОНФЕРЕНЦИИ И СОВЕЩАНИЯ

С 21 по 26 мая этого года в Алуште (Крым, Украина) состоялся юбилейный 20-й Международный семинар по взаимодействию нейтронов с ядрами (ISINN-20). Программа совещания включала широкий круг вопросов нейтронной физики: от нарушения фундаментальных симметрий во взаимодействии нейтронов с ядрами до вызывающих большой интерес в странах-NRNO сугубо участницах прикладных проблем, в частности, в области наук о жизни.



Постерная сессия CMSMS'12.



Слева направо: В.В. Несвижевский (ИЛЛ, Франция), Л. Чер (Венгрия), А.В. Стрелков (ОИЯИ) на ISINN-20.

С 3 по 7 сентября 2012 года также в Алуште, проходила Международная летняя «Комплексные школа-совещание И магнитные мягкие системы: физикомеханические и структурные свойства» (CMSMS'12), организованная совместно ЛНФ ОИЯИ. Западным Университетом Тимишоары (Румыния), Институтом механики сплошных сред (Пермь, РАН), Институтом физики и ядерной инженерии (Бухарест) И Румынским физическим обществом.

По инициативе представителя Румынии в ENSA Лаборатория нейтронной физики ОИЯИ была выбрана местом проведения 39-го Совещания Европейской ассоциации по нейтронному рассеянию. Совещание состоялось 8-9 октября 2012 г.

### ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА

Цель образовательной программы ЛНФ - обучение студентов и молодых специалистов нейтронным методам исследования конденсированных сред, а также методам проектирования и разработки электроники и автоматики современных экспериментальных установок. В течение 2012 года в ЛНФ выполнили свои курсовые и дипломные работы более двадцати студентов из различных российских университетов.

В 2012 г. непосредственно Лабораторией нейтронной физики или при ее участии были организованы и проведены три научные школы для обучения студентов и повышения квалификации молодых ученых.



### 5. СОБЫТИЯ

С 17 июня по 5 июля в Объединенном институте ядерных исследований, НИЦ «Курчатовский институт» Институте и кристаллографии PAH (при поддержке Межгосударственного гуманитарного фонда сотрудничества государств участников CHL. Министерства образования и науки Российской Федерации и Международной ассоциации академий наук) проводились V Высшие курсы стран СНГ для молодых ученых, аспирантов и студентов старших курсов по современным исследования наносистем методам И материалов «Синхротронные И нейтронные исследования наносистем (СИН-нано-2012)».



СИН-нано-2012. Постерная сессия

IV Международная молодежная научная школа «Современная нейтронография» (24 -28 сентября 2012 г.б Дубна). В работе школы приняли участие около 80 студентов, аспирантов и молодых ученых до 35 лет из России, Белоруссии, Украины, Армении, Польши, Словакии и других стран (при поддержке образования Министерства И науки Российской Федерации).

Группа студентов да спектрометре ДН-12 реактора ИБР-2

Третья международная молодежная школа «Приборы методы научная И экспериментальной ядерной физики. Электроника И автоматика (8-12 экспериментальных установок» сентября 2012 г., Дубна) В Школе приняли участие 53 слушателя из 7 стран Европы и Азии (при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации).

Лабораторные работы студентов в Отделе комплекса спектрометров ИБР-2.



Во время работы школ были организованы экскурсии на импульсный реактор ИБР-2 и нейтронный источник ИРЕН, где участники ознакомились с возможностями этих уникальных установок. Слушатели школы приняли участие в выполнении лабораторных работ, решении учебных задач по тематикам лекций и познакомились с ведущими учеными и специалистами лаборатории. Они могли также представить результаты собственных исследований в ходе стендовых сессий и кратких устных сообщений.


## 5. СОБЫТИЯ



Были организованы также лекции и экскурсии на установки ЛНФ для учителей физики и их учеников старших классах из России и других стран.

> Ученики школы № 18 Новочебоксарск, РФ на пульте управления ИРЕН.

ЛНФ успешно сотрудничала с Учебнонаучным центром ОИЯИ в организации летней практики для студентов из странучастниц ОИЯИ (Беларусь, Чехия, Польша, Румыния, Словакия) и ассоциированных стран (Египет, Южная Африка).

Польские студенты на летней практике на спектрометре HEPA реактора ИБР-2.



Ведущие ученые ЛНФ читают лекции в Международном университете «Дубна» и Дубненском филиале Института ядерной физики им. Д.В.Скобельцина Московского государственного университета.

#### ОФИЦИАЛЬНЫЕ ДЕЛЕГАЦИИ

- Делегация Вьетнамской Академии Науки и Технологии (ВАНТ), возглавляемая президентом ВАНТ профессором Чо Ван Минном, посетила установки ЛНФ в ходе рабочего визита в ОИЯИ в июле 2012.
- Члены рабочей группы по инновациям российско-американской президентской комиссии посетили ОИЯИ в октябре 2012. В ходе визита на реактор ИБР-2 было обсуждено потенциальное использование экспериментальных установок ЛНФ в инновационных программах.
- Посещение делегации бизнесменов из ЕС в рамках Президентской Программы Обучения управленческих кадров в октябре 2012.

 Посещение ОИЯИ представителями польской промышленности в ноябре 2012.



Американская делегация в экспериментальном зале ректора ИБР-2.





## СТРУКТУРА ЛАБОРАТОРИИ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

Дирекция:		
Директор	А.В. Белушкин	
Заместитель директора по научной работе	В.Н. Швецов	
Заместитель директора по научной работе	Делег Сангаа	
Заместитель директора по общим вопросам	С.В. Козенков	
Главный инженер	А.В. Виноградов	
Ученый секретарь	О.А. Куликов	
Научный руководитель Лаборатории	В.Л. Аксенов	
Советник при дирекции лаборатории	В.Д. Ананьев	

Реактор и технические подразделения	Руководитель
ИБР-2 реактор	Главный инженер: <i>А.В. Долгих</i>
Механико-технологический отдел	А.А. Беляков
Электро-технологический отдел	В.А. Трепалин
Конструкторское бюро	А.А. Кустов
Экспериментальная мастерская	А.Н. Кузнецов

Научные подразделения	Руководитель
Научно-экспериментальный отдел нейтронных исследований конденсированных сред	Д.П. Козленко
Отделение ядерной физики	В.Н. Швецов
Научно-экспериментальный отдел комплекса спектрометров ИБР-2	С.А. Куликов

Административные службы
Секретариат
Финансы
Персонал

Группа ученого секретаря
Секретариат
Перевод
Графика



#### НАУЧНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ ОТДЕЛ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Подразделение	Название	Руководитель		
Сектор 1: Нейтро	Сектор 1: Нейтронной дифракции. Руководитель: А.М. Балагуров			
Группа No.1	ФДВР, ФСД,	А.М. Балагуров		
Группа No.2	ДН-2	А.И. Бескровный		
Группа No.3	ДН-12	В.Н. Савенко		
Группа No.4	Геоматериалы	А.Н. Никитин		
Группа No.5	СКАТ/ЭПСИЛОН	К. Шеффцюк		
Сектор 2: Нейтронной оптики. Руководитель <i>: М.В. Авдеев</i>				
Группа No.1	Физики поверхностей	Ю.Н. Никитенко		
Группа No.2	Физики наносистем	М.В. Авдеев		
Группа малоуглового рассеяния		А.И. Куклин		
Группа неупругого рассеяния		Д. Худоба		

#### ОТДЕЛЕНИЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Подразделение	Название	Руководитель	
Сектор 1. Исследование нейтронно-ядерных взаимодействий. Руководитель: <i>Ю.Н. Копач</i>			
Сектор 2. Исследование фундаментальных свойств нейтрона. Руководитель: <i>Е. В. Лычагин</i>			
Сектор 3. Нейтронного активационного анализа и прикладных исследований. Руководитель: <i>М.В. Фронтасьева</i>			
Группа No.1	Аналитическая М.В. Фронтасьева		
Группа No.2	Экспериментальная С.С. Павлов		
Установка ИРЕН. Руководитель: <i>В.Г. Пятаев</i>			

## ОТДЕЛ КОМПЛЕКСА СПЕКТРОМЕТРОВ ИБР-2

Подразделение	Название	Руководитель
Группа No.1	Детекторов	А.В. Чураков
Группа No.2	Электроники	А.А. Богдзель
Группа No.3	Информационных технологий	А.С. Кирилов
Группа No.4	Окружения образца и прерывателей	А.П. Сиротин
Группа No.5	Криогенных исследований	А.Н. Черников
Группа No.6	Холодных замедлителей	С.А. Куликов



## 6. СТРУКТУРА



## ПЕРСОНАЛ

#### Распределение персонала по подразделениям на 31.12.2012

Тема	Подразделение	Количество сотрудников
-1104-	Отделение ядерной физики	87
-1069-	Научно-экспериментальный отдел нейтронных исследований конденсированных сред	89
-1075-	Научно-экспериментальный отдел комплекса спектрометров ИБР-2	42
-1105-	Реактор ИБР-2	46
	Механико-технологический отдел	47
	Электро-технологический отдел	31
	Экспериментальная мастерская	38
	Группа ядерной безопасности	7
	Конструкторское бюро	6
	Инфраструктура ЛНФ:	
	Дирекция	9
	Отдел обслуживания	24
	Группа ученого секретаря	3
	Группа материально-технического снабжения	4
ИТОГО		433

#### Персонал из стран-участниц ОИЯИ (кроме РФ) на 31.12.2012

Страна	Количество сотрудников	Количество молодых сотрудников (≤35 лет)
Азербайджан	9	8
Белоруссия	1	1
Болгария	5	3
Германия	3	1
Грузия	2	-
Казахстан	7	7
Молдова	3	3
Монголия	10	7
Польша	9	3
Румыния	7	2
Украина	14	13
ИТОГО	70	48







#### Аспиранты

В 2012 в ЛНФ проводили экспериментальную работу по диссертациям 23 аспиранта из 11 стран.

ФИО	Страна	Учреждение
Джабаров С.Г.	Азербайджан	Институт физики ААН
Таибов Л.	Азербайджан	Институт радиационных проблем ААН
Алексеёнок Ю.В.	Белоруссия	Международный государственный экологический университет им. А.Д.Сахарова
Милков В.М.	Болгария	Софийский университет
Барандовкий Л.	Македония	Университет Кирилла и Мефодия Скопье
Ангел Л.	Молдова	Институт химии АНМ
Зиньковкая И.	Молдова	Университет АНМ
Нямсурен В.	Монголия	Национальный университет Монголии
Ерхан Р.В.	Румыния	Бухарестский Университет
Булавин В.В.	Россия	Тульский государственный университет
Горюнов С.В.	Россия	УНЦ ОИЯИ
Горяйнова З.И.	Россия	Институт проблем экологии и эволюции им. А.Н. Северцова РАН
Мухин К.А.	Россия	УНЦ ОИЯИ
Верхоглядов А.Е.	Россия	УНЦ ОИЯИ
Зонтиков А.О.	Россия	Международный университет природы, общества и человека «Дубна»
Нтомзихона Беаулах Ндлову	ЮАР	Университет Стелленбош
Кравцова А.В.	Украина	Институту биологии южных морей им. А.О.Ковалевского НАН УКРАИНЫ
Нагорный А.В.	Украина	Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко
Соловьев Д.В.	Украина	Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко
То Тхан Лоан	Вьетнам	Тульский государственный университет
Фан Тхи Нгок Лоан	Вьетнам	Тульский государственный университет
Чан Туан Ан	Вьетнам	Тульский государственный университет
Данг Нгок Тоан	Вьетнам	Тульский государственный университет

В 2012 году были защищены 12 бакалаврских и 6 магистерских дипломов на основе экспериментального материала, полученного в ЛНФ. Восемь наших сотрудников получили степень кандидата наук и один – степень доктора наук.



# 7. МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО И ПОЛИТИКА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ

#### МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В 2012 г. Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка осуществляла сотрудничество с 148 научными учреждениями из 20 стран-участниц ОИЯИ и ассоциированых стран и с 29 учреждениями из 19 стран, не являющихся участницами ОИЯИ. Ниже представлено распределение учреждений по странам.



#### ПОЛИТИКА ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ

Первый раунд по приему заявок на эксперименты на модернизированном реакторе ИБР-2 проходил с 15-го ноября 2011 г. по 31 января 2012 г. и был продлен до 15-го февраля 2012 г.





В итоге было получено 163 заявки из 17 стран; 119 заявок приняты к проведению на спектрометрах ИБР-2М, из них 93 реализованы в 2012 г.





Распределение заявок по научным направлениям

Распределение заявок по принадлежности заявителя



Распределение заявок по установкам

Распределение пользователей из странучастниц ОИЯИ или ассоциированных стран в 2012.

Распределение пользователей из стран, не являющихся участницами ОИЯИ, в 2012.

Страна	Количество пользователей
Азербайджан	1
Белоруссия	4
Болгария	2
Венгрия	2
Вьетнам	1
Германия	9
Египет	4
Монголия	5
Польша	5
Румыния	16
Украина	5
Чехия	8
ЮАР	4

Количество Страна пользователей Великобритания 1 Индонезия 1 Китай 5 1 Латвия Южная Корея 2 1 Швеция Япония 1



## 8. ЛНФ ИМ. И.М. ФРАНКА И СМИ

Самые выдающиеся события ЛНФ в 2012 – начало регулярной эксплуатации модернизированного реактора ИБР-2, возобновление пользовательской программы на спектрометрах и успешный запуск холодного замедлителя нейтронов на реакторе ИБР-2М – были отражены:

• в передачах национальных (ТВ канал Культура) и региональных (ТВ Подмосковье и Дубна ТВ) телевизионных каналов;



14.03.2012. ТВ Подмосковье-"Инновация+" http://rutube.ru/tracks/5431453.html#cutid1-



29.11.2012. ТВ Россия Культура - "Черные дыры-белые пятна" <u>http://tvkultura.ru/video/show/brand\_id/20863/video\_id/1774</u> 42

в ведущих российских научно-популярных изданиях;





Наука и жизнь № 4/2012 http://www.nkj.ru/archive/articles/20608/



в электронных публикациях. http://www.i-mash.ru/news/nov\_otrasl/19615-modernizirovannyjj-reaktor-ibr-2-vyveden-na.html http://www.nanonewsnet.ru/news/2012/reaktor-nachal-regulyarnuyu-rabotu-na-eksperiment

Репортажи о событиях и достижениях ЛНФ регулярно публиковались в двуязычном бюллетене «Новости Объединенного Института Ядерных Исследований» и еженедельном издании ОИЯИ «ДУБНА: Наука, Содружество, Прогресс».



#### Владимир Казимирович ИГНАТОВИЧ

К 75-летию одного из ведущих научных сотрудников Лаборатории нейтронной физики.

Текст Стрелкова А.В.

В середине шестидесятых годов, не без участия зам. директора ЛНФ Ф.Л. Шапиро, в нашу Лабораторию пришел аспирант лаборатории теоретической физики В.К. Игнатович. Федор Львович по достоинству оценил способности и знания молодого теоретика и предложил ему работать в ЛНФ. Тогда тематика Лаборатории была сосредоточена в основном на исследованиях в области ядерной физики, и Федор Львович привлек В.К. Игнатовича к обсуждению возможности постановки в ЛНФ эксперимента по поиску существования у элементарной частицы – нейтрона электрического дипольного момента (ЭДМ). Результат этого фундаментального эксперимента мог прояснить ситуацию, возникшую незадолго до этого в связи с наблюдением американскими физиками эффекта несохранения Т-четности в распаде К°-мезонов. Для эксперимента по поиску ЭДМ у нейтрона В.К. Игнатович рассчитывал время удержания нейтрона в системе из нескольких монокристаллов посредством последовательных брэгговских отражений. Втянувшись в эту проблему, В.К. Игнатович неожиданно предложил искать ЭДМ не у нейтрона, а у электрона в АЛНФ, в группе Б.В. Васильева.

В дальнейшем В.К. Игнатович увлекся ультрахолодными нейтронами – УХН, которые Ф.Л. Шапиро предлагал использовать в эксперименте по поиску ЭДМ нейтрона. Эти УХН буквально на глазах у В.К. Игнатовича впервые были наблюдены в эксперименте на реакторе ИБР в ЛНФ. В дальнейшем молодой теоретик активно участвовал во всех экспериментах с УХН. проводимых в ЛНФ и на реакторах других институтов. Особенно его привлекла интригующая проблема неясной утечки УХН из замкнутых сосудов, вызванная аномально большими потерями УХН при ударе их о стенки сосуда. Для объяснения причины этого явления В.К. Игнатович выдвинул ряд предположений, начиная от некоторого несовершенства самой квантовой механики и кончая присутствием загрязнений поверхности атомами водорода. Подытожив свои знания в области УХН, Игнатович защитил кандидатскую диссертацию и написал монографию «Физика ультрахолодных нейтронов», которая была издана в 1986 г., а затем переведена и вышла в зарубежных изданиях. Это была первая книга об УХН, и до сих пор она является прекрасным справочным материалом. Нейтрон, как волна, все больше привлекал В.К. Игнатовича. Он ряд своих работ посвятил поведению нейтрона как волнового пакета и сделал ряд несколько неожиданных предположений, касающихся несовершенства теории рассеяния. Авторитет В.К. Игнатовича как ученого рос, и он, получив приглашение, уезжает в длительную командировку в Японию, где провел теоретические и экспериментальные исследования по нейтронной оптике.

В 2007 г. он защитил докторскую диссертацию, а в следующем году из печати вышла его вторая монография «Нейтронная оптика». Свою увлеченность нейтронной оптикой В.К. Игнатович распространяет на исследования в области обычной оптики светового диапазона. Он делает смелые предположения для объяснения механизма образования загадочного природного феномена – шаровой молнии, как ловушки для световых фотонов. В.К. Игнатович отличается постоянной нацеленностью на исследование сути физических процессов, будь то экспериментальный аппаратурный эффект или фундаментальные явления в квантовой механике: эффект Ааронова-Бома, фаза Берри или парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена. Он чаще других выступает на семинарах, которые превращаются в живую, порой даже шумную дискуссию по обсуждаемой проблеме. В.К. Игнатович прекрасно владеет английским языком, и не раз ему приходилось быть синхронным переводчиком на разных совещаниях и конференциях.



В.К. Игнатовича отличает чувство внутренней гражданской ответственности за судьбу нашего общества. Он еще в шестидесятых годах пишет письмо в ЦК КПСС, в котором предлагает реализовать предложение Н.С. Хрущева о бесплатном проезде в городском транспорте. Во время арабо-израильской войны в октябре 1973 г. «вражеские голоса» сообщили о том, что исламские экстремисты из организации «Черный сентябрь» пригрозили А.Д. Сахарову расправой, если он не откажется от своего протестного письма к правительствам СССР и США, в котором он предложил не посылать оружие воюющим странам. В.К. Игнатович предположил, что для советского руководства представился удобный случай избавиться от опального академика. В.К. Игнатович, понимая, что его протестное письмо в правительство может не успеть, да и просто «затеряться», пришел к Б.М. Понтекорво и убедил его попытаться предпринять действия в защиту А.Д. Сахарова. После этой беседы Бруно Максимович выехал в Москву, а вернувшись утром на следующий день, сказал, что в Президиуме Академии наук его убедили в том, что А.Д. Сахаров будет надежно защищен.

Не остался равнодушный В.К. Игнатович и после неудачной первой попытки в деле разрядки отношений между СССР и США во время встречи М.С. Горбачева и Р. Рейгана в Рейкьявике в 1986г. Он обратился с письмом к обоим президентам со своими предложениями по дальнейшему улучшению отношений между СССР и США.

Конечно, такая социально-политическая активность раздражала местное партийное руководство, которое «получало по шапке» после очередного письма-обращения в ЦК от беспартийного В.К. Игнатовича, считающего своим долгом высказывать идеи не только по физике, но и по реформированию нашей, как ему казалось, неэффективно работающей государственной структуры.

В.К. Игнатовичу исполнилось 75 лет. У него трое сыновей, двое из которых окончили МГУ и работают в США. Конечно, возраст дает о себе знать: путь от дома до работы стал более продолжительным, да и по лестницам уже так быстро не удается подниматься, но это совсем не коснулось его увлеченности физикой. Он всегда доступен для своих коллег, с которыми охотно делится своими знаниями, он постоянно находится в контакте с молодежью: читает лекции, принимает экзамены у своих студентов, и это ему нравится. А выступающие докладчики на семинарах, увидев в зале В.К. Игнатовича, немного побаиваются его неожиданных вопросов и принципиальных замечаний, всегда проясняющих суть обсуждаемого явления.

#### Зигфрид МАТТИС

К 75-летию одного из ведущих научных сотрудников Лаборатории нейтронной физики.

Текст Иванкины Т.И.

Писать о Зигфриде Маттисе трудно и ответственно. Трудно, потому что мы с ним относимся к разным поколениям, ответственно, потому что он для меня скорее учитель, поэтому пиетет ученика заставляет себя контролировать и не позволять себе легковесных высказываний.

Когда-то от своего преподавателя физики в Тульском университете я услышала такую фразу – «Он прекрасный физик, а математика у него – на кончиках пальцев». Эта характеристика как нельзя лучше отражает профессиональные качества Зигфрида. Нет такой физической задачи, которую он не смог бы решить, используя сложнейший математический аппарат.

Впервые о Зигфриде Маттисе я услышала в 80-е годы. Тогда будучи аспиранткой Института физики Земли им.О.Ю.Шмидта АН СССР в Москве, я знакомилась с новым научным



направлением – математическим текстурным анализом. В то время меня интересовала возможность количественного описания кристаллографических текстур (преимущественных ориентировок минералов) кварцсодержащих горных пород, обладающих пьезоэлектрическими свойствами. В 1982 году была издана на английском языке книга профессора Х.Бунге, ФРГ [H.J.Bunge Texture analysis in materials science // Butterworths. London. 1982]. Научная школа профессора Бунге была известна во всем, как принято теперь называть, «мировом текстурном сообществе». Книгу Бунге штудировали и металловеды, и геофизики. Эта книга цитировалась многих научных статьях, посвященных измерению кристаллографических текстур BO поликристаллов различными физическими методами (рентгеновской дифракцией, оптическим микроскопом и т.п.) и количественному описанию текстур с помощью функций распределения зерен по ориентациям (ФРО). Метод Бунге по восстановлению ФРО из набора экспериментально измеренных полюсных фигур (ПФ) признавался как основополагающий. Однако, описывая результаты процедуры восстановления ФРО, исследователи вдруг все чаще стали упоминать о больших статистических ошибках или о появлении отрицательных значений ФРО, чего не может быть по определению. Большинство склонны были приписывать эти ошибки «некачественным измерениям» или огрехам в программировании. И тут вдруг появился ряд статей, в которых упоминался совершенно незнакомый мне автор [S.Matthies On the reproducibility of the orientation distribution function of texture samples from pole figure (Ghost phenomena) // Phys. Stat. Sol. (b), 1979], который уже давно откровенно писал о существовании «призраков», отрицательных ФРО и объяснял их (не может быть!!!) ограничениями самого метода. Выводы З.Маттиса были ошеломляющими. Мне предстояло искать другие возможности количественного описания текстурированных поликристаллов на основе экспериментальных данных. Такой метод вскоре был предложен самим З.Маттисом.

История же ученого-теоретика З.Маттиса начиналась так...(Все нижеприведенные подробные факты биографии З.Маттиса были записаны мной со слов самого ученого).

Зигфрид Рихардович Маттис родился 8 августа 1957 года около г.Дрездена, Германия в рабочей семье жестянщика. После окончания начальной школы прошел систему подготовки юных кадров тогдашней молодой ГДР, и был направлен в 1955 году для учебы на физфак Ленинградского университета.

Судьба подарила ему в жизни счастливую возможность учиться, сотрудничать и просто работать с выдающимися учеными своего времени. Так, он слушал лекции по математической статистике у самого В.И.Смирнова, физику у С.Э.Фриша и защитил диплом по кафедре В.А.Фока. Он успешно применил аппарат описания процесса передачи электронов близко пролетающих атомов (по материалам кандидатской диссертации Ю.Н.Демкова) на ядерный уровень, т.е. передачу нуклонов. В результате З.Маттис был направлен в аспирантуру в НИИЯФ МГУ в отдел А.С.Давыдова, и тесно сотрудничал с В.Г.Неудачиным, Ю.Ф.Смирновым и В.В.Балашовым. С последним его связывала тесная дружба до его недавней кончины.

В 1963 году З.Маттис защитил кандидатскую диссертацию по нуклонным ассоциациям в легких ядрах (область, которая опять стала «модной» в последние годы), получив хорошую закалку по квантовой механике и теории групп. Ходил на бурные, но удивительно глубокие по физическому мышлению Ландаувские семинары, и потерял, по его словам «за полчаса два литра пота», пробивая у Е.М.Лившица статью в ЖЭТФ. Спустя 20 лет они встретились с Лившицем опять в более дружеской атмосфере по случаю перевода З.Маттисом на немецкий язык и издания тома знаменитого краткого курса по квантовой механике и теории поля.

Вернувшись в 1964 году в Германию, Зигфрид становится сотрудником ЦИЯИ Россендорф, где ему посчастливилось семь лет работать рядом с физиком мирового класса и выдающимся по своим качествам человеком академиком Клаусом Фуксом. Совместно с советскими исследованиями, проводимыми в г.Мелекессе, в рамках программы развития ядерного реактора на быстрых нейтронах было проведено исследование поведения и

nual Report

возможности переработки пастообразного ядерного горючего на основе жидкого натрия, используя аппарат статистической физики и реологии.

Первый творческий отрезок жизни З.Маттиса в Лаборатории нейтронной физики относится к периоду с 1971 по 1977 гг. По предложению Ф.Л.Шапиро и под руководством К.Хеннига была создана немецкая группа по изучению энергетических уровней 4f –электронов в электрическом кристаллическом поле. Требовался опытный теоретик для интерпретации экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов. З.Маттис естественно согласился взяться за эту проблему, хотя опять пришлось перескочить по энергетической шкале на целые порядки: от атомов (eV) к ядрам (MeV) и к расстояниям уровней в кристаллических полях (meV). Притягивала не только возможность применения уже накопленного богатого опыта в области многочастичных квантовых систем, но и открывающиеся тогда новые возможности работы на первых мощных вычислительных машинах. Следует сказать, что любовь к физике, и математика - «на кончиках пальцев» потребовали своей реализации и в этом проекте. Расчет полей в ионных кристаллах усложнялся тем, что результирующие ряды с учетом все более удаленных оболочек соседних ионов очень медленно сходятся. Пришлось пойти на ухищрения, использовав современный аппарат сферических функций и теории групп, что привело к первому заметному международному резонансу работ З.Маттиса. Хотя Ю.М.Останевич с самого начала относился скептически к данной затее («Видали мы ряды и эти сферические функции...»).

Необходимо заметить, что «фирменная марка» Зигфрида Маттиса означает четкую формулировку физических предположений и то, что в конце всех сложных математических расчетов стоит «число», за которое автор ручается.

Вскоре последовало первое персональное приглашение (в те времена!) в Институт П.Шеррера (PSI) в Швейцарии, а по итогам дубненских работ З.Маттис защитил докторскую диссертацию в Техническом университете г.Дрездена (1978).

По возвращению в Россендорф 3. Маттис планирует обобщить развитый им аппарат на металлические образцы «с обилием свободных электронов между островами ионов». Однако в его жизни последовал новый крутой поворот, связанный с понятием «текстурный анализ» (ТА), который, по его словам, «к сожалению, не отпускает его все последующие десятилетия».

В 60-х годах профессор Х.Бунге, работавший тогда в Дрездене, осуществил большой качественный скачок в ТА, введя так называемую функцию распределения ориентаций ФРО, и показал ee применение к описанию технически интересных текстурированных поликристаллических металлических материалов. Саму ФРО можно восстановить из проекций (полюсных фигур ПФ), измеряемых дифракционным методом, используя для восстановления аппарат Фурье (сферические функции). В то же время в Россендорфе проводились первые в мире измерения ПФ с помощью нейтронов. С переездом Х.Бунге в ФРГ, в ГДР не осталось специалистов, которые смогли бы быстро обобщить оставленные им программы на интересующие геологов горные породы с симметриями кристаллов, более низкими, чем кубические.

Взгляды геофизиков и геологов были обращены к 3.Маттису. Последствия консультаций, сначала рассматриваемых им как «вспомогательные», для 3.Маттиса оказались крайне неожиданными. Он с его прирожденным чутьем к ошибкам заметил в 1977 году, что измеряемые дифракционные полюсные фигуры обладают инверсионной симметрией, поэтому полностью восстановить ФРО из «неполных» ПФ в общем случае нельзя. Восстановленные «по-Бунге» ФРО содержат «призраки» и бессмысленные отрицательные значения, тогда как ФРО как вероятностная функция – сугубо положительна. Необходимо было отойти от аппарата Фурье в вероятностном мире и найти алгоритм, в котором отрицательные числа вообще отсутствуют. 3.Маттис сделал многое в плане анализа и коррекции призраков, а также создания



«истинно» количественного текстурного анализа. За короткий срок он стал одним из его ведущих теоретиков.

Ежегодные «нейтронные школы» в 80-х годах в Россендорфе стали местом встречи текстурщиков запада и востока. А для Зигфрида последовали многочисленные рабочие поездки в институты многих стран. В итоге он по несколько лет работал во Франции, Италии, США (в основном, в Беркли), читал годовой курс по текстурному анализу в Южной Корее. В 1989 году был приглашен для чтения лекци1 в Сибирском отделении АН СССР. За все это время он не потерял связи с ЛНФ и его текстурной группой, высоко ценя творческую атмосферу и «тихий, взаимно уважающий стиль работы», заложенный И.М.Франком.

Встретиться же лично и познакомиться с Зигфридом мне уже посчастливилось, когда я начала работала в ЛНФ (с 1998 года). Это было в 1999 году на одной из «текстурных» конференций в Геттингенском университете в Германии. Уже тогда геофизики и геологи с полной уверенностью стали использовать количественный текстурный анализ для описания свойств текстурированных горных пород с использованием метода WIMV, названного в честь его создателей Вильямса, Имхофа, Маттиса и Винель. Кстати, Галина Винель – это супруга, соавтор статей и монографий Зигфрида, его надежда и опора в этой жизни.

Будучи формально уже на пенсии, 3.Маттис с большим интересом принял приглашение руководства ЛНФ с 2007 года работать несколько месяцев в году в качестве ведущего научного сотрудника в группе ныне покойного профессора А.Н.Никитина. Ему предстояло совместно изучать и описать свойства многофазных сильно анизотропных геологических материалов, обладающих порами, трещинами, несферическими зернами и собственными ФРО этих форм. Помимо этого нужно было передавать опыт молодым талантливым сотрудникам. За последние годы работы в ЛНФ 3.Маттисом успешно был развит и применен так называемый GeoMixSelf (GMS) – метод, способный описать в разумном приближении свойства горных пород. Его интересуют и проблемы, непосредственно связанные с нейтронно-дифракционным экспериментом, например есть идеи оптимизации и повышения качества информации дифракционных спектров, измеряемых с помощью дифрактометров СКАТ и Эпсилон.

Зигфрид Маттис имеет около 130 публикаций и монографий. Его алгоритмы, особенно WIMV-метод восстановления ФРО, метод стандартных функций и метод геометрического усреднения упругих свойств являются важными элементами программных систем POPLA (Лос-Аламос, США), BEARTEX (Беркли, США) и MAUD (Тренто, Италия) и широко используются во всем мире. В 1983 году З.Маттис стал лауреатом премии имени Г.Герца Германского физического общества, в 1984 г. профессором при АН ГДР.

В личном же плане Зигфрид многосторонне развитый человек. Как физик-теоретик он по стилю «монах», предпочитает одиночество и покой (дипломную работу писал в стенном шкафу общежития). И еще, по его мнению, «надо уметь по возможности все, но лучше этого не показывать». А в жизни это приводило к тому, что он руководил группами теоретиков, был несколько лет референтом при управлении АН ГДР, в 70-х годах работал секретарем вицедиректора ОИЯИ К.Ланиуса, был профсоюзным активистом и т.д.

Зигфрид Маттис любит сотрудничать с экспериментаторами, без усилий преодолевая трудности в повседневной жизни, советует: «Если у вас практические проблемы, спросите теоретика». В молодости он занимался легкой атлетикой (имел достижения, «чуть лучше женских мировых рекордов»), военным пятиборьем, спортивным туризмом. Был одним из трех основателей «Дубненской конюшни» Тито Понтекорво, и объездил на своем «Прогрессе» все близлежащие окрестности. Много путешествовал, посетил разные уголки России и мира.

З.Маттис охотно делится своим опытом с людьми творческими, особенно способными молодыми физиками, однако не любит чрезмерно публиковаться и ездить на всевозможные конференции. « В отличие от эстрадного певца», - считает он, «ученый поет свою песню лишь



один раз. Новые интересные работы в большинстве своем приходят ко мне сами собой, часто еще до их публикации».

«Многому в своей жизни я обязан своей супруге Г.В.Винель, - подчеркивает З.Маттис,- с которой познакомился уже на первом курсе и тесно сотрудничал по работе». В 2012 году они с супругой отпраздновали «золотую» свадьбу. У него – большая семья: двое детей – физики и пятеро внуков, которые радуют его своими успехами в учебе, спорте и музыке.

Вот таков он, Зигфрид Маттис, многогранный ученый, великолепный учитель и человек, который «умеет по возможности все».

#### Александр Владимирович СТРЕЛКОВ

К 75-летию одного из ведущих научных сотрудников Лаборатории нейтронной физики.

#### Текст Шабалина Е.П.

Александр Владимирович Стрелков пришел в Лабораторию нейтронной физики ОИЯИ в 1960 году, после окончания Горьковского университета, молодой, взъерошенный, в потертом свитере. Он уже немало знал, но ещё не много умел. А теперь.... Теперь, каждый раз, входя в кабинет Саши (да, его манера жить, его манера общаться с людьми не оставляет возможности другого обращения), я вспоминаю книгу о Роберте Вуде, «чародее физической лаборатории». Такая же непреодолимая тяга и невероятное увлечение физическими опытами.... Такое же изобретательство и мастерство эксперимента.... Это вам не Гарри Поттер, это – истинное волшебство грамотного физика.

Когда пишешь или рассказываешь о неординарном человеке, не сразу решишь, с чего начать. Имя Саши Стрелкова напоминает о великом множестве событий, явлений, эпизодов, дел. Но, наверное, в научно-информационном журнале следует, прежде всего, отметить, что Александр Владимирович – превосходный физик-экспериментатор, лучший эксперт по регистрации нейтронов. Он с помощью своих чудесных детекторов может всё: определить на расстоянии в километры, работает ли тот или иной ускоритель ОИЯИ, отрезвить любителей сенсационных открытий холодного термояда, измерить гравитационные уровни ультрахолодных нейтронов и многое другое.

Но и в другом – в умении жить честно, полнокровно, интересно – Саша также талантлив и неповторим, как в физике. Он – оригинал и чудак в хорошем смысле. Саша – это изоленты на велосипедных колесах вместо шин, это – три чашки чая на обед, это - дача в глухом лесу, за десятки километров от ближайшего поселка, где он выравнивает тяжеленный сруб из 30-см бревен с точностью до одного микрона (!) с применением только рычага, это – полеты на планере, прыжки с парашютом, падения с лыжного трамплина, это – изобретательные и смешные карикатуры и декорации к спектаклям. Для забежавших в кабинет коллег у него всегда наготове восторженные слова о том или ином замечательном человеке и физике, с которым недавно пообщался (а Саше везёт на дружбу с хорошими людьми), обязательные физические задачки на смекалку (особенно он любит задачи о бутылках в океане, наполовину наполненных, хотя сам абсолютный трезвенник), интересные истории и воспоминания о том, что другие давно забыли, что в действительности, возможно, было и не так красиво и героически, как в его рассказе, но «какая песня без баяна?» Баян, как пушкинский народный сказитель, хранитель былин и истории – это Саша Стрелков для ЛНФ.

И всё это – не эпатаж, не показуха. Это – радость жизни, это – эмоции и любовь, этоинтерес к людям. Дать жизнь четверым своим дочерям и сыновьям, научить физике слепого юношу – это ли не любовь?

Редко встретишь такую беззаветную верность своему Учителю, которую хранит Саша к памяти Федора Львовича Шапиро, уже сорок лет после его кончины. Зимой, в метель ли или в



трескучий мороз, на могиле Шапиро в Москве, в каждую годовщину его смерти, обязательно появляются хвойные ветки, срубленные Сашей на верхних «этажах» дубненских елок – внизу всё подчистили садоводы.

Единственный недостаток Александра Владимировича – выпестовал несколько прекрасных физиков, а сам не может выкроить времени на докторскую диссертацию.

Да, забыл про три волшебные буквы – УХН. Они всю жизнь связаны с работой А. В. Стрелкова. Если вы услышите слова «ультрахолодные нейтроны» – значит, где-то рядом притаился Александр Владимирович со своей «Дуней» (это не любовница, это – счетчик УХН). С 1968 года, когда он вместе с Юрием Наумовичем Покотиловским и Владиславом Ивановичем Лущиковым под руководством Ф.Л. Шапиро первым в мире доказал существование этих удивительных частиц (было зарегистрировано как открытие), он не изменял им никогда и до сих пор в Гренобле (к сожалению, наш реактор не может предоставить достаточное количество УХН) продолжает удивлять мир уникальными возможностями их применения для разгадок тайн мироздания. Впрочем, слово «удивлять» не совсем точно. Саша больше следует девизу «Надо не удивлять мир, а жить в нем». И он живет... Полнокровно, полезно, честно. Будь здоров, Александр Владимирович, Саша!





#### ОТДЕЛ НЕЙТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

- SMALL-ANGLE NEUTRON SCATTERING FROM MAGNETOFERRITIN: CONTRAST VARIATION M.V. Avdeev, V.I. Petrenko, L. Melnikova, O.I. Ivankov, V.M. Garamus, L. Almasy, Z. Mitroova, P. Kopcansky
- STRUCTURAL AND MAGNETIC SIZE EFFECTS IN NIO NANOPOWDERS A.M. Balagurov, I.A. Bobrikov, N. Mironova-Ulmane, A. Kuzmin

HYDROGEN BONDED NHO CHAINS FORMED BY CHLORANILIC ACID (CLA) WITH 4,40-DI-T-BUTYL-2,20-BIPYRIDYL (DTBBP) IN THE SOLID STATE

G. Bator, W. Sawka-Dobrowolska, L. Sobczyk, M. Owczarek, A. Pawlukojć, E. Grech, J. Nowicka-Scheibe

QUASIELASTIC NEUTRON SCATTERING BY LIQUID Na AND Na – H MELT N.M. Blagoveshchenskii, A.G. Novikov, V.V. Savostin, M.S. Shamaev

FREQUENCY SPECTRUM OF PURE SODIUM AND HYDROGEN IN Na – H MELT INVESTIGATION

N.M. Blagoveshchenskii, A.G. Novikov, V.V. Savostin, M.S. Shamaev

IN-SITU NEUTRON DIFFRACTION ANALYSIS OF LI-ION BATTERIES I.A. Bobrikov, A.M. Balagurov, Chih-Hao Lee, Chih-Wei Hu, Tsan-Yao Chen, Sangaa Deleg, D.A. Balagurov

INVESTIGATION OF PERIODIC MULTILAYERS V.I. Bodnarchuck, V.K. Ignatovich, S.P. Yaradaykin, L. Czer, T. Veres

APPLICATION OF NEUTRON TRANSMISSION DIFFRACTIONFOR MATERIAL STUDIES G.D. Bokuchava, I.V. Papushkin, E.S. Kuzmin

MICROSTRAIN STUDIES IN FERRITE-MARTENSITE STEEL USING TOF NEUTRON DIFFRACTION

G.D. Bokuchava, V.V. Sumin, I.V. Papushkin

THE CHANGES IN MAGNETIC STRUCTURE OF TbCo<sub>2</sub> AT HIGH PRESSURE E. Burzo, P. Vlaic, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, N.T. Dang, E.V. Lukin, B.N. Savenko

THE SANS STUDY OF THE UNBINDING TRANSITION OF LIPID MEMBRANES AT LOW CONCENTRATION OF  ${\rm Ca}^{2^+}$  IONS

Yu.E .Gorshkova, A.I. Kuklin, V.I. Gordeliy

STRUCTURE OF NANODIAMOND CLUSTERS IN AQUEOUS DISPERSIONS BY SMALL-ANGLE NEUTRON SCATTERING

M.V. Korobov, D.N. Volkov, L.A. Belyaeva, M.A. Proskurnin, M.V. Avdeev, O.V. Tomchuk, V.L. Aksenov, A.V. Rogachev

INVESTIGATION OF AMORPHOUS MAGNETIC WIRE USING POLARIZED NEUTRON MICROBEAM

S.V. Kozhevnikov, F. Ott, A. Thiaville, J. Torrejón, M. Vázquez

HIGH PRESSURE EFFECTS ON THE CRYSTAL AND MAGNETIC STRUCTURE OF MULTIFERROIC  $RbFe(MoO_4)_2$ 

D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, E.V. Lukin, N.T. Dang, A.I. Smirnov, B.N. Savenko

PERSISTENT LENGTH OF WORMLIKE MICELLES OF ANIONIC SURFACTANT V.S. Molchanov, O.E. Philippova, A.R. Khokhlov, A.V. Rogachev, D. Soloviov, A.I. Kuklin

\* Все экспериментальные отчеты опубликованы в том виде, в котором они представлены авторами.





## 10. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОТЧЕТЫ\*

AGGREGATION IN MIXED NONIONIC C14E7 AND ANIONIC CsDS SURFACTANTS MICELLAR SOLUTIONS

A. Rajewska, K. Mędrzycka, D.V. Soloviov

Q-SCALE CALIBRATION OF SMALL-ANGLE SCATTERING SPECTROMETERS A.V. Rogachev, M. Nyam-Osor, D.V. Soloviov, O.I. Ivankov, Yu.S. Kovalev, A. Jigounov, A.G. Soloviev, R.V. Erhan, A.I. Kuklin

FREQUENCY SPECTRA OF TUNGSTEN AT TEMPERATURES 293 AND 2400 K V.A. Semenov, O.A. Dubovsky, V.M. Morozov, A.V. Orlov, D.V. Savostin, V.V. Sudarev

#### ОТДЕЛЕНИЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

TRACE ELEMENT DEPOSITION IN MACEDONIA STUDIED BY MOSS BIOMONITORING TECHNIQUE, NAA, ICP-AES AND AAS

L. Barandovski, M.V. Frontasyeva, T. Stafilov, R. Šajn, K. Bačeva, T.M. Ostrovnaya

NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS OF BIVALVE MUSSELS USED AS AQUATIC BIOMONITORS IN THE SOUTH AFRICAN ATLANTIC COASTAL WATERS

J. Bezuidenhout, M.V. Frontasyeva, D.F. Pavlov, Z. Goryainova, I. Zinicovscaia, Ntombizikhona Beaulah Ndlovu

INSTRUMENTAL NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS USED TO STUDY HALOGENS IN MACROALGAE FROM THE CRIMEAN COASTLINE OF THE BLACK SEA *A.V. Kravtsova, M.V. Frontasyeva, N.A. Milchakova, L.P. Strelkova* 

NUCLEAR AND RELATED ANALYTICAL TECHNIQUES FOR STUDYING DEPOSITION OF TRACE ELEMENTS IN INDUSTRIALLY CONTAMINATED AREAS: THE KARDZHALI LEAD-ZINC IN BULGARIA

S. Marinova, G. Hristozova, A. Marinov, M.V. Frontasyeva, L.P. Strelkova, Z. Goryainova, A.Yu. Dmitriev, T. Stafilov, K. Baceva, I. Vuckovic

## ELEMENTAL ANALYSIS OF MOSSES AND LICHENS FROM THE WESTERN CAPE PROVINCE (SOUTH AFRICA) DETERMINDED BY ENAA AND ICP-MS – FIRST RESULTS

N.B. Ndlovu, M.V. Frontasyeva, R.T. Newman, P.P. Maleka, R. Botha, I.I. Zinicovscaia

EXPERIMENTAL SETUP FOR INVESTIGATION OF RESONANCE NEUTRON INDUCED FISSION OF  $^{\rm 239}{\rm Pu}$ 

I. Ruskov, Yu.N. Kopatch, V.R. Skoy, V.N. Shvetsov, P.V. Sedyshev, L.B. Pikelner, Ts. Panteleev, S.I. Negovelov, Yu.D. Mareev, Zh.V. Mezentseva

NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS USED TO STUDY BIOSORBTION OF ZINC IN WATER BY SPIRULINA PLATENSIS

I. Zinicovscaia, Gh. Duca, V. Rudic, L. Cepoi, T. Chiriac, M.V. Frontasyeva, S.S. Pavlov, S.F. Gundorina

\* Все экспериментальные отчеты опубликованы в том виде, в котором они представлены авторами.



#### SMALL-ANGLE NEUTRON SCATTERING FROM MAGNETOFERRITIN: CONTRAST VARIATION

#### M.V.Avdeev<sup>a</sup>, V.I.Petrenko<sup>a,b</sup>, L.Melnikova<sup>c</sup>, O.I.Ivankov<sup>a,b</sup>, V.M.Garamus<sup>d</sup>, L.Almasy<sup>e</sup>, Z.Mitroova<sup>c</sup>, P.Kopcansky<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia <sup>b</sup>Kyiv Taras Shevchenko National University, Kyiv, Ukraine <sup>c</sup>Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Kosice, Slovakia <sup>d</sup>Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany <sup>e</sup>Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary

Magnetoferritin is a synthetic biosystem consisting of a magnetic iron core (Fe3O4, Fe2O3) surrounded by a protein shell (apoferritin) dispersed in an aqueous solution. Continually increasing popularity of magnetoferritin in many fields of science could lead to various biomedical applications in the near future (e.g. targeted drug transport, magnetic resonance imaging) [1]. Due to the biological origin of this unique nanomaterial, the problem of toxicity and side effects of magnetic nanoparticles in organs and tissues is minimized. In addition to biocompatibility, another advantage for applications of magnetoferritin is a relatively short time of controlled synthesis, adapted to formation of magnetic (Fe3O4) specifically inside the protein cavity and creation the magnetoferritin molecule. Through regulation of the iron and apoferritin ratio it is possible to prepare homogeneously dispersed magnetoferritin molecules in aqueous solution with different iron content per one molecule of protein (loading factor, LF) [2]. The aim of the work was to study the structure and composition of these magnetic nanoparticles with different loading factor placed in a liquid carrier (water) by small-angle neutron scattering. The scattering curves for magnetoferritin by a hydrogen/deuterium isotopic substitution in the solution are obtained and analyzed using integral

Magnetoferritin with various loading of iron atoms was synthesized in anaerobic conditions at 65 °C and alkaline pH using apoferritin hollow sphere (from Sigma-Aldrich). The synthesis process with some physical-chemical properties is described very well in papers [3-6]. The iron content of all samples was determined spectrophotometrically, exactly. After the synthesis magnetoferritin samples was freeze dried for 24 hours to obtain a powder. Finally, 10 mg/ml solutions of protein were prepared by dissolving powders with accurate ratio of H2O:D2O for contrast variation-SANS method. Mixtures of AMPSO buffer (0.05 M AMPSO buffered with 2 M NaOH to pH 8.6) in the same ratio of H2O:D2O as in the experimental samples, were used as background.

SANS measurements were carried out on small-angle spectrometer YuMO (pulsed reactor IBR-2, FLNP, JINR). Samples during the measurements were located in quartz cuvettes with a thickness of 1 mm at room temperature. The neutrons wavelength range was 0.5-8 Å. Measured scattering curves were corrected for background scattering (AMPSO buffer), and the absolute cross section of neutrons was obtained by vanadium calibration standard.

Small-angle neutrons scattering data for magnetoferritin with loading factor of 160 (LF 160) and 510 (LF 510) in aqueous dispersion with different content of  $D_2O$  in the solvent (0, 20, 60, 70, 80, 100 %) are shown in Fig.1. SANS curves with low loading factor is similar to the data on pure apoferritin aqueous solution. The oscillations which are connected with the scattering by the protein shell is disappeared for high loading factor (fig.1).



**Fig.1.** Experimental SANS curves for magnetoferritin with low (left) and high (rigth) loading factor in water with various ratio of H2O/D2O.

It was obtained that the effective match point is considerably shifted and residual intensity in match point is appeared with increasing of loading factor (fig. 2). It can be associated with the influence of magnetic particles and, as a consequence, a partial destruction of the protein shell.



**Fig.2.** The change in forward scattered intensity  $I_0$  for two samples of magnetoferritin (loading factors LF=160 and LF=510) with varying D<sub>2</sub>O content in the solvent. Effective match points corresponding to minima are indicated by vertical arrows.

#### References

- [1] Uchida, M, et al. Targeting of cancer cells with ferrimagnetic ferritin cage nanoparticles. In J. Am. Chem. Soc. 2006, vol. 128, p. 16626-16633.
- [2] M. J. Martínez-Pérez, et al. Size-dependent properties of magnetoferritin. In Nanotechnology. 2010, vol. 21, p. 465707.
- [3] M. Koralewski, M. Pochylski, Z. Mitroova, M. Timko, P. Kopcansky, L. Melnikova. Magnetic birefringence of natural and synthetic ferritin. In J. Magn. Magn. Mater. 2011, vol. 323, p. 2413-2417.
- [4] M. Koralewski, J. W. Kłos, M. Baranowski, Z. Mitroova, P. Kopcansky, L. Melnikova, M. Okuda, W. Schwarzacher. Faraday effect of natural and artificial ferritins. In Nanotechnology. 2012, vol. 23, p. 355704-355713.
- [5] Z. Mitróová, L. Melníková, J. Kováč, M. Timko, P. Kopčanský. Synthesis and Characterization of Magnetoferritin. In Acta Physica Polonica A. 2012, vol. 121, p. 1318-1320.
- [6] M. T. Klem, M. Young, T. Douglas. Biomimetic magnetic nanoparticles. In Materials today. 2005, vol. 8, p. 28–37.

#### Structural and magnetic size effects in NiO nanopowders

A.M. Balagurov<sup>1</sup>, I.A. Bobrikov<sup>1</sup>, N. Mironova-Ulmane<sup>2</sup>, A. Kuzmin<sup>2</sup>

1) Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia

2) Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

Effect of crystallite size on the crystal and magnetic structures of antiferromagnetic simple oxides such as MnO [1], CoO [2], NiO [3] remains an interesting topic for research. For example, a complex magnetic structure with several sublattices has been observed in NiO nanoparticles [4], in contrast to the bulk NiO, which has a simple two-sublattice structure.

In [4] NiO nanopowders with crystallite sizes of 13 - 100 nm were studied by several methods, including neutron diffraction. However, the neutron experiments were performed on a medium-resolution diffractometer, and data on the actual size of the crystal and magnetic coherent scattering domains were not obtained. As a continuation of these studies, the diffraction patterns of the four NiO samples have been measured at HRFD diffractometer at the IBR-2 pulsed reactor in Dubna. The average crystallite sizes were determined from the BET specific surface area measurements, and were 13 nm, 100 nm, 138 nm and 1500 nm in the samples numbered S16, S18, S19 and S4, respectively.

At high temperatures, in the paramagnetic phase ( $T > T_N = 523$  K) the NiO crystal symmetry is cubic with  $a_c \approx 4.175$  Å. Below  $T_N$  magnetic moments of Ni ordered antiferromagnetically with G-type configuration and a rhombohedral distortion appears:  $a_R \approx a_c/\sqrt{2} \approx 2.952$  Å,  $\alpha \approx 60.07$  ° (space group R-3m, No 166). Rhombohedral magnetic unit cell doubled in all three directions, thus  $a_{mag} = 2a_R = 5.904$  Å. The maximum interplanar distance in this cell is  $d_{111} \approx 4.82$  Å. In the case of NiO the deviation from cubic metric is extremely small (~ 10 times less than in MnO), so it can be observed with a very high-resolution diffractometer only. Fig. 1 illustrates the rhombohedral distortion of the diffraction peaks, as it is seen at HRFD.



Fig.1. Diffraction peaks (200) and (222), measured at HRFD at a resolution level of  $\Delta d/d \approx 0.0013$ . Vertical ticks indicate the peak positions at d = 2.4122 Å and 2.4087 Å, respectively.

In a standard mode of the HRFD operation ( $V_{max} = 4000$  rpm) its resolution is close to  $\Delta d/d \approx 0.0015$  for d = 2 Å, and improves slightly with  $d_{hkl}$  increasing. The existence experience of microstructural effects studying with HRFD shows that at this resolution level a microstrain in the crystallites of about  $\Delta a/a \approx 0.0008$  or more, and the average size of coherent scattering domains with  $L_{coh} \approx 250$  nm or less can be confidently determined.

The diffraction pattern of the S4 sample (1500 nm) is shown in Fig. 2. The pattern quality is good enough, the peaks broadening, compared with the resolution function, is negligible. All the diffraction peaks, measured from all the samples by all HRFD detectors, are consisting with the crystal or magnetic unit cells, i.e. the crystal metric is defined correctly, there are no impurity phases.



Fig. 2. The NiO diffraction pattern of the S4 sample with large crystallites size. Vertical ticks indicate the peak positions for crystal (upper) and magnetic (lower) unit cells.

The spectra processing was carried out by the Rietveld method using the MRIA program, allowing the use of the experimentally measured line shape. The refinement was performed in a limited  $d_{hkl}$  range with independent setting of the crystal and magnetic peaks widths. The convergence of the minimization process for all spectra was good, except the magnetic phase of the S16 sample, for which no definite result was obtained. Examples of processing are shown in Fig. 3.



Fig. 3. The Rietveld refinement for S19 (138 nm, left) and S16 (13 nm, right) samples diffraction patterns, measured at room temperature. Observed experimental points, calculated profile, and difference curve are shown. Ticks indicate positions of crystal (top row) and magnetic (bottom row) peaks.

With the decrease of the crystallite size of the unit cell parameters remain practically constant, while the width of the diffraction peaks increases sharply, which is obviously related to the effect of crystallite size. Moreover, if the width of the S4 structural and magnetic peaks is practically the same, the S18 magnetic peaks are noticeably ( $\approx 3$  times) wider than structural.

Due to the high symmetry of NiO crystal lattice the overlapping of structural and magnetic diffraction peaks, measured in high-resolution mode, is completely absent, and they can be processed independently. To determine the width of the peak (full width at half maximum), its profile analysis was done by using the UPEAK program.

The peak widths of the S4 sample are clearly separated onto two groups (Fig. 4): all magnetic peaks are narrow, whereas the majority of the structural peaks are broadened, except the (hh0) peaks. This broadening is associated with the splitting of the position due to the rhombohedral distortion of the cubic structure. After entering the appropriate amendment the widths of structural and magnetic peaks become the same (Magnetic and Structural corrected lines in Fig. 4), which indicates the same microstructural parameters of the long-range structural and magnetic orders in the sample. The increased slope of the W<sup>2</sup>( $d^2$ ) dependence compared to the resolution function indicates the presence of a small level of microstrain ( $\Delta a/a \approx 0.0012$ ), which is the same for both (the crystal and magnetic) phases.



Fig.4. Width of the diffraction peaks in the NiO sample with large crystallites size. All magnetic peaks (blue crosses) are narrow. Correction for rhombohedral distortion leads to the same width of the crystalline peaks. The  $W^2(d^2)$  dependence obtained with the Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> reference sample (resolution function) is also shown.

In Fig. 5 a similar dependence for the S18 (100 nm) sample is presented. One can see that in this case both - crystal and magnetic - dependences are non-linear, which means that the size effect takes place.



Fig. 5. The W<sup>2</sup>( $d^2$ ) dependences – crystal and magnetic – for in the S18 sample with crystallite sizes of  $L \approx 100$  nm. Nonlinear behaviour indicates the presence of size effect.

Extraction from the widths of the diffraction peaks information about average size of the coherently scattering blocks was performed by two different ways, which gave slightly different results. All the data are presented in Table 1, where the lower and upper limits are shown. The difference between them characterizes uncertainty of the result and we can assume that the true average size of coherent scattering blocks is in this range.

Sample	S4, 1500 nm	S19, 138 nm	S18, 100 nm	S16, 13 nm
$L_{\rm crys}$ , nm	> 380	89 – 123	94 - 102	9.3 - 10.6
$L_{\rm mag}, {\rm nm}$	> 280	101 – 133	37 – 43	

Table 1. Average sizes of coherent scattering blocks for crystal ( $L_{crys}$ ) and magnetic ( $L_{mag}$ ) phases.

The value of the ordered magnetic moment slightly decreases with decreasing crystallite size. The intensity ratio for magnetic and nuclear peaks (-111) and (200) is equal to 0.29, 0.27, and 0.23 for S4, S19, S18 samples, respectively. This is evident from the low-resolution spectra (Fig. 6) as well.



Fig.6. Diffraction patterns measured in low-resolution mode for large  $d_{hkl}$  range. The positions of the magnetic peaks (111) and (-111) is indicated.

Preliminary conclusions can be summarized as follows. Crystal structure and the type of NiO magnetic structure are practically independent of the average crystallite size ranging between 13 - 1500 nm. There is only a small (0.16%) increase in the unit cell volume with decreasing crystallite size to 13 nm. Average size of the coherently scattering crystal and antiferromagnetic domains (crystalline and magnetic coherence length) are large and coincide in the S4 and S19 samples. Size of the crystal domains is close to the size of the crystallites for the S19 sample. For the S18 sample, size of the crystal domains is close to the size of the crystallites, whereas the magnetic coherence length sharply ( $\approx$ 3 times) decreased. In the S16 sample, the long-range magnetic order is largely destroyed.

- 1. I.V. Golosovsky et al., Phys. Rev. B 72 (2005) 144409.
- 2. A.N. Dobrynin et al., Phys. Rev. B 73 (2006) 245416.
- 3. R.H. Kodama, S.A. Makhlouf, A.E. Berkowitz, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 1393.
- 4. N. Mironova-Ulmane et al., Solid State Phenomena 168-169 (2011) 341.

## HYDROGEN BONDED NHO CHAINS FORMED BY CHLORANILIC ACID (CLA) WITH 4,40-DI-T-BUTYL-2,20-BIPYRIDYL (DTBBP) IN THE SOLID STATE

G. Bator<sup>a</sup>, W. Sawka-Dobrowolska<sup>a</sup>, L. Sobczyk<sup>a</sup>, M. Owczarek<sup>a</sup>, A. Pawlukojć<sup>b,c</sup>, E. Grech<sup>d</sup>, J. Nowicka-Scheibe<sup>d</sup>

 <sup>a</sup>Faculty of Chemistry, University of Wroclaw, Joliot – Curie 14, 50-383 Wroclaw, Poland
 <sup>b</sup>Institute of Nuclear Chemistry and Technology, Dorodna 16, 03-195 Warszawa, Poland
 <sup>c</sup>Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 141-980 Dubna, Russia
 <sup>d</sup>Department of Inorganic and Analytical Chemistry, West Pomeranian University of Technology, Szczecin, al Piastów 42, 71-065 Szczecin, Poland

The molecular complexes, containing from one side an electrondonor and from the other side an electron acceptor molecule, deserve a great scientific and technological interest since they may show unexpected novel physical properties [1-10].



The undertaken by us problem seems to be interesting as connected with the discovery of the attractive derivative of dimethyl-2,20-bipyridyl complexed with chloranilic acid (Fig.1). It was found that 5,50-dimethyl-2,20-bipyridyl shows a proton transfer mediated antiferroelectric phase transition at 318 K [11–13]. The mechanism of the transition is quite simple - it is related to the proton jumping along the chain of OHN hydrogen bridges. The detailed studies undertaken with analogous systems, composed by the 4,40- and 6,60-dimethyl-derivatives, did not show such a transition that was connected with a marked elongation of the OHN hydrogen bonds. Nevertheless these complexes are characterized by interesting dielectric properties and dynamics [11]. A different behavior of the 4,40- and 6,60derivatives is caused most probably by the packing in the crystal that affects the hydrogen bond lengths and in consequence the potential for

the proton motion. The shortest H bonds appear just for the 5,50-dimethyl derivative on both sides of bipyridyl. On one side of the molecule we are dealing with the transferred proton,  $N^+-H\cdots O^-$ , while on the other one without proton transfer,  $O-H\cdots N$ . It seems that the t-butyl substituent in the place of the methyl one would affect both the packing and the potential for the proton motion.

A continuous infrared absorption is observed for dtBBP·CLA in the wavenumber range between 3100 and 800 cm-1 also indicating the strong hydrogen bonds. The DSC measurements show a weak, close to continuous, phase transition at 414 K. The complex dielectric permittivity for a single crystal sample was measured in the temperature range 100–440 K and at frequencies between 200 Hz and 2 MHz. The dielectric response is a combination of semiconducting properties and a relaxation process most probably connected with the proton dynamics in the hydrogen bonds.

The total energy optimization and the frequency calculations have been performed based on density functional theory (DFT) using the DMol3 program [14,15] as a part of Materials Studio package. The results have been obtained for the crystalline state within the generalized gradient approximation (GGA) at BLYP (Becke exchange plus Lee–Yang–Parr correlation functional) and PW91 functionals, as well as within LDA (Local Density Approximation) at PWC functional (Perdew–Wang GGA). Calculations have been performed using DNP basis set as implemented in DMol3.

#### Acknowledgments

This work has been supported by the Polish Ministry of Science and Higher Education (Project Register No. N N204 2497 34) and partially by the International Programme JINR DUBNA 04-4-1069-2009/2010.04.29 (decision No. 868/W-JINR DUBNA/2010/0).

The calculations were performed on computers of Wroclaw Center for Networking and Supercomputing, calculating Grant No. 2006/5, and in Interdisciplinary Center for Mathematical and Computational Modeling, Warsaw University, calculating Grant No. G30-15. MATERIALS STUDIO package was used under POLAND COUNTRY-WIDE LICENSE.

#### Appendix A. Supplementary data

Supplementary data associated with this article can be found, in the online version, at doi:10.1016/j.chemphys.2011.10.033.

#### References

[1] M.S. Refat, L.A. El-Zayat, O.Z. Yesilel, Spectrochim. Acta A 75 (2) (2010) 745.

[2] A.S. Al-Attas, M.M. Habeeb, D.S. Al-Raimi, J. Mol. Liq. 148 (2–3) (2009) 58.

[3] J. Seliger, V. Zagar, K. Gotoh, H. Ishida, A. Konnai, D. Amino, T. Asaji, Phys. Chem. Chem. Phys. 11 (13) (2009) 2281.

[4] T. Asaji, Y. Yoshimura, D. Amino, Hyperfine Interact. 179 (1–3) (2007) 1.

[5] A.S. Gaballa, C. Wagner, S.M. Teleb, E.M. Nour, M.A.F. Elmosallamy, G.N.Kaluderovic, H. Schmidt, D. Steinborn, J. Mol. Struct. 876 (1–3) (2008) 301.

[6] T. Murata, Y. Morita, Y. Yakiyama, K. Fukui, H. Yarnochi, G. Saito, K. Nakasuji, J.Am. Chem. Soc. 129 (35) (2007) 10837.

[7] H. Suzuki, H. Mori, J.I. Yamaura, M. Matsuda, H. Tajima, T. Mochida, Chem. Lett.36 (3) (2007) 402.

[8] S. Horiuchi, F. Ishii, R. Kumai, Y. Okimoto, H. Tachibana, H. Nagaosa, Y. Tokura, Nature Mater. 4 (2005) 163.

[9] S. Horiuchi, R. Kumai, Y. Tokura, J. Am. Chem. Soc. 127 (2005) 5010.

[10] M. Amano, Y. Yamamura, M. Sumita, S. Yasazuka, H. Kawaji, T. Atake, K. Saito, J.Chem. Phys. 130 (2009) 034503.

[11] W. Sawka-Dobrowolska, L. Sobczyk, E. Grech, J. Nowicka-Scheibe, A. Pawlukojc', J. Wuttke, J. Baran, G. Bator, M. Owczarek, J. Chem. Phys. 135 (2011) 044509.

[12] M. Prager, A. Pietraszko, L. Sobczyk, A. Pawlukojc<sup>\*</sup>, E. Grech, T. Seydel, A. Wischnewski, M. Zamponi, J. Chem. Phys. 125 (2006) 194525.

[13] M. Prager, W. Sawka-Dobrowolska, L. Sobczyk, A. Pawlukojc´, E. Grech, A. Wischnewski, M. Zamponi, Chem. Phys. 332 (2007) 1.

[14] B. Dalley, J. Chem. Phys. 92 (1990) 508.

[15] B. Dalley, J. Chem. Phys. 113 (2000) 7756.

#### QUASIELASTIC NEUTRON SCATTERING BY LIQUID Na AND Na – H MELT

#### N.M.Blagoveshchenskii, A.G.Novikov, V.V.Savostin, M.S.Shamaev State Scientific Centre –Institute of Physics and Power Engineering, 249020, Obninsk, Kaluga Region, Russia

**1.** The actuality of study of diffusion (and relaxation) characteristics in hydrogen-containing admixtures at sodium-coolant contours of fast nuclear reactors is linked with such a fundamental technological problem as *leakage of steam generators*.

The neutron scattering experiment was held on the DIN-2PI TOF-spectrometer [1] at the one of pulsed reactor IBR-2 beams (Frank Lab.Neutron Physics, JINR). Pure Na measurements were carried out at T = 105, 300, and  $420^{\circ}$  C. Temperature of Na – H melt was T =  $420^{\circ}$  C. The aluminum container has a form of coaxial cylinder 60 mm outer diameter and 6 mm thick. Initial neutron energy was 3.0 meV, providing the resolution of quasielastic peak  $\Delta E \sim 0.15$  M<sub>3</sub>B.

#### 2.1. Pure sodium. The traditional approach

During the primary results development, the raw spectra of scattered neutrons after taking into account the appropriate corrections (neutron flux transmission through the sample and container materials, <sup>3</sup>He detectors efficiency, etc) transformed into the experimental double-differential cross-sections. Then, with help of program code SLOWN [2], the multiphonon, multiple, coherent (with use of Lovesey model [3]), and inelastic incoherent components have been accounted and eliminated to refine the remnant peak of incoherent quasielastic scattering. This peak has been analysed as a lorentian convoluted with resolution function (fig.1) in frames of mixed diffusion phenomenological model [4]:

$$\Delta E (Q^2) = FWHM = \frac{2\hbar}{\tau_0} \cdot \left[ 1 + D_0 Q^2 \tau_0 - \frac{\exp(-Q^2 < u^2 >)}{1 + (D - D_0)Q^2 \tau_0} \right]$$
(1)

where  $\tau_0$  – atom residental time,  $D_0$  – permanent (simultaneously with surroundings) diffusion coefficient; D – total self-diffusion coefficient;  $\exp(-Q^2 \le u^2 \ge)$  – the Debye-Waller factor. The lineshapes of form (1) are depicted in fig.2, where parameters of fitting also shown.

#### 2.2. Pure sodium. The relaxing cage model

According to this model [5], the diffusion act in liquid can be realized only through the condition when the nearest surrounding of atom is decayed or transformed in essential way (slow, or  $\alpha$  - relaxation). In the frames of this approach the intermediate scattering function



*I*(*Q*,*t*) can be written in *stretched exponent* form describing the possible non-exponential decay:

$$I(Q,t) = KWW(t) = \exp\left[-\left(t/\tau_W\right)^{\beta}\right]$$
(2)

$$S_{QE}(Q,\varepsilon) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{0}^{\infty} \exp\left[-\left(t/\tau_{W}\right)^{\beta}\right] * \cos(\varepsilon * t/\hbar) dt$$
(3)

Both the parameters  $\tau_w$  (  $\alpha$  - relaxation time) and  $\beta$  (form parameter), and mean relaxation time,

$$<\tau_{W}>=\int_{0}^{\infty}dtKWW(t)=\frac{\tau_{W}}{\beta}\Gamma(\frac{1}{\beta})$$
(4)

depend on Q. Mean relaxation time  $\langle \tau_W \rangle$  can be expressed by power function:  $\langle \tau_W \rangle = \tau_0 Q^{-\gamma}$ It is interesting to compare  $\langle \tau_W \rangle$  and  $\tau_0$  from previous traditional analysis (fig.3). These values are equal at the same Q's: Q = 0.85Å<sup>-1</sup>, that in spatial (reversal) space correspond to R ~ 7.5Å. This indicates that decay of *second neighbours* must take place in  $\alpha$  - process in liquid sodium.



#### 3. Investigation of sodium – hydrogen melt

During the analysis of experimental spectra of the quasielastic scattering neutrons by the Na – H melt, the effort to extract a second lorentian component with essentially other than of pure sodium FWHM, failed. The quasielastic peak quiet reasonable was described by single lorentian having FWHM just the same that has been found for the pure sodium of appropriate temperature (fig.4). Coinciding diffusion characteristics of sodium and Na – H melt make us possible to suggest that the hydrogen exists in the melt and diffuses possessing the *form of hydride* NaH molecule. Analoguois conclusion has been made by us concerning the behaviour of hydrogen in the Li – H melt previously [6].

#### REFERENCES

1. User Guide. Neutron Experimental Facilities for Condensed Matter Investigations at FLNP JINR. Ed. V. Sikolenko, JINR Press, Dubna, 1997, p. 25

- 2. Новиков А.Г., Лисичкин Ю.В., Фомичев Н.К. Ж. физ. химии, 60 (1986) 2233
- 3. S. Lovesey. Density fluctuations in classical monoatomic liquids. J Phys. C. 4 (1971) 3057
- 4. Оскотский В.С. ФТТ. 5 (1963) 1082
- 5. S-H.Chen, P.Gallo, F.Sciortino, P.Tartaglia. Phys.Rev. E 56 (1997) 4231
- 6. 18. N.M. Blagoveshchenskii, V.A. Morozov, A.G. Novikov et al. J. Phys.: Condens, Matter. 20 (2008) 104201

#### FREQUENCY SPECTRUM OF PURE SODIUM AND HYDROGEN IN Na – H MELT INVESTIGATION

#### N.M.Blagoveshchenskii, A.G.Novikov, V.V.Savostin, M.S.Shamaev State Scientific Centre –Institute of Physics and Power Engineering, 249020, Obninsk, Kaluga Region, Russia

The knowledge of frequency spectrum g(E) is actual for inferring the thermodynamical functions of the liquid, altogether with force characteristics such as force constant  $\langle K \rangle$  etc. The frequency spectrum can be extracted from the one – phonon component of double – differential cross – section (DDCS) studied by inelastic neutron scattering. Here we present the results of g(E) investigation by means of slow neutrons scattering by pure sodium and Na – H melt.

The neutron scattering experiment was held on the DIN-2PI TOF-spectrometer [1] at the one of pulsed reactor IBR-2 beams (Frank Lab.Neutron Physics, JINR). Pure Na measurements were carried out at T = 105 and 420<sup>o</sup> C. Temperature of Na – H melt was T = 420<sup>o</sup> C. The aluminum container has a form of coaxial cylinder 60 mm outer diameter and 6 mm thick. Initial neutron energy was 3.0 meV, providing the resolution of elastic peak  $\Delta E \sim 0.15$  M3B.

The raw spectra of scattered neutrons after taking into account the appropriate corrections (neutron flux transmission through the sample and container materials, <sup>3</sup>He detectors efficiency, etc) transformed into the experimental DDCS. Then, with help of program code SLOWN [2], the multiphonon, multiple, coherent (with use of Lovesey model [3]), have been accounted to extract the one – phonon component of DDCS needed for an estimation of g(E) (Fig.1). Inferring of g(E) for hydrogen atom in the Na – H melt was held using additive model for DDCS of the melt. Note that g(E) of pure Na is somewhat "softened" at T = 420<sup>0</sup> C (2) in comparison with g(E) of Na ,105<sup>0</sup>C(1), while having a high-energy tail. Double-peaked structure (3) is in accord with [4].

The autocorrelative velocity function  $\Psi(t)$  (T=105<sup>o</sup>C) was then estimated by the expression

$$\Psi(t) = \int_{0}^{\infty} g(\omega) \frac{\hbar\omega}{kT} cth(\frac{\hbar\omega}{2kT}) \cos(\omega t) d\omega$$
(1)

and finally, the constant of fast relaxation  $\tau_{\mu}$  has been evaluated equal 0.10±0.01 ps.



REFERENCES

1. User Guide. Neutron Experimental Facilities for Condensed Matter Investigations at FLNP JINR. Ed. V. Sikolenko, JINR Press, Dubna, 1997, p. 25

<sup>2.</sup> Новиков А.Г., Лисичкин Ю.В., Фомичев Н.К. Ж. физ. химии, 60 (1986) 2233

<sup>3.</sup> S. Lovesey. Density fluctuations in classical monoatomic liquids. J Phys. C. 4 (1971) 3057

<sup>4.</sup> D.Colognesi, A.J.Ramirez-Cuesta, M.Zoppi, et al. Physica B350 (2004) e983

#### **IN-SITU NEUTRON DIFFRACTION ANALYSIS OF Li-ION BATTERIES**

# I.A. Bobrikov<sup>*a*</sup>, A.M. Balagurov<sup>*a*</sup>, Chih-Hao Lee<sup>*b*</sup>, Chih-Wei Hu<sup>*b*</sup>, Tsan-Yao Chen<sup>*b*</sup>, Sangaa Deleg<sup>*a*</sup>, D.A. Balagurov<sup>*a*</sup>

#### <sup>a</sup> Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia <sup>b</sup> Dept. Engineering and System Science, National Tsing-Hua Univ., Hsinchu, Taiwan

*In situ* neutron diffraction was applied to study the behavior of the LiFePO<sub>4</sub> and LiFePO<sub>4</sub>·VO<sub>x</sub> based batteries. Three full charge/discharge cycles were realized at room temperature (~17°C) with slow rate. The step-like appearance of several LiC<sub>n</sub> phases was observed and the volume fractions of LiFePO<sub>4</sub> and FePO<sub>4</sub> structural phases at different states of charge were determined.

Lithium iron phosphate (LiFePO<sub>4</sub>), also known as LFP, is a natural mineral of the olivine family. It is a compound used in Li-ion batteries as the cathode and the anode is generally made of carbon. LFP has low cost, good safety characteristic, high thermal and chemical stabilities, and a high theoretical specific capacity. However, the practical use of LFP is highly limited because it has low electronic intrinsic conductivity and poor ionic transport properties that lead to poor rate capability. These obstacles are connected with the specific crystal structure of LFP and researches are trying to modify it properly.

During the past years, doping with supervalent cations [1-4] was suggested to modify LiFePO<sub>4</sub>. In particular, it was found that the doping of a heteroatom (Ti, Zr, V, Nb, and W) could promote the performance of LiFePO<sub>4</sub> at high current due to the enlarged lattice volume that provides more space for Li ion transfer.

In situ neutron diffraction experiments were performed at HRFD TOF-diffractometer (IBR-2 pulsed reactor, JINR) [5] to characterize the entire battery system based on LiFePO<sub>4</sub> and LiFePO<sub>4</sub>·VO<sub>x</sub> (LFPV) electrodes during electrochemical cycling and to find additional information about crystal structure of electrodes. Another purpose of this work was checking possibilities for *in-situ* experiments with real Li-ion batteries at the IBR-2 pulsed reactor.





Fig.1. The Li-ion battery mounted on the HRFD instrument for in-situ measurements (on the left). The 10Ah Li-ion cell with contacting electrodes and clips for electric current (on the right).

Neutron diffraction is useful in the study of components within Li-ion batteries due to the sensitivity to Li positions and occupancies and the large penetration depth that enables bulk analysis of real-life Li-ion batteries. Two flat Li-ion batteries were used as received (Fig. 1). The capacity of the first one with pure LiFePO<sub>4</sub> as cathode material was around 2000 mAh (No1 battery). The capacity of the second battery with LiFePO<sub>4</sub>·0.75%VO was around 10000 mAh (No2 battery). The batteries were wired to a potentiostat-tester (KIKUSUI PFX2011) and lowered into the sample chamber of the HRFD diffractometer.

Throughout neutron diffraction experiments both cells were systematically charged and discharged with 0.1 C rate, where C is full capacity. Three cycles of complete charge/discharge processes were realized at room temperature ( $\sim 17^{\circ}$ C) without any stops except short (10 min) relax time after each charge/discharge cycle. Totally, it took  $\sim 70$  hours for each cell. Diffraction patterns were collected (*in situ*) using the high-intensity mode of HRFD with 10 minutes exposure time. The high-resolution mode was also used (*ex situ*) for receiving more accurate data about structural phases.

To visualize a great number of diffraction patterns a special computer program has been written. Additionally, the conventional phase (and Rietveld) analysis was performed for certain 10 minutes patterns and for the patterns collected *ex situ*. Specifically, the high-resolution mode helped us to show that for ~50% state of charge (SOC) diffraction pattern contains peaks from at least six structural phases: four (FePO<sub>4</sub>, LiFePO<sub>4</sub>, C, LiC<sub>12</sub>) as electrode materials and two (Al, Cu) as current collectors and outside housing.

2D pattern (in *d*-spacing – absolute time coordinates) measured *in situ* during three charge/discharge cycles is shown in Fig. 2. The most intensive lines in *d*-spacing range 3.2 - 3.7 Å (usually called as "anode-window") belong to graphite anode. In the *d*-range 2.2 - 3.2 Å (usually called as "cathode-window") there are several intensive and separated LiFePO<sub>4</sub>/FePO<sub>4</sub> peaks. Both "windows" can be effectively used for determining of correlations between the most important structural phases. The serious problem for proper analysis of diffraction patterns was significant background mainly associated with the hydrogen containing materials (separator and electrolyte). Peaks from thin Al container of the batteries were quite weak and do not influence data processing.



Fig. 2. Evolution of the neutron diffraction patterns from battery  $N_2$  measured during three charge/discharge (~70 hours) cycles. Ticks on the top indicate the calculated peaks positions for three main phases.

The intensity variations of several diffraction lines associating with graphite and LiC<sub>n</sub> phases are shown in Fig. 3. The initial state (fully discharged state, ~0% SOC) is characterized by (002) pure graphite line with  $d_{002} \approx 3.35$  Å. At the end of charge process (100% SOC, 2020 mAh of capacity for the small battery and 10700 mAh for the big one) the LiC<sub>6</sub> phase ( $d_{001} \approx 3.7$  Å) appears. Two intermediate phases – LiC<sub>24</sub> ( $d_{003} \approx 3.47$  Å) and LiC<sub>12</sub> ( $d_{001} \approx 3.52$  Å) – are clearly seen at around 65% SOC, respectively, for both cells.



Fig. 3. Intensity variations of diffraction lines associating with pure graphite and  $LiC_n$  phases depending on absolute time (lower axis) and state of charge (upper axis) for batteries No1 (left) and No2 (right).

The behavior of these diffraction lines is shown with more details in Fig. 4. A gradual shift of the initial line ( $d_{002} \approx 3.35$  Å) to larger *d*-spacings corresponding to continuous intercalation of Li into graphite and stepwise appearing of LiC<sub>24</sub> and LiC<sub>12</sub> structures are clearly seen. Constantly observable stripe with  $d \approx 3.35$  Å indicates that some part of anode is not intercalated. The 3D view of the "anode-window" region is shown in Fig. 5. The step-like appearance of the LiC<sub>6</sub> phase, which likely corresponds to the fully charged anode state, is especially clearly seen for the large (doped with vanadium) battery.

One of the purposes of such type experiments is deriving a phase fraction of LiFePO<sub>4</sub> and FePO<sub>4</sub> as a function of SOC. The full Rietveld refinement of this data set is not possible due to the large number of correlated parameters, low intensity and strong background. However, the LiFePO<sub>4</sub>  $\rightarrow$  FePO<sub>4</sub> conversion process has been already investigated (*ex situ* x-ray) and reported [6, 7]. It was shown that "delithiation" of LiFePO<sub>4</sub> in the charge cycle is following by decomposition of the cathode material onto two phases [6]:

$$LiFePO_4 \rightarrow xFePO_4 + (1 - x)LiFePO_4$$

and *vice versa* during discharging cycle. Thus, in the first approximation, it is possible to use fixed LiFePO<sub>4</sub> and FePO<sub>4</sub> structures and refine only their fraction.



Fig. 4. Enlarged chart of the initial (discharged) state with pure graphite line (1, d = 3.35 Å) and stepwise appearance of LiC<sub>24</sub> (2, d = 3.47 Å), LiC<sub>12</sub> (3, d = 3.52 Å) and LiC<sub>6</sub> (4, d = 3.70 Å) phases for batteries No1 (left) and No2 (right).



Fig. 5. 3D view of the "anode-window" region for all three cycles of charge/discharge processes of batteries  $N_{21}$  (left) and  $N_{22}$  (right). The step-like appearance of the LiC<sub>6</sub> phase is especially clearly seen for the large (doped with vanadium) battery.

Figure 6 shows a typical fit of diffraction pattern corresponding to half charged state (~45% SOC). Altogether, it consists of six phases: graphite, weak peaks from LiFePO<sub>4</sub> and FePO<sub>4</sub> phases, very weak peaks from Cu and Al, Li intercalated graphite phase (the strongest peaks). For 100% SOC the LiC<sub>6</sub> phase was also included in the refinement. The preliminary results of the data processing are listed in the Table 1.



Fig. 6. An example of Rietveld refinement pattern and difference plot (in the bottom) of the neutron diffraction data for the No1 battery at 45% SOC state. Ticks indicate the calculated peaks positions for six phases: FePO<sub>4</sub>, LiFePO<sub>4</sub>, Graphite, Cu, Al, LiC<sub>12</sub> from top to bottom.

Table 1. Volume fraction (in %) of FePO<sub>4</sub> and LiFePO<sub>4</sub> structural phases in both batteries at different SOC values.

SOC, %	Battery №1 (LFP only, C=2Ah)		Battery №2 (LFP + V, C=10Ah)	
	FePO <sub>4</sub>	LiFePO <sub>4</sub>	FePO <sub>4</sub>	LiFePO <sub>4</sub>
0	43(9)	57(5)	37(9)	63(9)
45(5)	66(9)	34(4)	68(8)	31(3)
100	93(13)	7(3)	100(11)	0

In conclusion, *in situ* neutron diffraction was used to show that charge/discharge process of LiFePO<sub>4</sub> based real Li-ion battery can be effectively studied by time-of-flight technique at the IBR-2 pulsed reactor. The important option of the HRFD diffractometer is a possibility to utilize both high-intensity and high-resolution modes without any changes in the geometry of an experiment. The results clearly show that the kinetics of LiC<sub>n</sub> phases appearance and LiFePO<sub>4</sub>  $\leftrightarrow$  FePO<sub>4</sub> transformations are well observable and can be treated quantitatively.

- [1] S.Y. Chung, et al., Nature Mater. 1 (2002) 123 128.
- [2] D. Wang et al., L. Electrochem. Acta 50 (2005) 2955-2958.
- [3] J. Hong et al., Electrochem. Solid State Lett. 12 (2009) A33-A38.
- [4] K.T. Lee et al., J. Power Sources 189 (2009) 435-439.
- [5] A.M. Balagurov, Neutron News 16 (2005) 8-12.
- [6] J. Molenda, M. Molenda "Metal, Ceramic and Polymeric Composites for Various Uses"
- J. Cuppoletti (Ed.), ISBN: 978-953-307-353-8, 2011.
- [7] A.S. Andersson et al., Solid State Ionics 130 (2000) 41-52.

#### Investigation of periodic multilayers

#### Bodnarchuck V.I.<sup>a</sup>, Ignatovich V.K.<sup>a</sup>, Yaradaykin S.P.<sup>a</sup>, Czer L.<sup>b</sup>, Veres T.<sup>b</sup>

#### <sup>a</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia <sup>b</sup> Research Institute for Solid State Physics, Konkoly, Th.u. 29-33, P.O.B. 49, H-1525, Budapest XII, Hungary

#### Introduction

Neutron supermirrors are now used in many physical experiments. They are multilayer systems usually composed as a set of bilayers every one of which consists of two materials with high and low optical potentials. The supermirrors increase the angular or wave length range of total reflection comparing to mirrors consisting of a single material with high optical potential. If the single material gives total reflection for normal component k of the incident neutrons in the range  $0 < k < k_c$ , where  $k_c$  is the limiting wave number for the given material, the supermirror can increase the interval up to  $nk_c$ . A multilayer system that gives reflectivity ~ 1 in the interval  $0 < k < nk_c$  is called Mn mirror. It became a usual practice to fabricate M2 and M3 mirrors. However there are also attempts to produce mirrors with higher n. The last record belongs to Japanese [1] who prepared mirror M6.7.

Last time all the mirrors were prepared in aperiodical fashion, which means that thicknesses of layers in bilayers vary with the bilayer number. The algorithm for thickness variation was proposed by Hayter and Mook [2]. According to this algorithm the change of thicknesses of neighboring bilayers is very small and does not match interatomic distance. It leads to creation of unavoidable roughnesses on layers interface.

There exists also another algorithm proposed in [3], according to which the supermirror is to be produced as a set of periodic chains with some number N of identical bilayers. The variation of thicknesses of neighboring chains in this case is larger, which may help to improve quality of interfaces and therefore of the whole supermirror.

#### Experiment

The goal of the given work is to investigate how well we can control the thickness and quality of periodic multilayer systems. In other words we want to see how well the neutron reflectivity of produced systems match theoretical expectations, how large is diffuse scattering because of technological imperfectness and whether we can explain and control them.

For that purpose we measured at the neutron reflectometer REFLEX at the IBR-2M reactor of 4 samples containing 1, 2, 4 and 8 Ni/Ti bilayers on a boron float glass substrate.

From fitting of measured data to theoretical curves we could find the parameters of samples and resolution of installation. Variation of parameters of samples shows how far the technological conditions are varied from sample to sample. Comparison of angular distribution of the incident beam at the reflectometer and angular distribution of the reflected beam gives information on intensity of diffuse scattering and its dependence on number of bilayers.

In Figure 1 in linear scale are shown the results of fitting experimental data for 2, 4 and 8 periods with the formula [3]:

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{k}) = \int_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{\delta}}^{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{\delta}} \left| \vec{\boldsymbol{R}}_{Ns}(\boldsymbol{p}) \right|^2 \frac{d\boldsymbol{p}}{2\boldsymbol{\delta}} + \boldsymbol{n}_b , \qquad (1)$$

where

$$\vec{R}_{Ns}(p) = \vec{R}_{N}(p) + T_{N}^{2}(p) \frac{r_{s0}(p)}{1 - \bar{R}_{N}(p)r_{s0}(p)}$$
(2)

is the reflection amplitude from a periodic chain of N periods evaporated over a semiinfinite substrate, and the substrate reflection amplitude is

$$r_{so} = \frac{k - k_s}{k + k_s}, k_s = \sqrt{k^2 - u_s}.$$

0,04

0,02 0,03 k , A

Fig. 1. Fitting of the reflectivity data for periodic chains of bilayers evaporated on a thick float glass substrate. The fitting function is given by Eq. (1). The data were obtained at the reflectometer REFLEX at the IBR-2M reactor with single detector. The results are shown in logarithmic scale for a) 2; b) 4; c) 8 bilayers. The solid curves are theoretical curves with parameters found from fitting.

0,02 0,03 k., A<sup>4</sup>

Eq. (1) takes into account the final resolution and possible existence of background, nb, in the system. The resolution  $\delta$  and background  $n_b$  were two fitting parameters. Besides them we took as fitting parameters the real parts of all the potentials  $u_b$ ,  $u_w$ , the potential of substrate  $u_s$  in terms of that of Ni, and thicknesses of Ni and Ti layers in units of  $\lambda_c/2\pi$  of Ni. Imaginary parts of the potentials were put to table ones. The pictures in Fig. 1 show a good fit of all the samples. The values of the  $\chi^2$  are 3.76, 3.24, 15.32 for the samples with N=2, 4, 8 periods respectively. It is especially high in the case of the 8 periods sample. Perhaps, so high value of  $\chi^2$  could be explained by taking into account the off-specular scattering that we not regarded in our model. Unfortunately we cannot measure the off-specular scattering on our samples and the checking of its influence on the fit is a deal of the future experiment.

#### Conclusions

The experiment confirms the rightness of algorithm given in [3] for the samples with few periods. At the same time the experiment clearly shown that achieving of the good agreement between the experimental results and theoretical model is possible with taking into account both the specular and diffuse off-specular reflection on the sample imperfections.

#### References:

- [1] Maruyama R., Yamazaki D., Ebisawa T., Hino M., Soyama K. Development of neutron supermirror with large critical angle. Thin solid films 2007;515:5704-6.
- [2] Hayter J.B., Mook H.A., Discrete Thin-Film Multilayer Design for X-ray and Neutron Supermirrors. J.Appl.Cryst. 1989;22:35-41.
- [3] Carron I., Ignatovich V.K., Algorithm for preparation of multilayer systems with high critical angle of total reflection Phys.Rev. 2003, A67:043610.
- [4] Ignatovich V.K., "Neutron optics." M: Fizmatlit, 2006 (in Russian).
- [5] Steyerl A. Effect of surface roughness on the total reflection and transmission of slow neutrons. Z.Phys. 1972;254:169-88.
- [6] Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff G., Stanley H.B., X-ray and neutron scattering from rough surfaces. Phys.Rev.B 1988;38(4):2297-311.
- [7] Chiarello R., Panella V., Krim J., Thompson C. X-ray reflectivity and adsorption isotherm study of fractal scaling in vapor-deposited films. Phys.Rev.Lett. 1991, 67(24):3408-11.
- [8] Pynn R. Neutron scattering by rough surfaces at grazing incidence. Phys.Rev.B. 1992;45(2):602-12.

0.05

0.04

0,02 0,03

#### APPLICATION OF NEUTRON TRANSMISSION DIFFRACTION FOR MATERIAL STUDIES

#### G.D. Bokuchava<sup>a</sup>, I.V. Papushkin<sup>a</sup>, E.S. Kuzmin<sup>b</sup>

#### <sup>a</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia <sup>b</sup>Dzhelepov Laboratory of Nuclear Problems, JINR, Dubna, Russia

The analysis of precise position and profile of Bragg reflexes is usually used for strain measurement in material. Additionally, Bragg diffraction edges registered in transmission geometry can be applied for the same studies [1, 2]. This method is based on the registration of a decrease of beam intensity transmitted through the sample in dependence on the neutron wavelength. The neutron transmission diffraction method is equivalent to measurements in scattering geometry of powder diffraction with 20=180°. Transmission spectra exhibit Bragg edges (instead of Bragg peaks) when neutrons passing through the limit of  $\lambda \approx 2d_{hkl}$ , below which the particular set of reflection planes (hkl) begin to scatter neutrons. This means that no angular dependence of scattering is measured but only the integrated intensity of this particular reflection can be determined from the transmitted beam for each value of  $\lambda$ . The final resolution width obtained in a diffraction experiment consists of two different contributions, the geometrical width and time width. It is well known that the geometrical contribution is minimized as the Bragg angle is 90°, which is the case for transmission geometry and which means that the resolution is effectively decoupled from the divergence of the primary beam. A next advantage of this geometry is that no contribution to the resolution is due to the size and the shape of the sample. Thus in case of transmission experiment the geometrical contribution is close to zero and final resolution is determined only by time contribution. Additionally high count rates permits very good statistical accuracy. Using timeof-flight method one can observe multiple Bragg edges. These advantages of transmission experiment make it very attractive for non-destructive studies of various materials. It should be mentioned that it is rather difficult to use neutron transmission method for usual strain measurement since in such experiment no angular dependence of scattering is measured which is vital for strain scanning. However this technique can be used for precise lattice parameter measurements (averaged on all neutron scattering vector orientations), normal strain component measurements, in  $\sin^2 \Psi$ experiments, broadening effect studies, etc.

Currently the neutron transmission method is used in TOF mode at the pulsed neutron sources [3, 4] as well as at steady state reactors [5, 6]. First attempt to utilize neutron transmission diffraction using RTOF method (kind of correlation technique) was made at Fourier diffractometer MINI-SFINKS in Gatchina [7]. In this experiment obtained data statistics was limited due to using low performance detector which caused difficulties in further data processing. Later in 1997 a short single experiment for test purposes was performed at the HRFD Fourier diffractometer (Dubna) with Be sample (40x40x40 mm<sup>3</sup>, hexagonal structure) [8]. The result of this experiment was quite promising, measured spectrum exhibited high statistics and good resolution. This was first successful attempt to measure transmission diffraction spectra on a diffractometer with Fourier chopper using RTOF method.

Recently this activity was resumed on FSD diffractometer in addition to usual diffraction measurements. To this end the prototype transmission Li<sup>6</sup>-based detector with 10x35 mm aperture was manufactured and tested with Be sample (Fig. 1). The least square fit of experimental data using rather simple model based on error function gives quite satisfactory results (Fig. 2). Additionally the austenitic steel sample with 2 weld beads was investigated using backscattering  $(2\theta=140^\circ)$  and transmission  $(2\theta=180^\circ)$  neutron detectors simultaneously (Fig. 3). Sample dimensions were 25(thickness)x70(height)x80(length) mm. Composition of sample material was the following: base material - 08X18H10T austenitic steel (%): C - 0.08, Si - 0.8, Mn - 2.0, Cr - 18, Ni - 10, Ti - 0.7, S - 0.02, P - 0.035, Fe - rest; weld filler material (%): Ni - 70, Cr - 20, Nb - 10. The sample was scanned across weld line with 3x24 mm incident neutron beam size. The typical
transmission spectrum is shown in Fig. 5. Since the lattice parameters for base and weld filler material differ significantly the peak separation in near weld region can be easily observed (Fig. 4 and Fig. 6). Thus, as a result of this experiment it was shown that neutron transmission spectra can be readily registered on RTOF diffractometer using Fourier chopper. The location of Bragg edges can be determined with sufficient accuracy for crystal structure identification as well as for lattice parameter and strain measurement.



Fig. 1. Prototype of neutron transmission Fig. 2. Least square fit of (102) Bragg edge for detector installed on FSD diffractometer.



Fig. 3. Studied sample with 2 weld beads on FSD. Fig. 4. A part of neutron diffraction pattern



**TOF** channels

Be sample.



containing (111) reflections for both materials as a function of x coordinate across the weld.



Fig. 5. Neutron transmission spectrum from austenitic steel sample with 2 weld beads measured on FSD diffractometer.



Fig. 6. Neutron backscattering (left) and transmission (right) diffraction spectra regions near (111) Bragg reflection/edge.

#### References

- D.Q. Wang, J.R. Santisteban, L. Edwards, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 460 (2001) 381-390.
- [2] J.R. Santisteban, L. Edwards, M.E. Fitzpatrick, A. Steuwer et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 481 (2002) 765-768.
- [3] H.-G. Priesmeyer, J. Larsen and K. Meggers, J. of Neutron Research, 1986, vol. 2, No. 1, pp. 31-52.
- [4] A. Steuwer, P.J. Withers, J.R. Santisteban et al., Phys. stat. sol. (a) 185, No. 2, 221–230 (2001).
- [5] P. Strunz, P. Lukáš, P. Mikula et al., *Proc. of the 5th Int. Conf. on Residual Stresses*, Linköping, Sweden, 1997, pp. 688-693.
- [6] M. Strobl, R. Woracek, N. Kardjilov et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 680 (2012) 27–34.
- [7] P. Hiismaky, A. Tiita, V.G. Muratov et al., Preprint N 1956 of PNPI, Gatchina, 1994.
- [8] G.D. Bokuchava, Unpublished report, FLNP JINR, 1997.

# MICROSTRAIN STUDIES IN FERRITE-MARTENSITE STEEL USING TOF NEUTRON DIFFRACTION

#### G.D. Bokuchava, V.V. Sumin, I.V. Papushkin

#### Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

Heat-resistant pipeline components (elements of steam and boiler superheaters, turbines, blades, etc.) of thermal power plants operating in the creep range at temperatures up to 650 °C are often made from tempered ferrite-martensite steels with approx. 10 %wt chromium content. Therefore, it is important to improve their thermal efficiency and mechanical properties. The heat treatment of tempered ferrite-martensite steels usually consists of two stages: austenization and tempering. It is well known that chromium in steels delays the formation of carbides, and that martensite phase forms in such steels after slow air cooling. Ferrite-martensite steels have a complex microstructure which consists of fine micro grains separated by different kinds of interfaces (austenite grain boundaries, block boundaries and twin boundaries) and carbides which are precipitated near these boundaries. Additionally, these steels exhibit a very high dislocation density after heat treatment. Dislocations are produced in the parent phase during the martensitic transformation due to the associated martensite shear. As it well known from literature the dislocation density strongly drops in the early stages of tempering and then gradually further decreases with further aging. Ferrite-martensite steels with high dislocation densities exhibit specific mechanical properties. Thus they show cyclic softening when exposed to strain controlled fatigue testing and a strong decrease of creep rate during primary creep. The decrease of the high dislocation density in such material during tempering and creep accounts for the formation of subgrain boundaries that represent a dominant feature of ferrite-martensite steel microstructures.

Using time of flight neutron diffraction it is possible to estimate *in situ* microstress and coherent domain size in material from diffraction peak broadening and their changes with temperature and external load. Both mentioned phenomena are closely related to the dislocation structure inside the grain of polycrystalline materials. The obtained information will be useful for better understanding of the heat-resistant properties of investigated steels, as well as high embrittlement at low and high temperatures. This approach will give a possibility to optimize thermomechanical treatment of the steels to improve their properties.

Current study was devoted to investigation of microstrain and structure dependence of 10H9K3V2MFBR ferrite-martensite steel (Russ. grading) in wide range of tempering temperature on FSD diffractometer at the IBR-2 pulsed reactor. This steel revealed good results in the long-term heat resistance which is by about 10% as compared with the previously developed steels of this type. This gives hope for its use in thermal power units at supercritical conditions (P = 30 MPa and T = 620 ° C). The studied steel has the following chemical composition: 0.1% C, 9.36% Cr, 2.93% Co, 1.85% W, 0.45% Mo, 0.2% V, 0.05% Nb, 0.048% N, 0.005% B, the rest - Fe). The samples were normalized at 1050 °C and tempered for 3 hours at temperature of 750 °C.

The experiments performed on FSD diffractometer have shown significant diffraction peak broadening in comparison with reference sample (Fig. 1). Detailed analysis of peak widths revealed anisotropic character of peak broadening at which some reflection (especially (200) and (310)) deviate from linearity. This deviation is usually associated with the dislocation contrast factor variation, repeatedly has been observed previously in the literature as well as in neutron experiments on FSD. The anisotropic peak broadening effect observed on FSD is expressed quite strongly and can be readily registered due to quite good instrument resolution. For correct microstrain evaluation this peak width anisotropy should be taken into account during fitting procedure which can be done using the model proposed in [1] (Fig. 2 and Fig. 3, left). Additionally, the lattice parameter dependence vs. temperature allowed estimating the of linear expansion coefficient of the material, which has a value typical for this class of steels (Fig. 3, right).

[1] T. Ungar et al. // J. Appl. Cryst. 1999. V. 32. P. 992-1002.



Fig. 1. Comparison of squared peak width  $(\Delta d)^2$  dependence vs. squared interplanar spacing  $d^2$  (left) and the resolution function (right) for standard sample and for the ferrite-martensite steel sample tempered at 200 °C.



Fig. 2. Fitting of anisotropic peak broadening: comparison of squared peak width  $(\Delta d)^2$  dependence vs. (A+B· $\Gamma_{hkl}$ )· $d^2$  (left) and squared interplanar spacing  $d^2$  (right) for the tempered ferrite-martensite steel sample.



Fig. 3. <u>Left:</u> Lattice microstrain dependence vs. tempering temperature for both sample series. <u>Right:</u> Lattice parameter dependence vs. temperature for studied steel.

## The changes in magnetic structure of TbCo<sub>2</sub> at high pressure

E.Burzo<sup>1,2)</sup>, P.Vlaic<sup>1)</sup>, D.P.Kozlenko<sup>3)</sup>, S.E.Kichanov<sup>3)</sup>, N.T. Dang<sup>3)</sup>, E.V.Lukin<sup>3)</sup>, B.N.Savenko<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> Faculty of Physics, Babes-Bolyai University, Cluj-Napoca 400084

<sup>2)</sup> Romanian Academy of Science, Cluj-Napoca Branch, Cluj-Napoca 400015

<sup>3)</sup> Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980, 141980 Dubna Moscow Reg., Russia

The magnetic properties of RCo<sub>2</sub> compounds, where R is a rare-earth or yttrium were intensively studied by means of experimental and theoretical methods due these systems show very interesting magnetic properties [1, 2]. The RCo<sub>2</sub> compounds are ferrimagnetically ordered. The magnetic moments of cobalt in the above compounds are  $M_{Co} \cong 1 \mu_B$ . When R=Y or a nonmagnetic rare-earth Lu and in low temperatures region the magnetic susceptibilities of those compound follows a T<sup>2</sup> dependence but at temperatures higher 500-600 K, a Curie-Weiss type behavior was evidenced. In field of  $\cong$  70 T, at 4.2 K, there is a transition of cobalt from paramagnetic to ferromagnetic state. It was known, that the Curie temperatures of the above compounds are sensitive to pressure. In particular, the band structure calculations of TbCo<sub>2</sub> showed that the cobalt moments decreases at high pressures.



**Fig. 1.** Neutron diffraction patterns of  $TbCo_2$  was measured at ambient pressure and high pressure P = 4.1 GPa and temperatures T = 10 and 290 K. The experimental points, the calculated profile by Rietveld method are shown. The vertical bars are the calculated positions of the nuclear peaks of the  $R\overline{3}m$  phase. The most intense ferrimagnetic peaks are marked as FM. In left part the temperature dependences of magnetic moments of Tb and Co for  $TbCo_2$  at different pressures are shown. The solid lines are fitting of data by Brillouin functions.

In order to obtaining additional information about cobalt magnetism in RCo<sub>2</sub> compounds, neutron diffraction studies were performed on DN-12 diffractometer [3] at IBR-2 pulse reactor with TbCo<sub>2</sub> compound at pressure up to P = 4.1 GPa and in temperature range 10-300 K.

The neutron diffraction data of TbCo<sub>2</sub> obtained at different pressures and temperatures are shown at Fig.1. The crystal structure of TbCo<sub>2</sub> is rhombohedral with R $\overline{3}$ m space group below Curie temperature T<sub>c</sub>=228 K. The magnetic ordering of this compound is ferrimagnetic. At high pressure the magnetic moment of Co ions decreases substantially from 1.1 to 0.6  $\mu_B$  but the Tb ions moment is not affected by pressure. The temperature dependences of the terbium and cobalt moments determined at pressures P=0, 1.6 and 4.1 GPa are shown in Fig.1. The experimental data were fitted by Brillouin function with J=6 for Tb and S=½ for Co ions. The Curie temperature decreases with a large negative pressure coefficient dT<sub>C</sub>/dP = -8 K/GPa. The data extrapolation for the baric dependences of cobalt moments suggests that at critical pressure P<sub>c</sub>≈12 GPa the cobalt ions becomes non-magnetic. The experimental data were supported by band structure calculations and calculation in frame of spin fluctuations model [4].

- [1]. E.Burzo, R.Tetean, Zs. Sarkozi, L.Chioncel, M.Neumann and O.Garlea, J.Magn.Magn.Mater. 242-245 (2002) 836
- [2]. L.Chioncel, E.Burzo, R.Tetean and V.Pop, Mol. Cryst. Liquid Cryst. 417 (2004) 513
- [3]. V.L.Aksenov, A.M.Balagurov, V.P.Glazkov, D.P.Kozlenko, I.V.Naumov, B.N.Savenko, D.V.Sheptykov, V.A.Somenkov, A.P.Bulkin, V.A.Kudryashev and V.A.Trounov, Physica B265 (1999) 258
- [4]. E. Burzo, P. Vlaic, D.P. Kozlenko, S.E. Kichanov, N.T. Dang, E.V. Lukin, B.N.Savenko Journal of Alloys and Compounds, In press (2012).

# THE SANS STUDY OF THE UNBINDING TRANSITION OF LIPID MEMBRANES AT LOW CONCENTRATION OF Ca<sup>2+</sup> IONS

Yu.E.Gorshkova<sup>a</sup>, A.I.Kuklin<sup>a, b</sup>, V.I.Gordeliy<sup>a,b,c,d</sup>

<sup>a</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia <sup>b</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudnyi, Moscow region, Russia <sup>c</sup> Institute of Structural Biology J.P. Ebel, Grenoble, France <sup>d</sup> Research Centre Jülich, Jülich, Germany

Calcium ions have a special place in the biological processes [1]. They regulate important physiological and biochemical processes in the body. Calcium ions are involved in blood clotting, as well as providing a constant osmotic pressure of blood. Calcium ions are one of the universal second messengers and regulate a variety of intracellular processes - muscle contraction, exocytosis, including the secretion of hormones, neurotransmitters, etc. [2-5]. This is the reason for the intensive study of the influence of calcium ions on the structure and functioning of cells, including biological membranes. One of the directions of these studies is determine the affect of calcium on the structure and interactions of lipid membranes, which are the basic structural element of the membranes. Of particular interest is the interaction of Ca with lipid membranes and its influence on the membrane interactions. For this purpose the multilayer membranes are used

Earlier have been shown that, even at quite small concentrations of CaCl<sub>2</sub> (about a few mM) multilayer membranes have a sharp transition from the bound to the unbound state [6Ошибка! Закладка не определена.-8]. The prediction of the phenomenon is of great interest to statistical physics membranes, but the detailed character of this transition in excess water has never been studied.

We investigated in a details the influence of CaCl<sub>2</sub> (electrostatic repulsion) on the structure and interaction of the membrane in the ripple and liquid phases by small-angle neutron scattering.

Our studies have shown that unbinding transition take place in the ripple and liquidcrystalline phases. The results indicate the continuous (not sharp) behavior of the transition (Fig.1).

Analysis of the small-angle scattering curves for multilayer DMPC (1% wt) membranes showed that the destruction of the lamellar structure and the formation of single vesicles occur at  $C_{Ca^{2+}} \sim 0.3$  mM in  $P_{\beta'}$  phase and at  $C_{Ca^{2+}} \sim 0.4$  mM in  $L_{\alpha}$  phase. The ripple phase at T = 15 °C disappears faster than the unbinding transition is occurs.



Fig.1. Scattering curves for the multilamellar DMPC membranes (1% wt) in water/CaCl<sub>2</sub> solutions with Ca<sup>2+</sup> ions concentrations  $C_{Ca^{2+}} = (\blacksquare) \ 0, (\bullet) \ 0.2, (\blacktriangle) \ 0.3, (\checkmark) \ 0.5, (\diamond) \ 0.7$  and (★) 1.0 mM at the temperature T = 15 °C (left) and T = 55 °C (right).

It was shown that the value  $C_{Ca^{2+}}$  depends on the phase state of the investigated system as well as on the degree of hydration of the phospholipids.

A detailed analysis of the diffraction peaks allowed to specify the critical values of the Ca<sup>2+</sup> concentration required for the transition of the system from a bound state to unbound: in ripple phase  $C_{ca^{2+}} = 0.29$  mM for DMPC (0.5 % wt) and 0.33 mM for DMPC (1.0 % wt), in liquid-crystalline phase  $C_{ca^{2+}} = 0.33$  mM for DMPC (0.5 % wt) and 0.4 mM for DMPC (1.0 % wt).

It was shown that decrease in lipid concentration does not affect the repeat distance of the lipid membranes in the pre-transition range.

The thickness of the lipid bilayers spontaneously forming from multilayer membranes is equal to the thickness of the vesicles prepared by extrusion in the unbound transition region (Fig.2). It means that we observe a formation of unlamellar vesicles after destruction of lamellar phase of multilayer DMPC membranes in the ripple and liquid-crystalline phases. Further addition of calcium ions leads to a partial fusion of single vesicles, as indicated by the difference in the  $d_{b(v)}$  and  $d_{b(m)}$  thickness values. Moreover, the number of aggregated particles in the liquid-crystalline phase is smaller than in the ripple phase. This process is quite sharp in the  $L_{\alpha}$  phase and is continuous (0.3 mM  $\leq C_{ca^{2+}} \leq 2$  mM) in the  $P_{\beta'}$  phase.



Fig.2. Dependences of the lipid bilayer thickness  $d_b$  on the Ca<sup>2+</sup> ions concentration for the DMPC (1% wt) multilamellar membranes in the CaCl<sub>2</sub>/D<sub>2</sub>O solution in the ripple (T = 15 °*C*) (vesicles ( $\blacksquare$ ) from multillayers, ( $\blacktriangle$ ) prepared by extrusion) and liquid-crystalline (T = 55 °*C*) (vesicles ( $\bullet$ ) from multillayers, ( $\checkmark$ ) prepared by extrusion) phases.

- 1. R. Gennis, Biomembrane. Molecular structure and function, Publisher "Peace" (1997)
- 2. H.C. Lee, R. Aarhus and T.F. Walseth, Calcium mobilization by dual receptors during fertilization of sea urchin eggs, *Science* 261 (1993), 352–355.
- 3. M. Berridge, P. Lipp and M. Bootman, Calcium Signalling, Curr. Biology 9 (1999), R157-159.
- 4. O.H. Petersen, M. Michalak and A. Verkhratsky, Calcium signalling: Past, present and future, *Cell Calcium* 38 (2005), 161–169.
- 5. Izraelachvili, J.N., and H. Wennerstrom. 1992. Entropic forces between amphiphilic surfaces in liquids. J. Phys. Chem. 96: 520-531.
- 6. A.G. Lee, How lipids affect the activities of integral membrane proteins, *Biochim. Biophys. Acta* 1666 (2004), 62–87.
- Yamada, N. L., H. Seto, T. Takeda, M. Naga, Y. Kawabata, and K. Inoue. 2005. SAXS, SANS and NSE studies on "unbound state" in DPPC/water/CaCl2 system. J. Phys. Soc. Jpn. 74:2853– 2859.
- 8. Uhríková D, Kučerka N, Teixeira J, Gordeliy V and Balgavý P 2008 Chem. Phys. Lipids 155 80

# STRUCTURE OF NANODIAMOND CLUSTERS IN AQUEOUS DISPERSIONS BY SMALL-ANGLE NEUTRON SCATTERING

## M.V.Korobov<sup>a</sup>, D.N.Volkov<sup>a</sup>, L.A.Belyaeva<sup>a</sup>, M.A.Proskurnin<sup>a</sup>, M.V.Avdeev<sup>b</sup>, O.V.Tomchuk<sup>b,c</sup>, V.L.Aksenov<sup>d,b</sup>, A.V.Rogachev<sup>b</sup>

## <sup>a</sup>Department of Chemistry, Moscow State University, 119899, Moscow, Russia <sup>b</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia <sup>c</sup>Kyiv Taras Shevchenko National University, Kyiv, Ukraine <sup>d</sup>Petersburg Nuclear Physics Institute, NRC "Kurchatov Institute", Gatchina, Russia

Recently, detonation nanodiamond particles have attracted increasing attention as a promising nanomaterial for its biocompatility, ability to cross the cell membrane, easy functionalization and conjugation with biomolecules. Compared to other carbon nanomaterials nanodiamonds (NDs) are less toxic. NDs are mainly used as markers for cell imaging, using its fluorescence or Raman signals for detection, as MRI agents and as carriers for drug delivery. For the success of these applications stable in time aqueous dispersions of ND have to be prepared. Also important are size/structure of ND clusters, formed in the aqueous dispersions. Some useful properties of the dispersions are size dependent. It was found that the activity of lysozyme adsorbed on ND clusters depends on cluster's size. The uptake of NDs in lungs and spleen is lower for the small clusters compared to the large ones and etc. [1-8].

ND materials are composed of primary particles (diameter 4–5 nm). This characteristic size is determined by specific conditions (temperature, pressure, time) of detonation. In cheap aggregated ND materials primary particles are bound by multitudes of C–C covalent bonds with neighboring particles to form huge clusters (>100 nm). In more advanced disaggregated ND (DND) materials inter-particle bonds are broken either chemically or mechanically, though spontaneous aggregation due to van-der-Waals interactions take place.

Various forms of NDs (dry powders or flakes, aqueous gels, dispersions) were carefully studied and characterized by different experimental methods. The most valuable characteristics are size and structure of the primary ND particles (x-ray, HRTEM, NMR and etc), chemical identity of the surface groups (IR), size of the clusters in the dispersions (DLS, SANS).

We put forward a new experimental procedure to make almost monodispersed DND material and to adjust the size of the clusters in the dispersion. The procedure is based on stepwise separation of the commercial DND samples by cetrifugation accompanied by careful DSC analysis at each step. The parameters of aqueous dispersions produced (minimum size, size distribution, stability) are better than for any commercial samples available so far and/or for the samples reported in the literature.

SANS measurements were carried out for two commercial DND dispersions on small-angle spectrometer YuMO (pulsed reactor IBR-2, FLNP, JINR). Samples during the measurements were located in quartz cuvettes with a thickness of 1 mm at room temperature. The neutrons wavelength range was 0.5-8 Å. Measured scattering curves were corrected for background scattering, and the absolute cross section of neutrons was obtained by vanadium calibration standard.

The obtained principal scattering curves are shown in Figs.1,2. They show the scattering from the clusters. For RUDDM dispersion in Fig.1 the fractal type organization of the clusters can be concluded. The corresponding fractal dimension, as follows from the power-low scattering at small q-values, is close D = 2.45, which was detected in the previous experiments with the nanodiamond suspensions of other producers [9]. The characteristic cluster size is above 120 nm. The change in the SANS curves with the contrast variation points strongly to the homogeneous structure of the clusters at the level of above 10 nm. The scattering intensity in the interval of 0.07- $0.01 \text{ nm}^{-1}$  as a function of the D<sub>2</sub>O content gives the match point of 160 % of D<sub>2</sub>O, which

corresponds to the mean scattering length density (SLD) of the clusters of  $10.5 \times 10^{10}$  cm<sup>-2</sup>. This value coincides with that obtained for other nanodiamond suspensions [9], where the volume fraction of non-diamond component (graphene) in the dispersed particles was estimated to be 30% and corresponded to graphene shell 0.5 nm thick around diamond crystallites.





**Fig.1.** Commercial aqueous RUDDM dispersion, 2 wt.%. SANS contrast variation.

**Fig.2.** Commercial SDND dispersion in  $H_2O$ . SANS curves for different concentrations. Solid line shows the curve for 5 mg/ml renormalized for 100 mg/ml.

For SDND dispersion one can see (Fig.2) that the size of clusters in solution is significantly less with estimates of below 20 nm. At the same time, the concentrated solutions of this kind of DND dispersions show high stability, thus allowing one to follow the concentration dependence of the scattering. The structure-factor effect is clearly seen, which reflects the hard-sphere repulsion type up to the highest concentration of nanodiamond particles in the solution. This differs the given system from the previously studied DND dispersions [9], where the interpenetration of the developed clusters was observed for the concentrated solutions.

#### References

- [1] Williams O.A., Hees J., Dieker C.; Jager W.; Kirste L., Nebel C.E. Size dependent Reactivity of Diamond Nanoparticles, ACS NANO, 4(8) 4824-4829, 2010.
- [2] Chen M., Zhang X-Q, Man H.B., Lam R., Edward K. Chow E.K., Dean Ho, Nanodiamond Vectors Functionalized with Polyethylenimine for siRNA Delivery, J. Phys. Chem. Lett., 1, 3167–3171, 2010.
- [3] Chen M.; Pierstorff E.D.; Lam R.; Li S.Y.; Huang H.; Osawa E.; Ho D. Nanodiamond-Mediated Delivery of Water-Insoluble Therapeutics, ACS NANO, 3, 2016-2022. 2009.
- [4] Xing Y., Xiong W., Zhu L., Osawa E., Hussin S., DaiZhang L., DNA Damage in Embryonic Stem Cells Caused by Nanodiamonds, ACS Nano, 5(3), 2376-2384,2011.
- [5] Lisa M. Manus L.M., Mastarone D.J., Waters E.A., Zhang X., Mastarone D.J., Waters E.A., Schultz-Sikma E.A., MacRenaris K.W., Ho D., Thomas J. Meade T.J, Gd(III)-Nanodiamond Conjugates for MRI Contrast Enhancement, Nano Letters, 10(2), 484–489, 2010.
- [6] Rojas S., Juan D. Gispert J.D., Marti 'n R., Abad S., Menchon, C. Pareto D., Vi'ctor V.M., Alvaro M., Garci 'a H., Herance J. R, Biodistribution of Amino-Functionalized Diamond Nanoparticles. In Vivo Studies Based on 18-F Radionuclide Emission. ACS NANO, 5(7), 5552-5559, 2010.
- [7] Tisler J., Reuter R., La A., Jelezko F., Balasubramanian G., Hemmer R.P., Reinhard F., Wrachtrup J. Highly Effcient FRET from a Single Nitrogen-Vacancy Center in Nanodiamonds to a Single Organic Molecule. ACS NANO, 5(10), 7893-7898, 2011.
- [8] Perevedentseva E., Cai P-J, Chiu Y.-C., Cheng C.-L., Characterizing Protein Activities on the Lysozyme and Nanodiamond Complex Prepared for Bio Applications, Langmur, 27(3), 1085–1091, 2011.
- [9] Avdeev M.V., Rozhkova N.N., Aksenov V.L., Garamus V.M., Willumeit R., Osawa E., J. Phys. Chem. C 113 (2009) 9473–9479.

# INVESTIGATION OF AMORPHOUS MAGNETIC WIRE USING POLARIZED NEUTRON MICROBEAM

S.V. Kozhevnikov<sup>a</sup>, F. Ott<sup>bc</sup>, A. Thiaville<sup>d</sup>, J. Torrejón<sup>d</sup>, M. Vázquez<sup>e</sup>

<sup>a</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, 141980 Dubna Moscow Region, Russian Federation <sup>b</sup>CEA, IRAMIS, Laboratoire Léon Brillouin, F-91191 Gif sur Yvette, France <sup>c</sup>CNRS, IRAMIS, Laboratoire Léon Brillouin, F-91191 Gif sur Yvette, France <sup>d</sup>Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-sud, CNRS, UMR 8502, F-91405 Orsay, France

## <sup>e</sup>Instituto de Ciencia Materiales, CSIC, 28049 Madrid, Spain

Neutron scattering is powerful method for the investigation of magnetism and soft matter but information about the investigated objects is averaged over the neutron beam width of 0.1-10 mm. To increase the spatial resolution of the neutron beam for the investigation of microstructures, focusing devices are developed (refractive lenses, bent crystals, etc.). These devices produce microbeams of width of more than 50  $\mu$ m. Planar waveguides [1] can produce a neutron microbeam of 0.1-10  $\mu$ m width.

We carried out several experiment on the NREX reflectometer investigating different types of waveguides. In the article [2] we demonstrated a polarized neutron microbeam. Polarizing magnetic waveguide Fe/Cu/Fe and non-polarizing structure FeNi/Al/FeNi were used. In [3] the polarizing waveguide Fe/Co/Fe was investigated experimentally. In the article [4] we proposed the idea of a waveguide as polarizer and spin-flipper for microbeams. In [5] we demonstrated experimentally the combination of a polarized incident beam and nonmagnetic waveguide CuNi/Cu/CuNi. This waveguide structure was investigated more detailed in [6]. From the analysis of different types of waveguides we conclude that the combination of polarized neutron reflectometer with a nonmagnetic waveguide is suitable for the investigation of magnetic microstructures.

We applied this configuration for the investigation of the amorphous magnetic microwire  $(Co_{0.94}Fe_{0.06})_{72.5}Si_{12.5}B_{15}$  containing a compact core with axial magnetic domains and a wide shell with circular ones [7]. This type of wire is interesting for practical applications and for physics of micromagnetism. The experiment was carried out on the polarized neutron reflectometer PRISM with vertical film plane (reactor ORPHEE, LLB, Saclay, France) [6]. The fixed wavelength 4.0 Å (7 % FWHM) and incident angular divergence  $0.04^{\circ}$  were used. The wire of 190 µm diameter was oriented vertically along the microbeam of 2.6 µm width and placed at 1 mm from the waveguide edge (see Fig. 1). The microbeam was fixed and the scan was done by micrometric translation of the wire across the beam (Fig. 2a). The spin-dependent intensity of the transmitted microbeam was measured. The method of neutron spin-precession was used. When a magnetic field is applied parallel to the wire axis, the spin-flipped intensity '-+' is small (Fig. 2b). The width of the '++' intensity minimum of about 200 µm corresponds of the wire width. In the case of a perpendicular applied field (Fig. 2c), the spin-flipped intensity '-+' increases and consists some oscillation on the curve. The time of measurement of one curve is about 5-10 hours.

Thus, our results can be used for the development of neutron sonde microscopy, a new method of the investigation of one-dimensional magnetic microstructures (wires, ripple domains, lithographic lattices, vortices in superconductors) with high spatial resolution.

<sup>[1]</sup> F. Pfeiffer, V. Leiner, P. Høghøj, and I. Anderson, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 055507.

<sup>[2]</sup> S.V. Kozhevnikov, A. Rühm, F. Ott, N. K. Pleshanov, J. Major, Physica B 406 (2011) 2463-2466.

<sup>[3]</sup> S. Kozhevnikov, T. Keller, Yu. Khaydukov, F. Ott, A. Rühm, J. Major, *Polarizing Fe-Co-Fe planar waveguides for the production of neutron microbeams*, Physics Procedia (2013), submitted.

[4] A. Rühm, S.V. Kozhevnikov, F. Ott, F. Radu, J. Major, *Magnetic planar waveguides as combined polarizers and spin-flippers for neutron microbeams*, Nucl. Instrum. and Meth. A (2013). http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2012.12.116

[5] S.V. Kozhevnikov, A. Rühm, J. Major, Crystallography Reports 56 (2011) 1207-1211.

[6] S.V. Kozhevnikov, T. Keller, Yu.N. Khaydukov, F. Ott, A. Rühm, A. Thiaville, J. Torrejón, M. Vázquez, J. Major, *Use of waveguides for polarized neutron studies at the micrometric scale*, arXiv: 1209.3889 (2012). http://arxiv.org/abs/1209.3889

[7] J. Torrejón, A. Thiaville, A.L. Adenot-Engelvin, M. Vàzquez, O. Acher, J. Magn. Magn. Mater. **323** (2011) 283.



Fig. 1. Experimental setup: the polarizer (not shown), the first spin-flipper (not shown), WG is the waveguide, S is the microwire, D2 is the Cd slit, SF2 is the second spin-flipper, A is the analyzer of polarization, PSD is the position-sensitive detector.



Fig. 2. Experiment with the amorphous magnetic microwire: (a) geometry; (b) translation scan for the magnetic field applied parallel to the wire axis; (c) translation scan for the magnetic field applied perpendicular to the wire axis.

# High pressure effects on the crystal and magnetic structure of multiferroic RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

D. P. Kozlenko<sup>1</sup>, S. E. Kichanov<sup>1</sup>, E. V. Lukin<sup>1</sup>, N. T. Dang<sup>1,2</sup>, A. I. Smirnov<sup>3</sup>, B. N. Savenko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, 141980 Dubna, Russia <sup>2</sup> Tula State University, 300600, Tula, Russia <sup>3</sup>P.L. Kapitza Institute for Physical Problems, Russian Academy of Sciences, 117924 Moscow, Russia

The multiferroic materials, demonstrating a coupling between magnetic and electric subsystems, have become a subject of extensive scientific research in recent years [1]. A coexistence of spontaneous ferroelectric polarization with long range magnetic order in multiferroics provides a route for a construction of novel electronic devices with a possibility to control of magnetic properties be electric field and vice versa. An interesting example of such materials, combining multiferroic phenomena with geometrically frustrated magnetism on twodimensional triangular lattice, is rubidium molybdate RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>. The crystal structure of RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> has the trigonal  $P\overline{3}m1$  symmetry at ambient conditions and it is lowered to  $P\overline{3}$  via structural distortion below T = 180 K [2]. The triangular antiferromagnetic order with helical modulation along the c-axis and propagation vector  $q = (1/3, 1/3, q_z)$ ,  $q_z \sim 0.45$  r.l.u, is formed below  $T_N = 3.8$  K [3]. The binary molybdates are known to exhibit a structural polymorphism due to chemical substitution and variation of thermodynamic parameters but the high pressure behaviour of structural parameters and physical properties of these compounds in different phases remains unclear. We found that gradual structural phase transition from the initial trigonal P3m1 to the monoclinic C2/c phase occurred at pressures above 1 GPa. In order to study evolution of the magnetic order of multiferroic RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, we have performed neutron diffraction at high pressure.

The neutron diffraction patterns obtained at ambient and high pressure in low temperature region are shown on Fig.1a. At ambient pressure and temperatures below  $T_N = 3.8$  K, appearance of the magnetic peaks (-1/3, 2/3, - $q_z$ ) and (2/3, -1/3, - $q_z$ ),  $q_z = 0.452(5)$  r.l.u. was observed, corresponding to the onset of the incommensurate triangular AFM order with a propagation vector  $q = (1/3, 1/3, q_z)$ . An increase of the  $q_z$  value up to 0.480(9) r.l.u in the pressure range 0 – 2 GPa was observed (fig. 1b). The value of the pressure coefficient of the magnetic ordering temperature  $(1/T_N)dT_N/dP = 0.13$  GPa<sup>-1</sup>, estimated from temperature dependencies of the ordered magnetic moments (fig. 1c).

The pressure coefficient of the Néel temperature for  $RbFe(MoO_4)_2$  with superexchange interactions via two anions is significantly lower in comparison with relevant systems possessing superexchange interactions via one anion. No sign for a long range magnetic order

formation in the monoclinic phase was observed in the studied pressure and temperature range. It is consistent with the observed distortion of the triangular lattice formed by  $Fe^{3+}$  ions, giving rise to increase of the average Fe-Fe distance.



Fig. 1. (a) Neutron diffraction patterns of  $RbFe(MoO_4)_2$ , measured at P = 1 GPa, T = 2 and 5 K and their difference, illustrating magnetic contribution, processed by the Rietveld methods. For a comparison, difference pattern at P = 0 GPa is also shown. The ticks represent calculated positions of nuclear structure peaks (bottom) and magnetic structure peaks (top).

(b) Pressure dependence of the  $q_z$  component of the propagation vector, determined at T = 2 K. (c) Temperature dependencies of the ordered Fe magnetic moment at P = 0 and 1 GPa, normalized to the value obtained at P = 0 GPa and T = 2 K. The solid lines represent interpolations by functions  $\mu/\mu_0 \sim (1 - (T/T_{FM(AFM)})^{\alpha})^{\beta}$ . The obtained values of parameters are  $\alpha = 2.5(1)$  and  $\beta = 0.32(5)$  for both pressures.

As conclusion, our results demonstrate that the application of high pressure leads to a structural phase transition from the trigonal to the monoclinic phase in RbFe(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>. In the trigonal phase the  $q_z$  component of the propagation vector, corresponding to the triangular antiferromagnetic magnetic order, approaches the commensurate value 1/2 upon compression.

[1]. M. Fiebig, J. Phys. D **38**, R123 (2005).

[2]. S.A. Klimin, M.N. Popova, B.N.Mavrin, and et.al., Phys. Rev. B 68, 174408 (2003).

[3]. L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, L.A. Demianets, and A.Ya. Shapiro, Phys. Rev. B **67**, 094434 (2003).

## PERSISTENT LENGTH OF WORMLIKE MICELLES

# **OF ANIONIC SURFACTANT**

Molchanov V.S.<sup>1</sup>, Philippova O.E.<sup>1</sup>, Khokhlov A.R.<sup>1</sup>

Rogachev A.V.<sup>2,3</sup>, Soloviov D.<sup>2</sup>, Kuklin A.I.<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> Lomonosov Moscow State University, Physics Department, Moscow Russia

<sup>2</sup> Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

<sup>3</sup> Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics of Moscow State University, Moscow, Russia

<sup>4</sup> Bionanocenter of Moscow Institute for Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

The wormlike micelles of anionic surfactant are polymerlike aggregates formed by molecules with long tail containing 16-22 hydrocarbon groups in aqueous medium. Similarly to polymer chains the wormlike micelles are long flexible chains which can entangle with each other. This network impacts viscoelastic properties to system. Such system is often used as thickening agents with responsive properties in industries and technologies. The responsive properties are resulted by physical nature of aggregation in contrast to polymer chains where subchains are connected by strong covalent bounds. Persistent length is an important parameter of the network.

SANS is powerful method allowing calculate the persistent length. In our research the persistent length as function of surfactant concentration was studied.

SANS experiments were performed with the two-detector system at the YuMO instrument. The solutions of the samples were placed into quartz-glass cells with thickness of 1 mm in the direction of neutron beam. The samples were kept at  $20\pm0.03$  °C in a special thermal box connected to a Lauda computer-controlled thermostat. The experimental data were treated with SAS package, which allows us to sum up the data for the same sample, calculate the instrumental resolution function for given experimental conditions, correct the data for the dead times of neutron detectors and subtract the substrate background from the detector data, normalize the obtained spectrum to spectrum of standard vanadium scatterer, and subtract the background sample data.

SANS data for the different concentration of the surfactant in solution of wormlike micelles is shown in figure 1.

Using Holtzers plot (Iq as function of (q)) we found the scattering vector q\* corresponding transition from q<sup>-1</sup> region (scattering from linear part of micelles i.e. from rods) to coil scattering region (upturn of the intensity). At small concentrations (0.04, 0.11, and 0.19 wt.%) below and close to overlap concentration the q\* was clearly determined. But at high concentration rather above the overlap concentration the q\* was not observed. It may be explained by the strong interactions of the micelles at semidilute regime. At small concentrations the persistence length of potassium oleate micelles  $l_p$  is equal to 140 Å (calculate according the following equation  $l_p=2/q^*$ ). It was shown that the persistent length does not depend on surfactant content. The ratio of cross-section radius (2 nm) of wormlike micelles to persistent length allows to suppose that the wormlike micelles of anionic surfactant is semiflexible chains.



Fig. 1 SANS data for the different concentration of the surfactant in solution of wormlike micelles.

# AGGREGATION IN MIXED NONIONIC C14E7 AND ANIONIC CsDS SURFACTANTS MICELLAR SOLUTIONS

A.Rajewska<sup>a,b</sup>, K.Mędrzycka<sup>c</sup>, D.V.Soloviov<sup>b</sup> <sup>a</sup>National Centre for Nuclear Research, 05-400 Swierk-Otwock, Poland <sup>b</sup>Joint Institute for Nuclear Research, LNP, 141980 Dubna, Russia <sup>c</sup>Technical University Gdansk, 80-952 Gdansk Wrzeszcz, Poland

#### Introduction

The aim of this experiment was investigated of aggregation in mixed of two surfactants - nonionic C14E7 (heptaethylene glycol monotetradecyl ether) and anionic CsDS (cesium dodecyl sulfate) micellar solutions in heavy water at 25°C by small angle neutron scattering (SANS) method. The variations in the size and shape of micelles with composition was observed in heavy water dilute solutions of non-ionic surfactant ( $c_1=0.17\%$ ,  $c_2=0.5\%$ , $c_3=1\%$ ) as result of surfactants headgroup steric and electrostatic interactions [1-3] when nine different amounts of anionic surfactant CsDS was added to these solutions.

## Method and materials. Surfactants and D<sub>2</sub>O

The nonionic surfactant studied was heptaethylene glycol monotetradecyl ether ( $C_{14}E_7$ ) purchased from Fluka (99.9%) and we used it without further purification. The anionic surfactant cesium dodecyl sulfate (CsDS) (99.9%) was purchased from group of dr Thomas R. in Oxford University, Faculty of Chemistry. Heavy water ( $D_2O$ ) was purchased in Prikladnaya Chimia" in St. Petersburg (Russia).

#### Small Angle Neutron Scattering (SANS)

The small angle neutron scattering measurements were made using a YuMO spectrometer of the IBR-2M on pulsed neutron source in the Laboratory of Neutron Physics, JINR, in Dubna (Russia). The specifics of this spectrometer have been described in details before [4]. The scattering experiments covered the scattering vector q range  $0.007 \cdot 0.45$ Å<sup>-1</sup> (q=4 $\pi$ sin ( $\theta/2$ )/ $\lambda$ ,  $\theta$  is the scattering angle,  $\lambda$  is the wavelength). For the measurements quartz cells of thickness 2 mm were used which were sealed to prevent evaporation during the experiment. Up to 15 such cells were placed in a sample holder, and the temperature within the cells was kept constant in a range of  $\pm 0.5^{\circ}$ C by a thermostat. Conversion of the scattered intensities into absolute differential cross-sections was done by using an internal calibration standard (vanadium). For all samples D<sub>2</sub>O was used as solvent in order to achieve good contrast conditions. Background scattering was subtracted by comparison with a corresponding pure D<sub>2</sub>O sample. The data treatment was done according to the standard procedures [5].

## **Results and discussions**

Intensity of neutron scattering vs. scattering vector was investigated for mixed system  $C_{14}E_7$ + $D_2O+CsDS$  for 3 concentrations  $C_{14}E_7+D_2O:(a)c_1=0.17\%$ ,  $(b)c_2=0.5\%$ ,  $(c)c_3=1\%$  and 9 different amounts of anionic surfactant CsDS, (a)S1=c=0.216mM/l, S2=c=1.083mM/l, S3=c=2.160mM/l); (b)S4=c=0.372mM/l,S5=c=1.860mM/l,S6=c=3.720mM/l);(c)S7=c=0.573mM/l,S8=c=2.866mM/l,S9=c=5.733mM/l) at temperature 25°C. The partly results of the small-angle neutron scattering measurements are presented in Fig. 1(a,b). Figure shows one family of experimental small angle neutron scattering curves for mixtures of  $C_{14}E_7$  nonionic surfactant solutions in  $D_2O$  with anionic surfactant at one  $C_{14}E_7$  concentration: $c_1 = 0.17\%$ . Each of these mixtures contains the classical anionic surfactant CsDS at three different concentrations. It can be seen that, for the  $C_{14}E_7$  concentration  $c_1 =$ 0.17%, three curves corresponding to three different concentrations of the anionic surfactant CsDS intersects at the same point (Q=0.05Å<sup>-1</sup>). The spherical shape of micelles was observed for these mixed systems.



**Fig.1.(a)** Intensity of neutron scattering vs. scattering vector for mixed system  $C_{14}E_7 + D_2O+C_sDS$  for concentration  $C_{14}E_7+D_2O:c_1=0.17\%$  and three different amounts of anionic surfactant CsDS, (a) S1=c=0.216mM/l, S2=c=1.083mM/l, S3=c=2.160mM/l) at temperature 25°C and (b) the distance distribution function as determined by the IFT (Indirect Fourier Transformation) method.

#### Conclusions

The size and shapes of micelles in such micellar mixed water solutions were obtained from experimental results. For each family of experimental curves at constant concentration of nonionic surfactant for biggest amount of anionic surfactants micelles are rather spherical but for all other experimental condition ellipsoidal shape of micelles was observed. When total concentration of solution increase the amount and size micelles decreases at constant of nonionic surfactant. The three curves corresponding to the three different concentrations of anionic surfactant CsDS at each constant nonionic concentration 0.17%, 0.5% and 1% intersects in one but not the same point - for  $c_1=0.17\%$  at q=0.05Å<sup>-1</sup>, for  $c_2=0.50\%$  at q=0.035Å<sup>-1</sup> and for  $c_3=1.0\%$  at q=0.04Å<sup>-1</sup>.

#### **References:**

- [1] (a)Rosen M.J., Hua X. Y., J. Am. Oil Chem. Soc., 59 (1982) 582; (b) Nagarajan R., Langmuir 1 (1985)331
- [2] (a) Rosen M.J., Zhu Z.H., Goa T., J. Colloid Interface Sci., 157 (1993) 254;(b) Rosen M.J., Surfactants and Interfacial Phenomena, Wiley, New York, 1989, Chapter 11
- [3] Rajewska A., Mędrzycka K., Hallmann E., Crystallography Reports, 52 (2007) 781
- [4] Kuklin A.I., Islamov A. Kh., Gordeliy V. I., Neutron News, 16(2005)16
- [5] Soloviev A.G., Solovieva T. N., Stadnik A.V. et al., Reports JINR, Dubna, R10-2003-86

# Q-SCALE CALIBRATION OF SMALL-ANGLE SCATTERING SPECTROMETERS

A.V. Rogachev<sup>1,5</sup>, M. Nyam-Osor<sup>1,2</sup>, D.V. Soloviov<sup>1,3</sup>, O.I. Ivankov<sup>1</sup>, Yu.S. Kovalev<sup>1</sup>, A. Jigounov<sup>4</sup>, A.G. Soloviev<sup>1</sup>, R.V. Erhan<sup>1</sup>, A.I. Kuklin<sup>1,6</sup>

 <sup>1</sup> Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
 <sup>2</sup> National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia
 <sup>3</sup> Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine
 <sup>4</sup> Institute of Macromolecular Chemistry of the Czech Republic Academy of Sciences, Prague, Czech Republic
 <sup>5</sup> Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics of Moscow State University, Moscow, Russia
 <sup>6</sup> Bionanocenter of Moscow Institute for Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

#### Introduction

Small angle scattering (SAS) of X-rays (SAXS) and neutrons (SANS) are most useful techniques that provide essential information about the fundamental properties of materials. In the case of the SAXS, the X-rays interact with electrons, for the SANS, the interaction is only between the neutrons and the nuclei, but experiment give dependence of counts as function of pixel (from PSD detector for fixed wavelength) or function of pixel and wavelength for the time-of-flight (TOF) method. From one side it is easy to recalculate coordinate of pixel and wavelength to q-value, from another side TOF method is quite complicate for checking all parameters, such as delay time, wavelength, etc. Therefore, we need a method for precisely to do calibrations. One way is to use materials with the long-period spacing (due to small angle for SAS method). The calibrations of the SAXS and SANS instruments with using silver behenate [CH3(CH2)20COOAg] and silver stearate [CH3 (CH2)16CO2Ag] have been successfully tested [1-3]. It is know that possible to prepare different periodicity changing tails for family "behenate" samples.

In this paper, we present the results of the comparison between data obtained by the SAXS and the SANS technique with using the silver behenate and silver stearate. We offer using the mixture of silver behenate and silver stearate for measurements to determine the parameters of TOF method also.

## Materials and methods

Silver behenate and silver stearate are silver salts of the long-chain fatty acids. The long-period spacing are  $d_{001}=58.378$  (8) Å for silver behenate and  $d_{001}=48.68$  Å for silver stearate according to previous studies [1]. Silver behenate and silver stearate powders used in our study were purchased from Alfa Aesar, a Johnson Matthey Company [4].

A pinhole camera Molecular Metrology SAXS System attached to a microfocused X-ray beam generator (Osmic MicroMax 002) that operates at 45 kV and 0.66 mA (30 W). The camera was equipped with a multiwire, gas-filled area detector with an active area diameter of 20 cm (Gabriel design). Two experimental setups were used to cover the q range of 0.0045 - 1.1 Å<sup>-1</sup> (q=( $4\pi/\lambda$ )sin $\Theta$ ), where  $\lambda$  is the wavelength and 2 $\Theta$  is the scattering angle).

The neutron experiments were performed at YuMO spectrometer by two-detector system mode with ring wire detectors [5,6]. The beam was collimated to a diameter of 14 mm on the sample. The data treatment was performed by SAS program [7] with special smoothing mode, which include resolution of spectrometer [8].

#### **SAXS** measurements

The scattering pattern of silver behenate and stearate after the nonlinear curve fitting was perform to the scattering pattern [9], we had obtained a picture for the Bragg peaks of silver behenate, as can be seen in Fig.1 and Fig 2. These peaks were fitted with Gaussian functions.



Fig. 1. Bragg peaks of silver behenate obtained from SAXS measurement.

In SAXS measurement, Bragg peaks from silver behenate can be seen clearly and have sufficient intensities to do peak analysis. The fitting procedures and calculations were carried out for first five peaks. An overview of the results of Bragg peaks of silver behenate and silver stearate powder is shown in Table 1 and 2 correspondently.

Number of Bragg peaks	Q <sub>peak</sub> [Å <sup>-1</sup> ]	d <sub>hkl</sub> [Å]	∆d/d [%]	Δd [Å]	FWHM
1 st	0.1086	57.9	0.9	0.5	0.016
2nd	0.2151	58.4	0.8	0.5	0.021
3d	0.3222	58.5	0.2	0.1	0.023
4th	0.4307	58.4	0.4	0.2	0.023
5th	0.5399	58.2	0.3	0.2	0.027

Table 1.	Bragg peak	s of silver l	behenate	measured	by SAXS



Fig. 2. Bragg peaks of silver stearate obtained from SAXS measurement.

Number of Bragg peaks	Q <sub>peak</sub> [Å <sup>-1</sup> ]	d <sub>hkl</sub> [Å]	∆d/d [%]	∆d [Å]	FWHM
1st	0.1351	46.5	4.5	2.1	0.025
2nd	0.2656	47.3	2.8	1.3	0.023
3d	0.3998	47.1	3.2	1.5	0.028
4th	0.5341	47.1	3.3	1.6	0.028
5th	0.6717	46.8	3.9	1.8	0.034

Table 2. Bragg peaks of silver stearate measured by SAXS

#### SANS measurements

SANS patterns of silver behenate and silver stearate obtained from the SANS YuMO spectrometer are shown respectively in Fig. 3 and Fig. 4. To do the Bragg peak analysis on the SANS patterns, we used exponential and Gaussian functions. Table 3 shows results of first and second Bragg peaks for silver behenate. For silver stearate, it is presented in Table 4.



Fig. 3. Neutron diffraction pattern for silver behenate.

From typical picture of SANS pattern of silver behenate in Fig .5, we can show that first Bragg peak has sufficient intensity and second peak has lower intensity. Third, fourth and fifth peaks disappear in the incoherent background. However, to determine the wavelength only the first Bragg peak is useful from Bragg reflections in the neutron diffraction pattern obtained from the SANS measurement [2,3]. It is also similar for silver stearate in Fig. 6.

Number of Bragg peaks	Q <sub>peak</sub> [Å <sup>-1</sup> ]	d <sub>hkl</sub> [Å]	Δd/d [%]	Δd [Å]	FWHM
1 <sup>st</sup>	0.1086	57.85	0.92	0.53	0.023
$2^{nd}$	0.2154	58.34	0.09	0.05	0.031

Table 5. Drugg peaks of silver benchate measured by Srifts	Tabl	e 3.	Bragg	peaks	of silver	behenate	measured	by	SANS
--	------	------	-------	-------	-----------	----------	----------	----	------



Fig. 4. Neutron diffraction pattern for silver stearate.

 Table 4. Bragg peaks of silver stearate measured by SANS

Number of Bragg peaks	Q <sub>peak</sub> [Å <sup>-1</sup> ]	d <sub>hkl</sub> [Å]	Δd/d [%]	Δd [Å]	FWHM
1st	0.1332	47.17	3.1	1.46	0.032
$2^{nd}$	0.2614	48.07	1.3	0.62	0.057

We also measured by the SANS spectrometer the sample, which was prepared as a mixture of two silver powders: silver behenate and silver stearate 50%/50% wt%. The peak analyses of silver behenate and silver stearate were carried out from results of measurement for the mixture. Neutron diffraction patterns for the mixture of silver behenate and silver stearate powders are presented in Fig. 5. From the lower q-range side of the neutron diffraction pattern in Fig. 5, first peak is first Bragg peak from silver behenate, second is first Bragg peak from silver stearate, third is second Bragg peak from silver behenate and fourth is second Bragg peak from silver stearate in the mixture of silver compounds. We show that there is a overlapping between the peaks from silver behenate and silver stearate due to two silver powders have long period spacing to produce peaks in nearby q-range. Another reason why the overlapping create is because the SANS spectrometer has low resolution to produce wider diffraction peaks than peaks are produced from SAXS instruments.



Fig. 5. Neutron diffraction pattern for mixture of silver behenate and silver stearate.

From comparisons between full width at half maximum (FWHM) results of the SAXS and the SANS measurements, the SANS YuMO spectrometer create more diffraction line broadening than the SAXS instrument used in this study. The diffraction line broadening depends on instrumental resolution according to Scherrer equation and if the resolution is low, it gives wide line broadening. However, we can check accurately the time delay and the wavelength of neutron beam coming from active zone of IBR-2M reactor by simple measurements in terms of the positions of Bragg peaks of silver behenate and silver stearate as calibration standards.

#### Conclusions

We considered the possibilities of calibrations by silver behenate and silver stearate for SAS technique. We showed that the long-period spacing of the silver compounds give to us to checking a parameters TOF method. From comparisons between FWHM results of SAXS and SANS measurements, YuMO spectrometer has lower resolution than pinhole camera Molecular Metrology SAXS System. We obtained the parameter of the YuMO spectrometer (namely: time of delay, wavelength correctly etc) due to measurements of silver behenate and silver stearate. We suggested to use mixture of silver behenate and silver stearate for calibration of detectors on the YuMO spectrometer. we showed that it is enough to do the measurement simultaneously such as the mixture without to do for each powder. Results of the data obtained from the SANS measurements performed with the silver behenate and the silver stearate powders are presented and compared with the SAXS measurements.

**Acknowledgement:** Thise work was supported by a grant of the Chech and Romania Plenipotentiaries at JINR-Dubna.

## References

- [1] Blanton T.N. et. al. // Powder Diffr. (1995) 10 (2), 91-95.
- [2] Gilles R. et. al. // J. Appl. Cryst. (1998) 31, 957-959.
- [3] Keiderling U. et. al. // J. Appl. Cryst. (1999) 32, 456-463.
- [4] http://www.alfa.com/ru/gh100w.pgm

- [5] Kuklin A.I. et. al. // Neutron News (2005) 16:3, 16-18.
- [6] Kuklin A.I. et. al. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques (2006) 6, 74-83.
- [7] Soloviov A.G. et al. // Communication of JINR (2003) P10-2003-86.
- [8] A.G.Soloviev et. al. // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research (2003) A. 502/2-3 498-500.
- [9] Nyam-Osor et. al. // Journal of Physics: conf. ser. (2012), 351, 012024.

# Frequency spectra of tungsten at temperatures 293 and 2400 K

V.A. Semenov, O.A.Dubovsky, V.M. Morozov, A.V. Orlov, D.V. Savostin, V.V. Sudarev

Federal State Unitary Enterprise "State Scientific Centre of the Russian Federation – Institute for Physics and Power Engineering named after A.I.Leypunsky"

249033, Obninsk, Kaluga region, sq. Bondarenko, 1

Experimental frequency spectra of crystal lattice of tungsten (W) at temperatures 293 K and 2400 K were obtained for the first time by measurement of slow neutron inelastic scattering. Metal tungsten is of interest for reactor purpose. Along with chromium and molybdenum it belongs to transition elements of VI-th group of periodic system and is most refractory metal:  $T_{melt}(W)=3653K$ . Atomic number of tungsten is 74, atomic mass 183.85, density 19.3 g/cm<sup>3</sup>. Outer electron configuration of tungsten atom is  $5d^46s^2$ . Tungsten has bcc structure ( $a = 3.1583 \div 3.1592$  Å [1]). Structure of tungsten is stable at normal pressure in temperature interval from room temperature to melting point. Neutron absorption cross-section of W is equal to 18.4 barn, total scattering cross-section  $\sigma_s=4.86$  barn. Meanwhile, coherent and incoherent scattering cross-sections are of close-ratios:  $\sigma^{coh}=2.86$  barn,  $\sigma^{inc}=2.0$  barn [25]. Dispersion curves of W have peculiarities, that are specific for a number of another transition metals [4]. Particularly, longitudinal branch in [001] direction has maximum at wave vector  $\xi=0.7$ , and two transverse branches in [110] direction, which are almost degenerate at little  $\xi$ , intersects at  $\xi\approx0.45$ .

Frequency spectra of tungsten (fig.1) are presented in this paper. They were obtained from two differential scattering cross sections (TDSCS) of slow neutrons, measured on DIN-2PI spectrometer [5] at sample temperatures 293K and 2400K. Measurements were carried out at initial neutron energy  $E_0=18.7$  meV in scattering angle interval from 28 to 134 degree. Resolution in initial energy region was ~6-7%. High-temperature thermostat TS3000K [6] was used to heat W sample. Sample was situated into tantalum cylindrical heater of 0.3 mm thickness. Heater was surrounded by heat-shielding screens (8 piece) made from tantalum foil of 0.05 mm thickness. Frequency spectra reconstruction from TDSCS was carried out by Bredov-Oskotsky method [7] by iterations with using of program complex SLOWN [8]. Experimental frequency spectra W obtained (fig.1) noticeably differs from calculated spectra [9,10].



**Fig.1.** Frequency spectra of tungsten at temperatures 293 and 2400 K (experiment) *1* - 293 K; *2* - 2400 K; *3* – calculation.

As opposed to experimental spectra, in calculated ones separated peaks are clear revealed at energy transfer 18 and 26 meV, matching to transverse and longitudinal atoms vibrations. In experimental spectra these peaks are slightly seen. At transition from room temperature to 2400 K spectrum as a whole is softened. By the way detailed spectrum structure remains observable. High-frequency wing, observable at room temperature, is disappeared. Physical reason for this wing remains not understood, though similar effect was discussed as far back as in measurement with vanadium [11]. As for low-energy region, observable here structure is in experimental errors limits.

# Literature

- 1. Зеликман А.Н., Никитина Л.С. Вольфрам. М.: Металлургия, 1978, с. 18.
- 2. Chen S.N. and Brockhouse B.N. Solid State Commun. 2, 73 (1964).
- 3. *Larose A. and Brockhouse B.N.* Can. J. Phys. 54, 1819 (1976).
- 4. *Güthoff F., Hennion B., Herzig C., Petry W., Schober H.R., Trampenau J.* J. Phys.: Condens. Matter. 6, 6211 (1994).
- 5. User guide/ Ed. Sicolenko V.P. Dubna: Joint Institute for Nuclear Research, 1997, p.31
- 6. Ион М., Козлов Ж.А., Матееску Г., Падуреану И., Семенов В.А., Крачун Л., Рыпеану С.Н., Морозов В.М., Опреа А.И., Опреа К., Пучков А.В. Высокотемпературный термостат TS-3000K для нейтронных измерений на спектрометре ДИН-2ПИ реактора ИБР-2. Сообщение ОИЯИ P13-2008-66: Дубна, ОИЯИ (2008) 17 с.
- 7. Оскотский В.С. Об измерении функции распределения фононов с помощью когерентного рассеяния медленных нейтронов на поликристаллах в телесный угол, ФТТ. 9, вып.2, 550, 1967.
- 8. Лисичкин Ю.В., Довбенко А.Г., Ефименко В.А., Новиков А.Г., Смиренкина Л.Д., *Тихонова С.И.* Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Ядерные константы», вып.2, 12 (1979).
- 9. *Chang Hyo Kim and Jong Hwa Chang.* A Simple Shell Model Approach to Lattice Dynamics of Cr, Mo, and W. J. of the Korean Nuclear Society, V.**7**, N2, 107-117 (1975).
- 10. *Debernardi A., Alouani M., and Dreysee H.* Ab initio thermodynamics of metals: Al and W. Phys. Rev. **B 63**, 064305 (2001).
- 11. Page D.I. Proc. Phys. Soc. 91, 76, (1967).

#### TRACE ELEMENT DEPOSITION IN MACEDONIA STUDIED BY MOSS BIOMONITORING TECHNIQUE, NAA, ICP-AES AND AAS

Lambe Barandovski<sup>1</sup>, Marina V. Frontasyeva<sup>2</sup>, Trajče Stafilov<sup>3</sup>, Robert Šajn<sup>4</sup>, Katerina Bačeva<sup>3</sup>, T.M. Ostrovnaya<sup>2</sup>

 <sup>1</sup>Institute of Physics, Faculty of Science, Ss. Cyril and Methodius University, POB 162, 1000 Skopje, Macedonia
 <sup>2</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Moscow Region, Russia
 <sup>3</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Science, Ss. Cyril and Methodius University, POB 162, 1000 Skopje, Macedonia

<sup>4</sup>Geological Survey of Slovenia, Dimičeva ul. 14, 1000 Ljubljana, Slovenia

#### **1. INTRODUCTION**

Terrestrial mosses as biomonitors of atmospheric deposition of trace elements were introduced in Scandinavian countries and shortly after that usage of the mosses to assess the atmospheric deposition of metals was widely accepted by most of the European countries [1].

Republic of Macedonia was involved in the UNECE ICP Vegetation (United Nations Economic Commission for Europe International Co-operative Programme on Effects of Air Pollution on Natural Vegetation and Crops) – Heavy Metals in European Mosses, for the first time in 2002 (survey 2000/2001) and again in 2005 when atmospheric deposition of trace elements was studied over the entire territory of the country using samples of terrestrial mosses *Hypnum cupressiforme*, *Homalothecium lutescens*. The last moss survey in Macedonia took place in 2010. Here are presented some of the obtained results.

#### 2. EXPERIMENTAL

*Study area.* The Republic of Macedonia has a total area of 25,713 km<sup>2</sup> and it is a landlocked country situated in the central part of the Balkan Peninsula and it has around two million inhabitants. The main industrial capacities in the country are located in Skopje, Veles Radoviš, Kavadarci, Tetovo and two thermoelectric power plants using lignite located in Kichevo and Bitola. There are 3 mines with flotation plants for lead and zinc and one for copper in the Eastern part of the Republic of Macedonia.

*Sampling.* Moss sampling was performed according to the guidelines of the International Cooperative Programme on Effects of Air Pollution on Natural Vegetation and Crops – monitoring manual for air pollution monitoring of atmospheric deposition of heavy metal deposition using bryophytes, as well as the procedure used in the previous European moss surveys [2]. At 72 locations over the entire territory of the Republic of Macedonia during August and September 2010, samples from the species *Homalothecium lutescens* and *Hypnum cupressiforme* were collected. To aid the analysis of temporal trends in the concentration of heavy metals in mosses, samples were collected from the same sites as in the previous surveys. The distribution of the sampling sites is shown in Fig. 1.

*Sample preparation.* In the laboratory the samples were dried to constant weight for 48 hours at room temperature and cleaned but not subjected to any further washing. Green and green-brown parts of the moss were sorted and prepared for analysis.

**NAA** was performed in the radioanalytical laboratory at the pulsed fast reactor IBR-2 of the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia. To determine the short lived isotopes samples were irradiated for 3 min and measured twice after 2–3 min and the

second one for 20 min after 9–10 min of decay. For determination of the elements that forms long lived isotopes samples were irradiated for approximately 3 days, repacked and then measured twice after 3-5 days for 45 minutes and 20-22 days of decay for 1.5 hours.



Fig. 1. Sampling network

**ICP-AES and AAS** were performed at the Institute of chemistry, Faculty of Natural Sciences and Mathematics in Skopje, Macedonia, using ICP-(Varian, 715ES) AES and Zeeman electrothermal atomic absorption spectrometry (Varian SpectrAA 640Z). For digestion moss samples (0.5000 g) were placed in a Teflon digestion vessels, 7 ml HNO<sub>3</sub> (69 %, m/V) and 2 ml  $H_2O_2$  (30 %, *m/V*) were added, and the vessels were capped closed, tightened and placed in the rotor of the Mars digestion microwave (CEM, USA). Plant samples were digested at 180 °C.

## **3. RESULTS AND DISCUSSION**

Median values and minimum-maximum ranges for the contents of all elements obtained from the analysis of the moss samples collected in 2010 are compared with the data obtained in the 2005 and 2002 moss survey in the Republic of Macedonia.

Analysing the trend of the median values calculated for the three moss surveys in Macedonia it can be seen that in the last survey lower median values are observed for all elements that are usually connected with heavy metal air pollution and almost same median values for the elements that have crustal origin.

## 4. ASSOCIATION OF CHEMICAL ELEMENTS

The matrix of rotated factor loadings for some of the elements obtained by ICP-AES and AAS is given in Table 2. 78.6% of variability of the treated elements are explained by four identified factors. Four factors were identified by visual inspection of similarities of spatial distribution of element patterns, the correlation coefficient, comparison of basic statistical parameters and the results of multivariate analyses.

**Factor 1** (Al, V, Fe, Ba, Li, Sr). This group represents chemical elements that are naturally distributed. Content of these elements in mosses is significantly influenced by mineral particles released into the atmosphere by wind erosion of local sources or particles attached to the moss in the periods when the soil surface is covered by water. The highest contents of the elements have been found in moss samples, which have been collected on Precambrian and Paleozoic shists or close to them.

	Macedonia moss survey 2010 (Present work)		Macedonia	Macedonia moss survey 2005 [3]		Macedonia moss survey 2002 [4,5]	
No of	_010 (	n=72		n=72		n=73	
samples		11 72	n /2				
Element	Median	Range	Median	Range	Median	Range	
Al*	1900	540-8700	3600	1466-25860	3736	825-17600	
As	0.52	0.23-	0.67	0.18-4.3	0.8	0.12-8.0	
B*	6.6	0.010-94	-	-	-	-	
Ba*	34	7.1-240	52	18-184	54	14-256	
Br	4.6	1.96-16.2	1.9	0.90-7.0	2.16	0.06-7.7	
Ca*	7100	2900-12000	8547	5237-16280	5593	1207-23640	
Cd*	0.22	0.068-2.2	0.29	0.015-3.01	0.16	0.016-2.95	
Ce	2.62	0.66-20.7	4.48	1.53-17	5.6	0.83-42	
Cl	89	46-308	90	45-507	149	43-693	
Co	0.84	0.27-10.2	1.13	0.42-5.3	1.09	0.24-13.6	
Cr*	3.5	1.0-40	6.79	2.09-82	7.47	2.33-122	
Cs	0.20	0.093-1.4	0.32	0.132-2.3	0.39	0.097-1.7	
Cu*	5.0	2.8-15	6.7	0.7-21.4	7.65	2.9-29.4	
Dy	0.21	0.026-1.2	0.36	0.073-1.7	-	-	
Eu	0.059	0.01-0.26	0.066	0.01-0.48	0.11	0.03-0.48	
Fe*	1500	510-6300	2238	998-8130	2458	424-17380	
Hf	0.17	0.09-0.9	0.21	0.08-1.1	0.26	0.05-3.8	
Ι	1.65	0.66-3.3	1.69	0.64-3.7	1.18	0.36-2.8	
K*	4600	2100-7600	7510	4652-13530	8615	2861-18190	
La	1.35	0.62-9.0	2.31	0.97-9.0	2.32	0.50-22	
Li*	1.0	0.29-5.1	-	-	-	-	
Mg*	1900	610-4900	1311	658-3351	2377	674-7421	
Mn*	130	30-440	188	54-595	186	37-1475	
Мо	0.15	0.04-0.44	0.16	0.07-1.09	0.19	0.03-1.12	
Na	189	89-1030	358	139-1926	419	118-8673	
Ni*	3.5	1.3-52	5.8	1.80-43	2.4	0.09-24	
P*	1100	420-2000	-	-	-	-	
Pb*	4.6	1.9-22	7.6	0.1-46.1	6.0	5-47.1	
Rb	6.7	2.2-25.8	9.8	4.0-28.6	10.9	1.5.1947	
Sb	0.09	0.044-0.27	0.15	0.044-0.90	0.2	0.039-1.4	
Sc	0.45	0.16-4.93	0.67	0.30-4.59	0.81	0.12-6.79	
Se	0.14	0.021-0.28	0.1	0.015-0.61	0.18	0.013-0.61	
Sm	0.27	0.11-1.5	0.35	0.14-2.0	0.46	0.07-3.4	
Sr*	24	5.6-100	34	13-140	31	12-136	
Та	0.04	0.018-0.27	0.08	0.031-0.33	0.09	0.013-0.79	
Tb	0.04	0.01-0.22	0.05	0.01-0.25	0.06	0.01-0.56	
Th	0.36	0.17-2.6	0.58	0.26-3 3	0.67	0.12-7.6	
Ti	153	33-1450	220	86-1234	163	12-1365	
IJ	0 11	0.06-1.07	0.21	0.08-1.06	0.21	0 03-1 45	
V*	3 5	1 0-17	64	2 50-32	69	1 79-43	
w	0.1	0.02-0.56	0.7	0 19-3 2	1 21	0 25-3 9	
Zn*	20	1 0-129	36	16-91	39	14-203	
Zr	5.7	1.49-27	12	0.39-69	15	2-142	

**Table 1.** Comparison of the median values and ranges of element content in moss from Macedonia between data of the moss survey 2010 and moss surveys in 2002

\* Elements determined by ICP-AES and AAS in 2010 survey

Element	F1	F2	F3	F4	Com (%)
Al	0.86	0.21	0.36	-0.01	91.0
V	0.83	0.24	0.33	-0.11	87.4
Fe	0.81	0.24	0.46	-0.09	93.3
Ba	0.77	0.04	-0.09	0.29	68.1
Li	0.76	0.20	0.47	0.02	83.4
Sr	0.75	0.09	0.05	0.21	61.9
Cu	0.39	0.56	0.30	0.20	60.5
Zn	0.17	0.88	0.12	0.08	82.8
Pb	0.15	0.77	0.16	-0.36	76.8
Cd	0.06	0.88	0.02	0.14	80.6
Mg	0.51	-0.03	0.57	0.22	63.8
Cr	0.36	0.19	0.86	-0.09	91.3
Ni	0.11	0.17	0.87	-0.15	82.6
Р	0.20	0.04	-0.18	0.82	74.4
Κ	0.04	0.04	0.06	0.89	80.8
Var (%)	29.7	18.3	17.9	12.7	78.6

**Table 2.**Matrix of rotated factor loadings (15 selected elements)

**Factor 2** (Cd-Cu-Pb-Zn) with 18.3% of total variability is the second strongest factor. This is anthropogenic geochemical association of elements. This factor is connected with industrial activity in Macedonia.

**Factor 3** (Mg, Cr and Ni) represents mixed (geogenic-anthropogenic) association of elements. Specific content of these elements primarily is affected by natural factors such as lithological background but anthropogenic influence as well. High values of aforementioned elements has been clearly isolated in the Vardar zone.

**Factor 4** (P and K) represents the second anthropogenic geochemical association of elements. For the first time content of P in the moss samples collected from Macedonia was determined since ICP-AES technique was used. High values of these elements have been found in the regions where agricultural activities are present in the country. Apparent reason for high content of K and P in the moss samples collected in these regions is the usage of potassium and phosphorus fertilizers in the agricultural activities.

#### CONCLUSION

The results from 2010 showed lower elemental content in the mosses for some elements that are usually connected with the anthropogenic activities then the results obtained for the same elements in 2005.

Most important pollution sources in the country still are smelters or Radoviš and Kavadarci, open slag dumps in Veles and Tetovo, and the mines Sasa, Toranica, Zletovo and Bucim.

F1, F2, F3 and F4 - Factor loading; Var-Variance (%); Com-Communality (%)



**Fig. 2.** Spatial distribution of Factor 1 scores (Al-Ba-Fe-Li-Sr-V), Factor 2 scores (Cd-Cu-Pb-Zn), Factor 3 scores (Cr-Mg-Ni) and Factor 4 scores (K-P)

## REFERENCES

- 1. H. T. Wolterbeek, Biomonitoring of trace element air pollution: Principles, possibilities and perspectives, *Environ. Poll.*, **120**, 11–21 (2002).
- 2. H. Harmens, A. Buse, P. Büker, D. Norris, G. Mills, B. Williams, Heavy metal concentrations in European mosses: 2000/2001 survey, *J. Atmos. Chem.* **49**, 425–436 (2004).
- 3. L. Barandovski, M. V. Frontasyeva, T. Stafilov, R. Šajn, S. Pavlov, V. Enimiteva. Trends of atmospheric deposition of trace elements in Macedonia studied by the moss biomonitoring technique, *J. Environ. Sci. Heal. A*, **47**, 2000–2015(2012).
- 4. L. Barandovski, M. Čekova, M. V. Frontasyeva, S.S. Pavlov, T. Stafilov, E. Steinnes, V. Urumov, *Air pollution studies in Macedonia using the moss biomonitoring technique, NAA, AAS and GIS technology*; Preprint E18–2006–160, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 2006.
- 5. L. Barandovski, M. Cekova, M. V. Frontasyeva, S.S. Pavlov, T. Stafilov, E. Steinnes, V. Urumov, Atmospheric deposition of trace element pollutants in Macedonia studied by the moss biomonitoring technique, *Environ. Monitor. Assess.*, **138**, 107–118 (2008).

## NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS OF BIVALVE MUSSELS USED AS AQUATIC BIOMONITORS IN THE SOUTH AFRICAN ATLANTIC COASTAL WATERS

## J. Bezuidenhout<sup>1</sup>, M.V. Frontasyeva<sup>2</sup>, D. F. Pavlov<sup>3</sup>, Z. Goryainova<sup>2</sup>, I. Zinicovscaia<sup>2</sup>, Ntombizikhona Beaulah Ndlovu<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Physics Department, Faculty of Military Science, Stellenbosch University, Saldanha, South Africa

<sup>2</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

<sup>3</sup>I.D. Papanin Institute for the Biology of Inland Waters, Russian Academy of Sciences, Borok, Russia

<sup>4</sup>Department of Physics, Stellenbosch University, South Africa

#### **INTRODUCTION**

In 1975 it was proposed to use bivalve mollusks as sentinel organisms for monitoring levels of environmental pollutants - the approach named "**Mussel Watch**" (MW) [1]. The MW utilizes ability of bivalve mollusks to accumulate a range of potentially hazardous environmental pollutants (see e. g. [2]).

Nowadays the combination of the MW with such state-of-the-art analytic technique as neutron activation analysis allows for development and establishing of modern systems of environmental monitoring of fresh and marine waters.

For South Africa the establishing of such system is a topical problem since the country has many potential sources of pollution (*e.g.* intensive and growing mining, ore processing industries, well developed sea transport facilities, *etc.*) which may negatively affect a range of economically-important activities.

In addition, the country's coastal waters abound in natural populations of bivalve mollusks and are used for marine aqua farming of such mollusks as oysters and black mussels. This makes development of the nation's MW systems ecologically and economically sound and feasible.

To establish a system of aquatic biomonitoring in the Western Cape area of South Africa a bilateral project by FLNP JINR and Stellenbosch University was initiated. Instrumental neutron activation analysis (INAA) was used as the main analytical technique.

#### **MATERIALS AND METHOD**

#### Sampling and sample preparation

Sampling sites for the bivalve mollusks allocated in Saldanha and Danger bay on the South African Atlantic coast are shown in Fig. 1. Two species of marine bivalve mollusks were sampled: artificially propagated and farmed in sea water Pacific oyster (*Crassostrea gigas*), as well as farmed and wild black mussels (*Mytilus galloprovincialis*) (Table 1). Ten specimens of both species were sampled from each site, sealed in zip-locked plastic bags, refrigerated, and shipped to FLNF JINR (Dubna) for further processing and analysis.

In the laboratory the samples were dissected, soft tissues separated from shells and the samples were dried to a constant weight, homogenized in the ball mill and packed in appropriate containers for further INAA.



**Fig.1.** Landsat image of the studied area. Green dots are sampling sites; red dots are sources of potential pollution

Mollusk species, sample	Tissue				
Danger Bay					
Black mussel	Shell				
	Soft tissues				
Saldan	ha Bay				
Black mussel	Shell				
	Soft tissues				
Oyster	Shell				
	Soft tissues				
Bottom sediments	na				

Table. Characteristics of collected materials analyzed in the present study

## Analysis

INAA was performed in the radioanalytical laboratory at the pulsed fast reactor IBR-2, FLNP JINR. To determine short-lived isotopes of samples of 0.3 g were packed in polyethylene bags and irradiated for 3–5 min in irradiation channel with neutron flux density  $\Phi_{epi.}$ = 1.3.6×10<sup>12</sup> n/(cm<sup>2</sup>×s). Gamma spectra of induced activity were measured twice, for 3–5 min after 5–7 minutes of decay and for 10–15 min after 20 min of decay. For determination of long-lived isotopes samples were irradiated for 3 days and measured twice, after 4 and 15 days, respectively. To process gamma spectra and to calculate concentrations of elements the software developed at FLNP JINR was used [3]. Quality control was provided by using relevant certified reference materials.

#### **RESULTS AND DISCUSSION**

A total of 38 elements (Na, Mg, Al, S, Cl, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Mo, Ag, Cd, In, Sb, I, Cs, Ba, La, Ce, Sm, Eu, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta) were determined.

The accumulation of elements by bivalve mollusks is not just a passive process of their intake from water and/or food particles. The rate of accumulation and, thus, the resulting tissue burdens of chemical elements depend on a range of factors among which are species-specific and tissue-specific peculiarities of metabolism, filtration (feeding) rate, activity of detoxifying systems (e. g. activity specific enzymes and synthesis of metallothioneins), general physiological state of the organisms, composition of food in the environment, ambient temperature, oxygen content, hydrodynamics, and type of substrate at the mollusks' habitats, *etc.* 

Considering the potential effects of these factors, the analysis of the obtained analytical results was performed as follows: (1) comparison of the elemental content of black mussels (shells and soft tissues) from Saldanha Bay *versus* those from Danger Bay; (2) comparison of the levels of elements in the same tissues of two studied species (oysters *versus* black mussels). Some examples of these comparisons are given below.

The contents of analyzed elements in the shells and soft tissues of black mussels from compared bays are given in **Figs. 2** and **3**.



Fig. 2. Contents of some chemical elements in the shells of black mussels from the studied bays

The study revealed that the contents of Sb and Co in the shells of black mussels from Saldanha Bay were statistically significantly higher than those from Danger Bay. Similar trend was revealed for Fe and Cr (**Fig. 2**). As opposite, the soft tissues of the mussels from the Danger Bay contained significantly higher levels of most of the analyzed elements (Cr, Sr, Mo, Fe, and Co); the differences between the levels of Se were statistically insignificant; the content of Zn was much higher in the mussels from Saldanha Bay (**Fig. 3**).









Danger Bay Saldanha Bay







Danger Bay Saldanha Bay



Danger Bay Saldanha Bay



Danger Bay Saldanha Bay

Fig. 3. Contents of chemical elements in the soft tissues of black mussels from the studied bays

The levels of some determined elements in the mollusks farmed in Saldanha Bay (black mussels *versus* oysters) are given below.




Fig. 4. Elemental contentof black mussels and oysters from Saldanha Bay. Sh - shells; ST - soft tissues

The revealed site-specific differences in the contents of determined elements in the tissues of black mussels from Danger and Saldanha bays could be explained by the obvious differences in the environmental conditions at these sites: the conditions in the open Danger Bay are more dynamic and challenging for the mussels inhabiting the rocks there. This may result in more active metabolism in these mollusks and hence in the more active accumulation of elements.

Another possible reason is the different composition of the mussels' food in these bays and, consequently, different intensities of alimentary uptake of the determined metals by the mussels from both bays.

The comparison of tissue levels of the determined elements in the black mussels and oysters revealed that only the level of Br was significantly higher in the shells of black mussels. The contents of all other determined elements (Cd, Zn, Cr, Se, Fe, Co) were considerably higher in both tissues of oysters. In our opinion, this may reflect species-specific differences in the metabolic rates of compared mollusks and a longer period of cultivation of oysters than that of black mussels (on average, nine months for oysters *versus* six months for

black mussels). The contents of all chemical elements, except for Cd, are relatively low, at the levels of "essential micronutrients" but not of "contaminants". The content of Cd approaches the maximal acceptable level indicating the necessity to further detailed study this element.

#### CONCLUSION

The contents of Sb and Co in the shells of black mussels from Saldanha Bay were statistically significantly higher than those from Danger Bay. The soft tissues of the mussels from Danger Bay contained significantly higher levels of most of the determined (Cr, Sr, Mo, Fe, and Co); the content of Zn was much higher in the mussels from Saldanha Bay. The tissues of oysters contained much higher levels of almost all analyzed elements comparing to the tissues of black mussels indicating differences in their metabolic rates, ages and, on the other hand higher richness of edible parts of oysters in the essential micronutrients.

It was shown that the bivalve mollusks are good biomonitors for tracing elemental content in the changing environmental conditions and they could be used for assessing the marine aquatic pollution.

#### REFERENCES

- 1. Goldberg E. (1975) The Mussel Watch A First Step in Global Marine Monitoring, *Marine Pollution Bulletin*, 6, 7, 111-123.
- 2. Farrington J. W., Goldberg E. D., Risebrough R. W, Martin J. H., and Bowen V. T. "Mussel Watch" 1976-1978: an overview of the trace-metal, DDE, PCB, hydrocarbon and artificial radionuclide data (1983), *Environ. Sci. Technol.*, *17* (8), 490–496.
- 3. Dmitriev A.Yu, Pavlov S.S. Automated quantitative determination of elements in samples by neutron activation analysis at the IBR-2 at the LNP JINR. Physics *of* Particles *and Nuclei Letters*, Vol. 10, No 1(178), 2013, p. 58-64.

### INSTRUMENTAL NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS USED TO STUDY HALOGENS IN MACROALGAE FROM THE CRIMEAN COASTLINE OF THE BLACK SEA

A.V. Kravtsova, M.V. Frontasyeva<sup>1</sup>, N.A. Milchakova, L.P. Strelkova<sup>1</sup>

Institute of Biology of the Southern Seas, Sevastopol, Ukraine <sup>1</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

### **INTRODUCTION**

Halogens (Cl, Br, I) are elements which content in marine organisms are orders of magnitude greater than their content in terrestrial organisms and sea water. It is known that halogens had been discovered namely due to the sea and marine organisms. Thus, iodine has been isolated from marine algae in 1812 by Courtois, bromine in 1825 by Balardom in the evaporated residue of sea water, and then in the ashed algae [1]. It was found that algae are one of the best accumulators of scattered elements - iodine and bromine. The levels of Cl, Br, I in the Black Sea algae thalli (and their morphostructural elements) are scared, while the Black Sea with its water chemical composition peculiarities (2 times less salinity than the ocean one; hydrogen sulfide layer - up to 2/3 of the total volume of the basin) is of interest to carry out such studies.

Instrumental neutron activation analysis (INAA) is one of the preferred methods for the simultaneous determination of chlorine, bromine and iodine in biological samples [2]. Among its advantages is good accuracy of about  $\pm$  (10-15) % in determining the content of the order of 10?<sup>6</sup>g, independence of the analytical results on the form of chemical compounds of elements.

## **MATERIALS AND METHOD**

#### Sampling and sample preparation

Algae sampling was carried out in the Sevastopol water area in spring and summer of 2012 at the depth of 0.5-1 m (Fig.1).



Fig.1. Sampling sites

A total of 78 samples of *Cystoseira barbata* and *Cystoseira crinita* in the age range of 6 months to 5 years were prepared. Plants were carefully cleaned from epiphytes (analysis of mass epiphytes was conducted separately) and thalli was divided into the stem and branches of recent orders. Samples were dried at room temperature and then brought to a constant weight at 40  $^{\circ}$  C during 24 hours. Further the samples were manually homogenized in an agate mortar.

#### Analysis

INAA was performed in the radioanalytical laboratory at the pulsed fast reactor IBR-2, FLNP JINR. To determine short-lived isotopes of Cl, Br, and I samples of 0.3 g were packed in polyethylene bags and irradiated for 3-5 min in irradiation channel with neutron flux density  $\Phi_{epi} = 1.3.6 \times 10^{12} \text{ n/(cm}^2 \times \text{s})$ . Gamma spectra of induced activity were measured twice, for 3-5 min after 5-7 minutes of decay and for 10-15 min after 20 min of decay. To process gamma spectra and to calculate concentrations of elements the software developed at FLNP JINR was used [3]. The errors in the concentrations determined were in the range of 10-15% (3-4% for I, 6-7% for Cl, 14-15% for Br)

Quality control was provided by using certified reference materials SRM Rice Flour-1568a, Pine needles-1575a and Apple Leaves-1515, all NIST production, irradiated in the same containers with samples under investigation.

#### **RESULTS AND DISCUSSION**

The level of accumulation of elements by vegetation, including marine vegetation is affected by the internal and external factors. The most important internal factors for macroalgae include: genetic control (species-specific), the stage of ontogenesis, physiological condition; the external ones - the content of elements in the water and their chemical forms, season of the year, character of the flow, river discharge, temperature, anthropogenic impact [1].

The data on halogen content in sea water of different salinity, terrestrial and marine vegetation are given in Table 1.

Ele- ment	Ocean (salinity 35 ‰)	Black Sea (salinity 18 ‰) [4]	Moss (Norway) [2]	Algae Laminariales (Cl) and Fucales (Okhotskoe Sea) [5]	*Algae Fucales (Cystoseira)Blac k Sea	Halogen accumulation coefficient by the Black
Cl	19000	9940	140	98000	30635 *	Sea algae
Br	65	28	4.57	680	288 *	10
Ι	0,05	0.035	2.1	3700	94.4 *	2697

**Table 1.** Mean concentrations of Cl, Br, I in the ocean, the Black Sea and vegetation,  $\mu g/g$ 

Note: \* marks concentrations determined in the present paper

It is established, that changing of concentrations of Cl, Br, I in the stems and branches of *Cystoseira* is expressed by the following regularity: I <Br < Cl that reflects the ratio of these elements in sea water. The low water salinity of the Black Sea results in lower halogen content in the algae if compare with samples from World ocean, but the rates of accumulation of Cl, Br, I in algae from the Black Sea and the ocean are symbatic (3, 10, 2700 and 5, 10, 74000 for Cl, Br and I, respectively). Concentrations of Cl, Br, I, defined in different age parts of the thallus *Cystoseira barbata* and *Cystoseira crinita*, are presented in Table 2 (average data for both *Cystoseira* species).

Parts of	Age,	Cl		Br		Ι	
thallus	year	Spring	Summer	Spring	Summer	Spring	Summer
	< 1	32820	23088	253	276	106	79,1
stem	1 – 3	27000	16275	228	188	92,1	69,0
	3 – 5	19200	12503	166	171	95,0	65,1
	< 1	39440	42600	229	510	106	104
branch	1 – 3	40440	40812	239	400	115	105
	3 – 5	40867	34750	218	376	108	109

**Table 2.** Halogen concentrations in morphostructural elements of different age thallus of *Cystoseira*, μg/g

The maximum concentrations of halogens are observed in thallus under the age of 1 year (Fig. 2), that is consistent with data on more intense accumulation of chemical elements by young plants in the early stages of ontogenesis [6].



Fig. 2. The average concentrations of Br and I in different age stems of Cystoseira, µg/g

The results obtained indicate that the halogens are distributed unevenly in morphostructural elements of thallus. Thus, higher concentrations of all elements are observed in the branches, and the maximum differences is determined for the summer (for Br and Cl concentrations in the branches of a 2-fold greater than in the stems). This may be due to the uneven distribution of elements in biochemical fractions of the studied brown algae thallus [7].

Analysis of the data showed that there are seasonal variations of the concentrations of halogens. Cl content in the stems in the summer is lower of about 1.5-fold if compare with spring season (Fig.3), I of 1.3-1.5-fold, while for Br differences in concentrations in spring

and summer are mild. For branches the other behavior of seasonal concentrations of halogens is observed. The content of Cl and Br is higher in the summer, and for Br the greatest difference between the spring and summer values is observed (2-fold), for I such regularity was not revealed.



Fig. 3. Cl content in stems of *Cystoseira* in spring and summer periods, µg/g

Halogens content in *Cystoseira* from different bays varies considerably (Fig.4, 5). Especially clearly it is expressed for the branches in which the concentration of halogens differs between the bays by a factor of 2-3. The greatest concentration range was observed for Cl, that is probably due to local sources of fresh water inflow or other unknown factors.



**Fig. 4.** Mean concentration of Br and I in stems and branches of *Cystoseira* from different bays (summer time), μg/g



Fig. 5. Cl concentration in stems and branches of *Cystoseira* from different bays (summer time),  $\mu g/g$ 

It is noted that the average content of Cl and Br in the branches and stems of *Cystoseira* from water area of Pavlovskiy cape (Ushakov Gully) is about the same, that is not typical for other bays. Perhaps this is due to less intense water exchange, because the water area of Pavlovskiy cape is located closer to the middle part of Sevastopol Bay. The INAA results on mass epiphytes (macroalgae growing on the studied species of *Cystoseira*) are presented in Table. 3

Sampling site	Species	Cl	K <sub>n</sub> (Cl)	Br	Кn	Ι	Kn (I)
	-				(Br)		
Balaklavskiy	Ceramium						
cape	diaphanum	13900	1	556	19	124	3542
Balaklavskiy	Ceramium						
cape	diaphanum	23900	2	590	21	167	4771
East cape	Chondrya						
(Omega bay)	dasyphylla	62300	6	452	16	107	3057
Pavlovskiy	Cladophora						
cape (Ushakov	albida						
Gully)		95200	9	499	17	100	2857
Northen spit	Polysiphonia						
cape	subulifera	38200	3	19000	678	170	4857
Northen spit	Polysiphonia						
cape	subulifera	42100	4	16100	575	126	3599
Kamyshovaya	Cladophora						
bay (east pier)	albida	102000	10	1220	43	316	9028
Kamyshovaya	Polysiphonia						
bay (east pier)	subulifera	61900	6	22800	<b>814</b>	379	10828

Table 3. Cl, Br, I content and corresponding accumulation coefficients (Kn) in some selected
species of macroalgae – epiphytes, $\mu g/g$

It was found that *Cladophora albida* (green algae) is an accumulator of chlorine and *Polysiphonia subulifera* (red algae) is an accumulator of bromine ( $K_n$  is 2 orders of magnitude higher than those one for *Cystoseira*). The data obtained for *Polysiphonia subulifera*, sampled in the waters of Sevastopol, are in agreement with the concentrations of bromine determined in *Polysiphonia japonica* from the Sea of Japan [1], where bromine conteins in thallus in the form of bromine phenolic compounds.

### CONCLUSION

It is shown that INAA is an accurate and sensitivity method for determining halogens in marine macroalgae. The concentrations of Cl, Br, I in the Black Sea brown algae of the genus *Cystoseira* and some macroalgae – epiphytes were determined. For the first time for water area of Sevastopol the characteristics of accumulation Cl, Br, I in morphostructural elements of different age thallus of algae *Cystoseira* were studied. *Polysiphonia subulifera* is appeared to be the hub of bromine in the Black Sea.

#### REFERENCES

- 1. Saenko G.N. Metals and halogens in marine organisms. Moscow: Nauka, 1992.
- 2. Frontasyeva M.V., Steinnes E. Marine gradients of halogens in moss studied by epithermal neutron activation analysis. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, Vol. 261, No. 1, 2004, p. 101-106.
- 3. Dmitriev A.Yu, Pavlov S.S. Automated quantitative determination of elements in samples by neutron activation analysis at the IBR-2 at the LNP JINR. *Physics of Particles and Nuclei Letters*, Vol. 10, No 1(178), 2013, p. 58-64.
- 4. Dobrjanskaya M.A. The main features of the hydrochemical regime of the Black Sea. *Proceedings of the Sevastopol Biological Station*. Vol. 13, 1960 p. 325-378.
- Saenko G. N., Kravtsova Y. Y., Ivanenko V. V. and Sheludko S. I. Concentration of iodine and bromine by plants in the Seas of Japan and Okhotsk. *Marine Biology*, No 47, 1978, p. 243-250.
- 6. Teyubova V.F. Features of the accumulation of heavy metals in thalli of different ages of species *Cystoseira* (the Novorossiysk Bay, the Black Sea). *Marine ecological journal*, Vol. 10, No 3, 2011, p. 67-75.
- Xiaolin Hou, Xiaojun Yan, Chifang Chai. Chemical Species of Iodine in Some Seaweeds. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, Vol. 245, Issue 3, 2000, p 461-467.

### NUCLEAR AND RELATED ANALYTICAL TECHNIQUES FOR STUDYING DEPOSITION OF TRACE ELEMENTS IN INDUSTRIALLY CONTAMINATED AREAS: THE KARDZHALI LEAD-ZINC IN BULGARIA

S. Marinova<sup>1</sup>, G. Hristozova<sup>1</sup>, A. Marinov<sup>1</sup>, M.V. Frontasyeva<sup>2</sup>, L.P. Strelkova<sup>2</sup>, Z. Goryainova<sup>2</sup>, A.Yu. Dmitriev<sup>2</sup>, T. Stafilov<sup>3</sup>, K. Baceva<sup>3</sup>, I. Vuckovic<sup>3</sup>

<sup>1</sup>University "Paisii Hilendarski", Plovdiv, Bulgaria <sup>2</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia <sup>3</sup>Institute of Chemistry, Sts. Cyril and Methodius University, Skopje, Republic of Macedonia

#### **INTRODUCTION**

The use of terrestrial mosses as biomonitors in large-scale multielement studies of heavy metal deposition from the atmosphere is a well-established technique in Europe. The present study is part of the UN European Cooperative Programme "Atmospheric Heavy Metal Deposition in Europe" aimed at investigating the long-range transboundary air pollution in Europe at 5-year intervals [1]. The results on moss survey in 2011 around the Kardzhali lead-zinc plant (LZP) known for its non-ferrous metal deposits are presented. According to the Ministry of Environment and Water, Kardzhali is one of the ecological "hot spots" in Bulgaria. The manufacturing process in Kardzhali is a major source of contamination with significant amounts of heavy metals and other toxic elements (*e.g.* Pb, Zn, Cd, As, Sn, *etc*) in the soil, water and air. Due to the constant circulation of chemical elements in nature, contaminants such as trace metals and their compounds are effectively deposited onto mosses after being released into the air.

### EXPERIMENTAL

**Study Area.** The study area of about 110 km<sup>2</sup> is located around LZP Kardzhali. It spans 6 km to the North and South and 5 km to the West and East from the plant's chimney (Fig. 1).



Fig. 1. Study area

About 6% of the world zinc deposits and about 3% of the lead deposits are located in Bulgaria. 75% of the leadzinc ore is located in the Rhodope Mountains and over 70% of the total available ore is mined. Annually, LZP

Kardzhali produces 27,200 tons of zinc, 30,000 tons of lead and 45,000 tons of sulfuric acid. After a project to increase lead production in the plant was accepted, the annual production will rise up to 60,000 tons by 2014 [2]. Surveys in the area of Kardzhali, particularly in the last few years, show increased trace metals content in the soil and the plants, including mosses, as a consequence of mining polymetallic ores, flotation and heavy metal production. The approximate size of the land affected by aerogenic lead contamination with higher admissible than the concentrations is about 40,000 da of virgin soil and about 18,000 da of arable lands [3].

**Sampling and sample preparation for NAA and AAS.** A total of 77 moss samples, of which *Hypnum cupressiforme* was the dominant type, were collected according to the sampling strategy of the UNECE ICP Vegetation Programme on atmospheric deposition studies in Europe [1]. For each site 5-10 subsamples were taken within a 50 X 50 m area and were combined in the field.

**NAA.** The unwashed samples were air-dried to constant weight at 40 °C for 48 h, and extraneous plant material was removed. The whole living part corresponding approximately to three years growth of the moss was subjected to analysis. Therefore, the results from the survey represent the average deposition situation over the period 2008-2010 for the elements retained in the moss. Moss samples of about 0.3 g in weight were packed in polyethylene foil bags for short-term irradiation to determine short-lived isotopes, and in aluminum cups for long-term irradiation for determination of long-lived isotopes.

**ICP-AES and AAS.** For ICP-AES and AAS analysis about 0.5 g of moss material was placed in teflon vessel and treated with 7 ml of concentrated HNO<sub>3</sub> and 2 ml  $H_2O_2$  overnight. The procedure was continued with full digestion of moss material in microwave digestion system (Mars, CEM, USA). Digestion was carried out in two steps: (1) ramp: temperature 180 °C, 10 min ramp time, power of 400 W and pressure 20 bar; (2) hold: temperature 180 °C, 20 min hold time, power of 400 W and pressure 20 bar. Digests were filtrated and quantitatively transferred to 25 ml calibrated flasks.

## Analysis

**NAA** was performed in the radioanalytical laboratory at the pulsed fast reactor IBR-2 of the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia [4]. Long-lived isotopes were determined using epithermal neutrons in cadmium-screened irradiation channel with neutron flux density  $\Phi_{epi} = 3.6 \times 10^{11} \text{ n/(cm}^2 \times \text{s})$ . Samples were irradiated for 5 d, repacked and then measured twice after 4–6 and 20 d of decay, respectively. Measuring time varied from 1 to 5 h. To determine the short lived isotopes (Cl, V, I, Mg, Al, and Mn) conventional irradiation channel was used. Samples were irradiated for 3 min and measured twice after 2–3 min and the second one for 20 min after 9–10 min of decay.

**ICP-AES** and **AAS** were carried out at the Sts. Cyril and Methodius University, Skopje, Macedonia. Atomic emission spectrometer with inductively coupled plasma, ICP-AES (Varian, 715ES), was used for analyzing the content of Ag, Cd, Cu, Li, P, and Pb. The optimal operating instrument performances are given in Table 1. ICP-Multielement standard solution IV (Merck) with concentration of 1000 mg L<sup>-1</sup> was used for preparing standard solutions. Mercury was determined by cold vapour AAS (Varian, SpectrAA 55B), using a continuous flow vapour generation accessory (Varian, VGA-76). Optimal instrumental parameters for both techniques are given previously [5, 6].

## **RESULTS AND DISCUSSION**

A total of 77 samples were analyzed. The results of the descriptive statistical analysis of the elemental concentrations determined in the moss samples (min, max, mean and median) are given in **Table 1** along with data for the neighboring Macedonia [6]. For comparison, the corresponding values for the Norwegian moss data representing territories with minor influence from air pollution [7] are given in the same table.

Multivariate statistics (factor analysis) was used to identify and characterize different pollution sources. The results of factor analysis are presented in **Table 2**.

Ele- ments	Bulgaria, LZP		Mace	donia [6]	Norway [7]		
т . А	median	<b>range</b>	median	range	median	range	
L1* Na	1.49	179-9710	410	118 8673			
Ina Ma	0/3	366-3740	419	674 7421	-	- 040 2370	
A1	16300	4120-76400	2377	825 17600	200	67 820	
AI D*	088	405-1831	5750	823-17000	200	07-820	
	160	77 10-601	140	13 603			
K	7250	3650-30900	8615	2861-18190			
к Са	11/00	5520-21700	5593	1207-23640	2820	1680-5490	
Ca Sc	2 25	0.12-13	0.81	0 12-6 79	0.052	0.009-0.220	
Ti	672	170-3990	163	12-1365	23.5	12 4-66 4	
V	17.9	6.30-124	69	1 79-43	0.92	0 39-5 1	
Cr	13.3	2.71-260	0.9 7 47	2 33-122	0.55	0.10-4.2	
Mn	450	56-3380	186	37-1475	256	22-750	
Fe	5800	1250-32400	2458	424-17380	209	77-1370	
Co	2 47	0.43-23.50	1 09	0 24-13 6	0.202	0.065-0.654	
Ni	9.48	1.4-213	24	0.09-24	1 14	0.12-6.6	
Cu*	13 69	7-126	2.4	0.09-24	1.14	0.12-0.0	
Zn	185	25-3750	39	14-203	26.5	7 9-173	
As	2.83	0.48-22.40	0.80	0.12-8.0	0.093	0.020-0.505	
Se	0.43	0.07-2.54	0.18	0.013-0.61	0.33	0.05-1.30	
Br	6.42	1.66-19.50	2.16	0.06-7.7	4.5	1 4-20 3	
Rh	24.8	6.93-229	10.9	5-47	77	1.1.20.5	
Sr	21.0 71.2	19.50-527	31	11.8-136	15.8	3 6-43 3	
Mo	0.49	0.12-1.78	0.19	0.03-1.12	0.135	0.065-0.70	
Ag*	0.57	0.14-4.43	0.17	0.00 1.12	0.120	0.000 0.70	
Cd*	1.85	0.19-21.11	0.16				
In	0.05	0.0003-0.42	_	_	_	_	
Sb	2.07	0.14-46.50	0.2	0.039-1.4	0.033	0.004-0.240	
I	2.18	0.90-7.71	1.18	0.36-2.8	2.5	0.6-41.7	
Cs	1.32	0.19-8.81	0.39	0.097-1.7	0.072	0.016-0.88	
Ba	164	35-1050	54	14-256	17.1	5.6-50.5	
La	6 38	0.92-40.60	2.32	0.50-22	0.189	0.045-2.56	
Ce	14.5	1.67-91.30	5.60	0.83-42	0.342	0.095-4.61	
Sm	1 1.5	0.20-7.47	0.46	0.07-3.4	0.33	0.05-1.34	
Tb	0.15	0.03-0.94	0.06	0.01-0.56	0.003	< 0.002-0.030	
Dv	0.95	0.03-6.24					
Hf	0.93	0.21-7.62	0.26	0.05-3.8	_	_	
Та	0.18	0.04-1.38	0.09	0.013-0.79	0.01-	< 0.01-0.07	
W	0.47	0.10-3.43	1.21	0.25-3.9	0.127	0.009-1.23	
Au	0.002	0.001-0.024	0.0061	0.001-0.034	_	_	
Hg**	0.05	0.03-0.14	0.056				
Pb*	124.85	4.21-2168	6.00				
Th	2 70	0.24-21.60	0.67	0.12-7.6	0.033	0.004-0.240	
U	0.60	0.10-5.22	0.21	0.03-1.45	0.015	0.001-0.138	
	0.00						

Table 1. Comparison of the results obtained with Macedonia and Norway, mg/kg

\*determined by ICP-AES; \*\*determined by AAS

Vari- ables	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
Li	0,52	-0,10	0,39	-0,15
Na	0,83	0,12	0,16	-0,10
Mg	0,70	-0,13	0,48	0,15
Al	0,85	-0,13	0,27	0,04
Р	0,03	0,15	-0,09	0,59
Cl	0,02	0,13	-0,28	0,60
K	0,84	0,19	-0,14	0,19
Ca	0,28	-0,06	-0,06	0,35
Sc	0,69	-0,15	0,35	-0,05
Ti	0,71	-0,19	0,43	-0,13
V	0,63	-0,09	0,48	-0,20
Cr	0,13	0,07	0,84	0,09
Mn	0,23	-0,18	0,21	0,47
Fe	0,79	-0,05	0,44	-0,10
Со	0,46	0,02	0,79	0,03
Ni	0,08	0,08	0,85	0,09
Cu	0,03	0,90	-0,12	-0,07
Zn	0,05	0,94	-0,02	0,05
As	0,19	0,68	0,53	0,22
Se	-0,03	0,80	0,07	0,16
Br	-0,08	0,27	0,29	0,73
Rb	0,81	0,14	-0,11	0,32
Sr	0,77	0,03	-0,22	0,03
Мо	0,66	0,42	0,13	0,23
Ag	0,04	0,96	0,00	-0,05
Cd	0,08	0,97	-0,04	0,05
In	0,17	0,89	0,06	0,06
Sb	0,06	0,96	-0,08	0,02
Ι	0,03	0,05	0,35	0,77
Cs	0,77	0,09	-0,10	0,30
Ва	0,81	0,03	0,05	0,05
La	0,89	0,12	0,21	0,02
Ce	0,92	0,14	0,20	0,05
Nd	0,77	0,30	0,09	0,04
Sm	0,93	0,04	0,18	0,02
Tb	0,89	0,08	0,25	-0,03
Dy	0,81	-0,06	0,31	-0,03
Tm	0,62	0,11	0,54	-0,03
Yb	0,89	0,06	0,23	0,05
Hf	0,90	0,09	0,16	-0,04
Та	0,88	0,05	-0,03	0,24
W	0,78	0,10	0,07	0,18
Au	0,07	0,63	0,15	0,11
Hg	0,12	0,70	-0,07	0,45
Pb	0,06	0,98	-0,03	-0,05
Th	0,93	0,15	-0,01	0,13
U	0,90	0,23	-0,01	0,13
Expl.	17,90	8,96	4,71	3,05

**Table 2.** Factor analysis of data on mosssamples collected in the vicinity ofKardzhali LZP (Varimax normalized)

**Factor 1** has high loadings for Na, Mg, Al, Sc, and Ti, which are typical representatives of light crustal material (silicate rocks) and V and Fe, which could be attributed to a basaltic component. Rare earth elements (REEs), Hf, Ta, U, and Th are soil indicators, typical for heavy crustal material, and partly reflect the contamination of moss samples with soil particles. K, Rb, Sr, Mo, Cs, Ba are most likely of vegetation origin.

**Factor 2** characterizes the Kardzhali LZP productions: high loadings for Cu, Zn, As, Se, Ag, Cd, In, Sb, Au, Hg, and Pb. This group of elements correlates very well with the metal contamination of surface soils around the lead and zinc smelter in the Republic of Macedonia [8]. GIS maps for elemental distribution of Pb, Zn, In, and Sb from this factor were built using AcrGIS 9.3 and presented in Fig. 2.

**Factor 3** High values for V, Cr, Co, and Ni in this factor are associated with contamination from some metallurgical industry.

**Factor 4** High values for Cl, Br, and I are usually considered as "marine" elements reflecting the proximity of the sampled area to the Black Sea.

#### CONCLUSIONS

As evident from the median values in Table 1, the study area around the Kardzhali LZP is considerably more polluted compared to previously obtained data for other areas of Bulgaria [9]. The obtained results were submitted to the European Atlas of heavy metal atmospheric deposition (moss survey 2010/2011) edited under the auspices of the UNECE ICP Vegetation Program.



Fig. 2. Geographical distribution maps of Pb, Zn, In, and Sb relevant to anthropogenic factor 2

**Acknowledgments.** The authors acknowledge the grant of Plenipotentiary of Bulgaria at JINR (JINR Order # 245 of 14.04.2011).

#### REFERENCES

- 1. International Cooperative Programme on Effects of Air Pollution on Natural Vegetation and Crops: Heavy metals in European mosses. http://icpvegetation.ceh.ac.uk/
- 2. http://geografia.kabinata.com/22.htm
- 3. D. Yancheva, L. Stanislavova, Scientific Conference "Ecology and Health", Plovdiv, 298-302, (2006).
- 4. M.V. Frontasyeva, Neutron activation analysis for the Life Sciences. A review. *Physics of Particles and Nuclei*, **42(2)**, 332-378 (2011).
- 5. B. Balabanova, T. Stafilov, K. Bačeva, R. Šajn, Biomonitoring of atmospheric pollution with heavy metals in the copper mine vicinity located near Radoviš, Republic of Macedonia, *Journal of Environmental Science and Health, Part A*, **45**, 1504–1518 (2010).
- 6. L. Barandovski, M. Cekova, M.V. Frontasyeva, S.S. Pavlov, T. Stafilov, E. Steinnes, V. Urumov, *Environmental Monitoring and Assessment*, **138**, 107-118, (2008).
- 7. E. Steinnes *et al*, Atmospheric Deposition of Heavy Metals in Norway, Nation-Wide Survey in 2005, State Program for Pollution Monitoring, Report 980/2007. Norwegian State Pollution Control Authority, Oslo, **36**, (2007). (In Norwegian)
- 8. T. Stafilov, R. Šajn, Z. Pančevski, B. Boev, M.V. Frontasyeva, L.P. Strelkova, *Journal of Hazardous Materials*, **175(1-3)**, 896-914 (2010).
- 9. S. Marinova, L. Yurukova, M.V. Frontasyeva, E. Steinnes, L.P. Strelkova, A. Marinov, A.G. Karadzhinova, *Ecological Chemistry and Engineering*, **17**(1), 37-52 (2010).

# ELEMENTAL ANALYSIS OF MOSSES AND LICHENS FROM THE WESTERN CAPE PROVINCE (SOUTH AFRICA) DETERMINDED BY ENAA AND ICP-MS – FIRST RESULTS

# N.B. Ndlovu<sup>1,3</sup>, M.V. Frontasyeva<sup>2</sup>, R.T. Newman<sup>1</sup>, P.P. Maleka<sup>3</sup>, R. Botha<sup>1</sup>, I.I. Zinicovscaia<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Physics Department, Stellenboch University, Republic of South Africa <u>nbndlovu@sun.ac.za</u>

<sup>2</sup> Sector of Neutron Activation Analysis and Applied Research, Division of Nuclear Physics, Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

<sup>3</sup>*iThemba LABS, National Research Foundation, Somerset West, Republic of South Africa* 

### **INTRODUCTION**

Monitoring and managing air quality is an important activity globally. This is because polluted air can be harmful to human health and other parts of ecosystems. Many studies of air pollution have been done internationally, including South Africa. However, our literature survey shows that most of South African air pollution studies have been based on measuring the particulate matter (PM) levels and concentrations of "classical" pollutants like carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), carbon monoxide (CO), ozone (O<sub>3</sub>), benzene (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) and different compounds of nitrogen (N) and sulfur (S). These measurements are traditionally made by pumping air through filters and subsequently analyzing the filters or residual air. According to [1], some chemical elements are also known to have an adverse effect on living organisms and the worst toxicants are believed to be heavy metals. Biological monitoring with mosses and lichens is a low-cost, effective method to determine trace and other elements in the atmosphere. Mosses and lichens possess efficient accumulation capacity for many air pollutants and therefore show an integrated response to air pollution [2, 3]. Here we report first (preliminary) results of element concentrations measurements in mosses and lichens sampled in the Western Cape Province of South Africa. The concentrations were determined using Epithermal Neutron Activation Analysis (ENAA) and Inductively Coupled Mass Spectrometry (ICP-MS).

### MATERIALS AND METHODS

#### Sampling and sample preparation

Sampling of mosses and lichens was carried out in the Western Cape Province, South Africa. In total, 30 samples of mosses (14 samples) and lichens (16 samples) were collected during March-April 2012 from six areas (Fig. 1). Lichens were generally found to be more abundant in the study region. Samples were not washed but cleaned by removing surface contamination of all external plant material and visible soil contamination. Where possible sampling was performed in accordance with the guidelines specified in the monitoring manual for atmospheric deposition of heavy metal deposition using bryophytes, prepared by the United Nations Economic Commission for Europe - International Cooperative Programme (UNECE-ICP) on Effects of Air Pollution on Natural Vegetation and Crops [4]. All samples were dried to constant weight at room temperature and cleaned but were not subjected to further washing. Samples were then pelletized and sorted for irradiation.



Fig. 1. Sampling sites in the Western Cape Province (South Africa) used in this study

### Analysis

**ENAA** was performed at the radioanalytical complex REGATA at the pulsed fast reactor IBR-2. The description of the irradiation channels and pneumatic transport system of the IBR-2 is given in [3]. To determine long lived isotopes: Na, Sc, Cr, Fe, Co, Ni, Zn, As, Se, Rb, Sr, Zr, Mo, Sb, Cs, Ba, La, Ce, Sm, Eu, Tb, Dy, Hf, Ta, W, Th, and U, cadmium screened channel 1 was used. Samples were irradiated for 4 days and repacked and measured, using high purity germanium detectors, twice, after 4 and 20 days of decay, respectively. To determine short lived isotopes Mg, Al, Cl, K, Ca, Ti, V, Mn, Br and I irradiation channel 2 was used. Samples were irradiated for 3 min and measured twice after 3–5 min and 20 min of decay for 3 min and 9–10 min respectively. Element contents were determined on the basis of certified reference materials using software developed in FLNP JINR [3].

**ICP-MS** measurements were performed at the Central Analytical Facilities (CAF), Stellenbosch University, Stellenbosch, South Africa, using an Agilent 7700x ICP-MS with Octupole Reaction System. Samples were dried at 40 °C in a laboratory oven for 3 days. After the drying process, samples were milled in IKA A10 analytical mill. About 0.3 g of each sample was weighed and transferred into a microwave vessel and about 10 ml HNO<sub>3</sub> was added into each vessel. Samples were left to stand open for 20 minutes to predigest before the vessels were sealed and commencing with the microwave heating process. About 40 g of deionised water was weighed and added in a sample bottle that was cleaned in 1% HNO<sub>3</sub> and then added to the digest sample in the microwave vessel to make up 50 ml. Samples were stirred in the microwave vessel, transferred to the sample bottle and then subjected to the ICP-MS.

#### **RESULTS AND DISCUSSION**

A total of 44 elements were identified and their concentrations determined. Sixteen elements were detected by both ENAA and ICP-MS whereas 18 element concentrations were only obtained by ENAA. Furthermore, a set of 10 element concentrations were only obtained by ICP-MS. The mean ratios from ICP-MS data (4 samples considered) and ratios from ENAA data (2 samples considered) of elemental concentrations in mosses to those in lichens are plotted in Fig. 2 and Fig. 3, respectively. Our results show evidence that mosses are generally more effective than lichens in concentrating trace and other elements. The effect of moss and lichen age on results however still has to be studied.



**Fig. 2.** Mean ratios of elemental concentrations in mosses to those in lichens (4 samples considered, ICP-MS data only). The average of the mean ratios is indicated by the dotted line



**Fig. 3.** Ratios of elemental concentrations in mosses to those in lichens (2 samples considered, ENAA data only). The average of the ratios is indicated by the dotted line

The ratios of element concentrations in lichens (this study) to those found by Olowoyo et al. [6] in lichens from Pretoria (South Africa) are plotted in Fig. 4. The results show that concentrations of the seven elements considered are generally lower for Western Cape lichens. The lower values point to reduced levels of air pollution in the Western Cape relative to Pretoria (Gauteng Province).

In order to compare some of our moss data with European data [5] we plot the median moss element concentrations alongside corresponding concentrations for European countries (Fig. 5). The Pb concentrations were found to be significantly larger in Western Cape.



**Fig. 4.** Median ratio of element concentrations in Stellenbosch lichens (16 samples; ICP-MS data only) to corresponding results in lichens from Pretoria [6]. The average of the median ratios is indicated by the dotted line.





**Fig. 5.** ((a)-(d). Comparing median concentrations of Pb, Zn, V and Cr in moss from the Western Cape, South Africa with corresponding European data [5]. (our Pb data from ICP-MS results and our remaining data from ENAA results)

## SUMMARY AND CONCLUSION

The first preliminary results of element concentrations in mosses and lichens from the Western Cape, South Africa have been obtained. The results were generated from 30 samples (16 lichens and 14 mosses). Our results indicate that mosses are generally more efficient at concentrating trace and other elements. An analysis of our lichen concentration data and comparison with corresponding published results for Pretoria [6] provides evidence for reduced atmospheric deposition in the Western Cape. A comparison of Pb, Cr, Zn and V concentrations (in mosses) in relation to European data indicates that lead concentrations in the Western Cape are enhanced. Further sampling and irradiations are being planned for 2013.

#### ACKNOWLEDGEMENTS

The authors are grateful to the National Research Foundation (South Africa) for a grant under the South Africa – JINR programme to partly fund this project.

#### REFERENCES

- 1. Frontasyeva. M. V., (2011), Neutron activation analysis for the Life Sciences. A review. "Physics of Particles and Nuclei", **42**(2), p. 332-378.
- 2. Frontasyeva M.V., Pavlov S.S., (2000), Analytical investigations at the IBR-2 reactor in Dubna. JINR Preprint E14-2000-177.

- 3. Dmitriev A. Yu., Pavlov S.S., (2013), Automatization of quantitative determination of element concentrations in samples by neutron activation analysis at the reactor IBR-2 FLNP JINR, *Physics of Particles and Nuclei Letters*, Vol. 10, No 1(178), 2013, p. 58-64.
- 4. Harmens. H., (2010), Heavy Metals in European Mosses: 2010 Survey Monitoring Manual. ICP Vegetation Coordination Centre (VCC), United Kingdom.
- 5. Harmens. H., Norris, D. and the participants of the moss survey, (2008), Spatial and temporal trends in heavy metal accumulation in mosses in Europe (1990-2005). Programme Coordination Centre for the ICP Vegetation, United Kingdom.
- 6. Olowoyo, J.O., Van Heerden, E., Fischer, J.L., (2011), Trace element concentrations from lichen transplants in Pretoria, South Africa. *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **18**, p. 663-668.

### NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS USED TO STUDY BIOSORBTION OF ZINC IN WATER BY SPIRULINA PLATENSIS

I. Zinicovscaia<sup>1,3\*</sup>, Gh. Duca<sup>1</sup>, V. Rudic<sup>2</sup>, L. Cepoi, T. Chiriac<sup>2</sup>, M. V. Frontasyeva<sup>3</sup>, S. S. Pavlov<sup>3</sup>, S. F. Gundorina<sup>3</sup>

<sup>1</sup>The Institute of Chemistry of the Academy of Sciences of Moldova, 3, Academiei Str., 2028 Chisinau, R. Moldova

<sup>2</sup>Institute of Microbiology and Biotechnology of the Academy of Science of Moldova, 1, Academiei Str., 2028 Chisinau, R. Moldova

<sup>3</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna

#### **INTRODUCTION**

Zinc is the second after iron most abundant microelement in all living organisms including human beings (Vasak and Hasler, 2000). It is the co-factor of more than 300 enzymes, providing structural stability of a large number of proteins, including signaling proteins at all levels of signal cell transduction (Beyersmann, 2002; Chasapis et al., 2012; Rink L, Gabriel, 2000).

The problem of zinc accumulation in the environment has two opposite aspects. Being an essential bio-element for living organisms, its absence or insufficiency can cause major disruption of the metabolic processes. From this perspective zinc accumulation in the environment by living organisms with the purpose to satisfy their own needs is a vital issue. (Chasapis et al., 2012).

The second aspect of the zinc accumulation in the environment is related to its toxicity for living organisms, when its concentrations exceed cellular tolerance limits. Being used in electroplating (anti-corrosion agent) (Zhang, 1996), alloys, pigments in paints, organic synthesis (Heiserman, 1992), agriculture (Ullmann's Agrochemical, 2007) zinc finds its way into the aquatic environment, resulting in an advanced level of pollution.

Cyanobacteria *Spirulina platensis* are widely used for accumulation of toxic elements such as mercury (Disyawongs, 2002; Frontasyeva et al., 2006), nickel, copper (Doshi et al., 2007; Disyawongs, 2002; Solisio et al., 2006), chromium (Doshi et al., 2007; Frontasyeva et al., 2006; Madrid et al., 1998), antimony (Madrid et al., 1998), lead (Disyawongs, 2002), uranium (Cecal et al., 2012).

The aim of the present paper is to study the processes of zinc biosorption by *S. platensis* biomass from standard solutions in short-duration experiments.

#### **MATERIALS AND METHODS**

#### Sample preparation

To carry out the experiments, algological pure culture of *Spirulina platensis CNM-CB-02* strain from National Collection of Nonpathogenic microorganisms (Institute of Microbiology and Biotechnology, Academy of Science of Moldova) was used. The cultivation of spirulina was carried out in an open-type tank with a volume of 60 L, pH 8–9 and at constant mixing. The cultivation of the *S. platensis* cells was conducted for 6 days (Rudic et al., 2002).

The spirulina biomass after 6 days of cultivation was separated from the nutritive environment by vacuum filtration. The biomass was washed with distilled water and repeated filtration.

To determine the biosorption of Zn cations by *Spirulina platensis*, 0.75g of biomass was suspended in 100 ml of  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$  solution (concentration 0.34 mM and 3.4 mM) in 250-mL glass flasks on a rotary shaker set at 100 rpm. The dynamics of the adsorption processes was studied during 1 hour. The samples were obtained in 5, 15, 30, and 60 minutes.

#### Neutron activation analysis

The elemental content of the samples was determined by neutron activation analysis (NAA) at the pulsed fast reactor IBR-2 (FLNP JINR, Dubna).

The first set of samples (concentration of  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O \ 0.34 \text{ mM}$ ) was irradiated for 2 days and their activity measured in 4 days. The zinc content was determined by  $\gamma$ -line with the energy of 1115.5 keV of isotope <sup>65</sup>Zn. The second set of samples (concentration of  $ZnSO_4 \cdot 7H_2O \ 3.4 \text{ mM}$ ) was irradiated for 30 min and Zn content was determined by  $\gamma$ -line with the energy of 438.6 keV of isotope <sup>69m</sup>Zn.

The quality control of analytical measurements was carried out using the certified standards for biological samples – Trace elements in pine needles (NIST, 1575a), San Joaquin soil (NIST, 2709), Montana Soil (NIST, 2710 and 2711).

The NAA data processing and determination of element concentrations were performed using the software developed in FLNP JINR [Dmitriev and Pavlov, 2013].

#### **Results and discussions**

The conventional techniques to remove toxic metals such as ion exchange and precipitation are considered to be inefficient and too expensive when the zinc ion concentration in the aquatic environment is lower than 100 mg/l. In our case in the first experiment the concentration of zinc was 22.6 mg/l. In the second experiment the concentration of zinc in solution was higher. In this case the microbial metal removal and traditional technologies of water purification can be efficiently applied.

The results referring to the zinc content in the spirulina biomass are presented in Fig. 1.



Fig. 1. Zn(II) adsorption by *Spirulina platensis* cells at ZnSO<sub>4</sub> concentration: (a) 0.34mM; (b) 3.4Mm

In the case of zinc sulfate with a concentration of 0.34 mM the zinc content in biomass during the first 5 min of interaction grows up from 50 to 900  $\mu$ g/g and further accumulation is observed, no saturation occurs. The rate of biosorption of zinc from solutions after the first five minutes of contact decreases gradually, but stable growth is recorded within 60 minutes of contact.

From the solution of zinc sulfate (0.34 mM) the spirulina biomass accumulated about 56% of zinc ions (1700  $\mu$ g/g).

At the ZnSO<sub>4</sub> concentration of 3.4 mM (Fig.1b) the rate of metal removal from solution was very rapid in the first 5 min (from 50 to 9000  $\mu$ g/g) then it did not change significantly. In this case the spirulina biomass accumulated 6.75mg of zinc ions from 22.6mg present in 100 ml of solution.

The extension of the contact time of interaction of 3.4mM zinc sulfate solution with the spirulina biomass does not lead to the additional accumulation of the metal ions. Thus, in the case of a high concentration of zinc ions in the solution the efficiency of the spirulina biomass as a sorbent is lower.

In the spirulina biomass other metal cations such as Na, K, Au, Br were determined. The data for Na and K are presented in Fig. 2. Their concentration in the spirulina biomass decreases simultaneously with an increase in the zinc content. Thus, in the first 5 min of the spirulina-zinc sulfate interaction (concentration 0.34 mM) the sodium content decreases from 15 mg/g to 7 mg/g, and potassium – from 18 mg/g to 12 mg/g. The Na ion concentration does not change significantly any further, while that of potassium continues to decrease, and reaches the value of 4 mg/g within 60 min.

The decrease of the Na and K content in the spirulina biomass can be explained in two ways. Firstly, due to the excess of zinc ions in the cultivation medium. Secondly, it is an indicator of state of stress to which the culture is subjected, as long as it keeps its physiological activity.



Fig.2. Concentration of Na and K (µg/-652,5g) in S. platensis cell at ZnSO<sub>4</sub> concentration of 0.34 mM

The same reasons indicated below can also be involved in the decrease of other nonessential elements, such as Au, Br, U, As, Sb, Np, whose concentration was also determined.

In Fig. 3, as an example, the content of Au and Br in spirulina samples at the  $ZnSO_4$  concentration of 0.34 mM is given. The role of gold in living organisms is poorly studied, though practically all living cells contain this metal in trace amounts. In the given case, the solution of zinc sulphate is apparently the factor, which is responsible for the elimination of gold from cells, and this process is especially intensive during the first five minutes of contact of the biomass with the solution, with the content of gold in the biomass decreasing 4 times.

Bromine ions enter into the composition of different bromine organic compounds including alkanes, terpenes, polyketides and peptides, which are found in the biomass of various organisms including microalgae and cyanobacteria [Caicedo et al., 2011; Plaza et al., 2010; Murphy, 2010]. As can be seen in Fig. 3, when the spirulina biomass is placed in the solution of zinc sulphate, the bromine content in the cells decreases significantly. As in the case of potassium and sodium, this process can be associated with some disturbances in membrane permeability and functional activity of the cells.



Fig.3. Concentration of Au and Br (µg/g) in S. platensis cell at ZnSO<sub>4</sub> concentration 0.34mM

### CONCLUSIONS

The potential application of microorganisms for water treatment is an efficient method. *Spirulina* biomass can be successfully used for zinc removal from wastewater at low zinc concentration, when conventional techniques are unprofitable. Spirulina cyanobacteria can be efficiently used for the processes of water post-treatment and as a matrix for zinc-containing drugs.

#### REFERENCES

Beyersmann D., (2002), Mat Wiss U Werkstofftech, 33, 764-769.

Caicedo N.C., Heyduck-Söller B., Fischer U., Thöming J., (2011), J. Appl. Phycol., 23, 811-818.

Cecal Al., Humelnicu D., Rudic V., Cepoi L., Ganju D., Cojocari A., (2012), *Bioresource Technol.*, **118**, 19-23.

Chasapis C.T., Loutsidou A.C., Spiliopoulou C.A., Stefanidou M.E., (2012), Arch. Toxicol., 86, 521-534.

Disyawongs G., (2002), The Journal of KMITNB, 12, 1-4.

Dmitriev A. Yu., Pavlov S.S., (2013), Particles and Nuclei, 10(1), 58-64.

Doshi H., Ray A., Kothari I.L., (2007), Biotechnol. Bioeng., 96, 1051-1063.

Frontasyeva M. V., Kirkesali E. I., Aksenova N. G., Mosulishvili L. M., Belokobylsky A. I., Khizanishvili A.I., (2006), *J. Neutron Res.*, **14**, 131–137.

Heiserman D.L., (1992), *Exploring Chemical Elements and their Compounds*, TAB Books, New York, 65-69.

Madrid Y., Barrio-Cordoba M. E., Cámara C., (1998), Analyst, 123, 1593-15.

Murphy C. D., (2010), Halogenated Organic Compounds – Carbon-Halogen Bond Formation. In: Handbook of Hydrocarbon and Lipid Microbiology, Timmels K.N. (Ed.), Springer Berlin Heidelberg, 375-383.

Plaza M., Santoyo S., Jaime L., García-Blairsy R. G., Herrero M., Señoráns F.J., Ibáñez E., (2010), J. Pharm.Biomed. Ana. 51, 450-455.

Rink L., Gabriel P., (2000), Zinc and the immune system, *Proceedings of the Nutrient Society*, **4**, 541–552.

Rudic V., Gudumac V., Bulimaga V., Dencicov L., Ghelbet V., Chiriac T. the methods of investigation in phytobiotechnology, (2002), Handbook, (in Romanian), CE USM, Chisinau, Republic of Moldova.

Ullmann's Agrochemicals, (2007), Wiley-Vch (COR), ISBN 3527316043.

Vasak M., Hasler D.W., (2000), Curr. Opin Chem. Biol., 4, 177–183.

Zhang X. G., (1996), Corrosion and Electrochemistry of Zinc. Springer, 93.