XVI INTERNATIONAL CONFERENCE

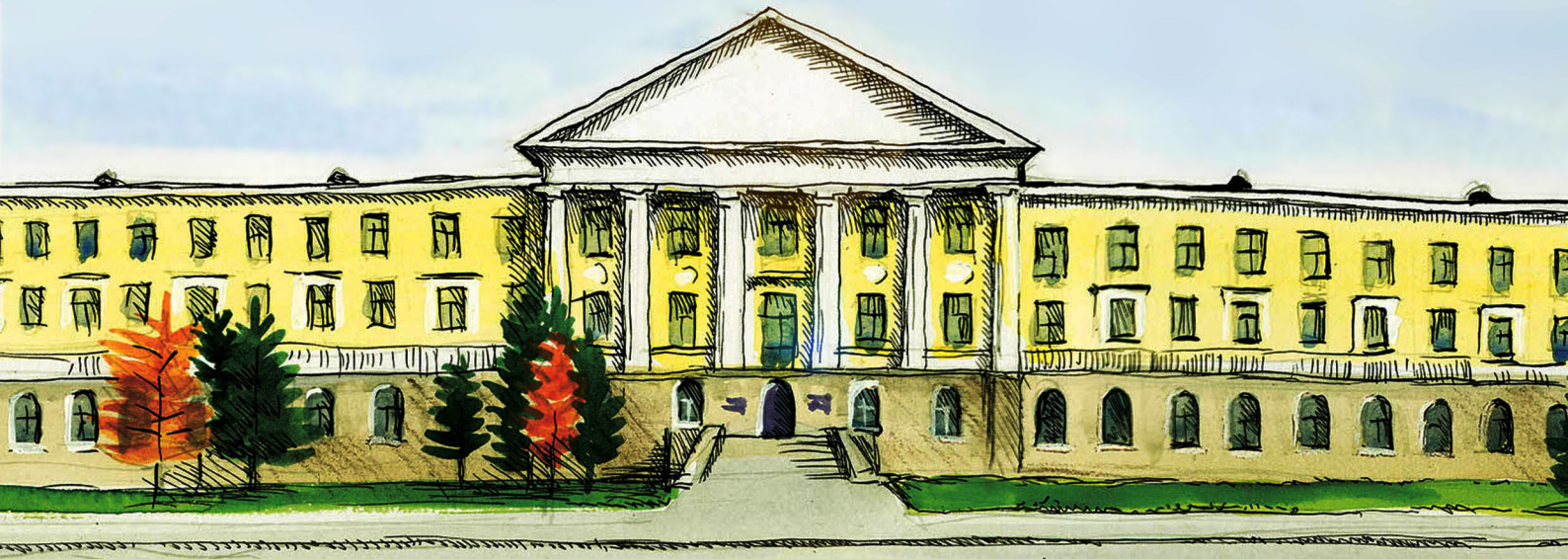
MÖSSBAUER SPECTROSCOPY AND ITS APPLICATIONS

XVI ICMSA

5–9 September 2022

Ekaterinburg, Russia

Book of Abstracts and Program



Институт физики металлов УрО РАН
Уральское отделение Российской академии наук
Уральский федеральный университет
Московский государственный университет
ООО «Сигнифика»

XVI Международная конференция

МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЯ

4-9 сентября 2022 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Екатеринбург
2022

УДК 538.9+53.043+543.429.3

ББК 22.344

Мёссбауэровская спектроскопия и её применения: тезисы докладов XVI Международной конференции (Екатеринбург, 4 – 9 сентября, 2022 г.) Екатеринбург: Изд-во ИФМ УрО РАН, 2022. – 208 с.

ISBN 978–5–6045774–5–5

Сборник включает в себя программу конференции и тезисы докладов участников XVI Международной конференции «Мёссбауэровская спектроскопия и её применения», проводившейся в г. Екатеринбурге 4 – 9 сентября 2022 г.

© Авторы, содержание тезисов, 2022

© ИФМ УрО РАН, оформление, 2022

XVI Международная конференция

«Мессбауэровская спектроскопия и ее применения»

4 – 9 сентября, 2022, **г. Екатеринбург, Россия**

Уважаемые коллеги!

В период с 4 по 9 сентября 2022 г. в Екатеринбурге проводится 16 международная конференция «Мёссбауэровская спектроскопия и ее применения» (XVI ICMSA).

Целью проведения настоящей конференции является предоставление специалистам, работающим в области мёссбауэровской спектроскопии, возможности представить результаты своих исследований, обсудить с коллегами новые идеи и найти партнеров для проведения дальнейших исследований.

Организаторы конференции:

Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН (ИФМ УрО РАН)
Уральское отделение Российской академии наук (УрО РАН)
Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (УрФУ)
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (МГУ)
ООО «Сигнифика»

Тематика конференции включает разделы:

1. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме
2. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры
3. Перспективные материалы и современные технологии их получения
4. Биологические и медицинские применения
5. Синхротронное излучение и гамма-оптика
6. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие
7. Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь
8. Техника эксперимента и методология

Оргкомитет XVI ICMSA выражает благодарность спонсорам конференции:

Институт физики металлов УрО РАН (Екатеринбург)
ЗАО «РИТВЕРЦ» (Санкт-Петербург)
НИИ Физики Южного федерального университета (Ростов-на-Дону)

Оргкомитет конференции

Председатель Оргкомитета конференции
Н.В. Мушников, Екатеринбург

Сопредседатель
А.С. Сигов, Москва

Члены Оргкомитета
М.А. Андреева, Москва
Ф.Г. Вагизов, Казань
Е.В. Воронина, Казань
В.Г. Гаврилюк, Киев, Украина
Г.А. Дорофеев, Ижевск
В.Ю. Иванов, Екатеринбург
К.К. Кадыржанов, Нур-Султан, Казахстан
А.С. Камзин, Санкт-Петербург
А.А. Камнев, Саратов
Т.Ю. Киселева, Москва
К.А. Козлов, Екатеринбург
С.П. Кубрин, Ростов-на-Дону
И.С. Любутин, Москва
M. Mašlan, Olomouc, Czech Republic
M. Miglierini, Bratislava, Slovakia
D.L. Nagy, Budapest, Hungary
В.В. Овчинников, Екатеринбург
М.И. Оштрах, Екатеринбург
Ю.Д. Перфильев, Москва
В.С. Покатилов, Москва
В.В. Попов, Екатеринбург
И.А. Пресняков, Москва
Б.И. Рогозев, С.-Петербург
В.С. Русаков, Москва
В.В. Сагарадзе, Екатеринбург
Э.К. Садыков, Казань
Д.А. Сарычев, Ростов-на-Дону
В.А. Семёнкин, Екатеринбург
В.Г. Семенов, Санкт-Петербург
С.С. Старчиков, Москва
Л.Р. Тагиров, Казань
К.В. Фролов, Москва
В.М. Черепанов, Москва
Н.И. Чистякова, Москва
М.А. Чуев, Москва
А.И. Чумаков, Grenoble, France
В.А. Шабашов, Екатеринбург

Программный комитет

Председатель Программного комитета
В.С. Русаков, Москва

Члены программного комитета
Е.В. Воронина, Казань
М.И. Оштрах, Екатеринбург
И.А. Пресняков, Москва
В.Г. Семенов, Санкт-Петербург
Г.В. Смирнов, Москва
А.В. Соболев, Москва
К.В. Фролов, Москва
М.А. Чуев, Москва

Председатель локального комитета
В.А. Шабашов

Ответственный секретарь
К.А. Козлов

Члены локального комитета
И.В. Аленькина
С.В. Афанасьев
М.В. Горюнов
А.Е. Заматовский
Н.В. Катаева
К.А. Ляшков
А.А. Максимова
С.П. Наумов
Д.А. Перминов
А.В. Протасов
М.В. Ушаков

Председатель молодежной школы
И.А. Пресняков, Москва

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Понедельник, 5 сентября 2022 г.

Секция 1. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме

9:30 ОТКРЫТИЕ

9:40 *Пленарный доклад*
ОРБИТАЛЬНАЯ ФИЗИКА: МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА
И.А. Пресняков, А.В. Соболев, В.С. Русаков

10:10 *Пленарный доклад*
ПОВЕДЕНИЕ ДВУХ МАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ С ТЕМПЕРАТУРОЙ В “УМНЫХ” АНТИКОРРОЗИОННЫХ ПОКРЫТИЯХ
Ф.Ф. Чаусов, А.Л. Ульянов, И.С. Казанцева, Л.В. Добышева

10:40 МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В 4f-3d ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ С КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ: МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
Н.В. Мушников, Н.М. Клейнерман, С.П. Наумов

11:00 КОФЕ-БРЕЙК

11:20 ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ДО 2.6 К И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 72 ГПа
К.В. Фролов, С.С. Старчиков, Е.С. Смирнова, О.А. Алексеева, И.С. Любутин, В.А. Заяханов, А. Чумаков, Г. Гарбарино, С.А. Харламова, И.А. Гудим, В.Л. Темеров, В.Р. Кучешева-Титова

11:40 ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МАНГАНИТЕ $BiMn_7O_{12}$
В.И. Ниценко, А.В. Соболев, Я.С. Глазкова, И.А. Пресняков

12:00 ВЗАИМОСВЯЗЬ ВАЛЕНТНОСТИ АТОМОВ Fe И КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В ЗАМЕЩЕННОМ ОРТОФЕРРИТЕ $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМООБРАБОТКИ
В.Д. Седых, В.С. Русаков, Т.В. Губайдулина, О.Г. Рыбченко, В.И. Кулаков

12:20 СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА В МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$
Н.И. Снегирёв, И.С. Любутин, М.А. Чуев, С.С. Старчиков, С.В. Ягупов, Ю.А. Могиленец, М.Б. Стругацкий

13:00 ОБЕД

14:30 МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ Fe-Ni С НИЗКИМ СОДЕРЖАНИЕМ НИКЕЛЯ
Н.М. Клейнерман, А.В. Протасов, С.П. Наумов, В.С. Гавико

14:50 СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ $ErFe_2Mn_x$
С.П. Наумов, Н.В. Мушников, Н.М. Клейнерман, В.Г. Семёнов

15:10 ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ ТРОЙНЫХ МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ СПЛАВОВ $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 ат. %)
А.Г. Иванова, Е.В. Воронина, А.Ф. Абдуллин, А.К. Аржников

15:30 КОФЕ-БРЕЙК

15:50 РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ, ВЫЯВЛЕННЫЕ В Ca- И Sr-ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТАХ ЛАНТАНА МЕТОДАМИ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МАГНИТНЫМИ ИЗМЕРЕНИЯМИ
Д.И. Пчелина, В.Д. Седых, Н.И. Чистякова, Ю.А. Алехина, А.Н. Целебровский, В.С. Русаков

16:10 ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ КАТИОНОВ ЖЕЛЕЗА В Ni^{2+}, Cu^{2+} И Mg^{2+} ФЕРРИТАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
М.В. Ушаков, Р. Калай Сельван, М.И. Оштрах

16:30 ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА НА ЯДРАХ ^{57}Fe МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БИНАРНЫХ ФОСФИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ
И.Г. Силкин, И.А. Пресняков, И.В. Морозов

17:00–19:00 СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ. СЕКЦИИ 1 – 8

19:30 ПРИВЕТСТВЕННЫЙ УЖИН

Вторник, 6 сентября 2022 г.

Секция 2. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры

9:30 *Пленарный доклад*
НЕТРИВИАЛЬНЫЕ ФОРМЫ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ С РАЗНЫМИ ФОРМАМИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ
М.А. Чуев

10:00 МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ Fe_3O_4 И Fe_3O_4@Au НАНОЧАСТИЦ, ПОДВЕРГНУТЫХ ТЕРМИЧЕСКОМУ ОТЖИГУ
В.С. Русаков, М.С. Фадеев, А.Л. Козловский

10:20 ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 2D-РАЗМЕРНЫХ СЛОЕВ ВОДЫ НА ПОДЛОЖКЕ МОНТМОРИЛЛОНИТА
А.А. Залуцкий, В.В. Морозов, А.Ю. Соколов, Е.Н. Школьников

11:40 ЭМИССИОННАЯ ЯГР СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО НИОБИЯ
В.В. Попов, Е.В. Осинников

11:00 КОФЕ-БРЕЙК

11:20 АНАЛИЗ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В СПЛАВАХ FINEMET МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
Э. Кузманн, Ш. Штихлеутнер, Л. Махала, И. Печусек, Р. Вондрасек, Д. Смрчка, Л. Коурил, З. Хомоннай, М.И. Оштрах, А. Мозолаи, В.А. Скуратов, М. Кудор, Б. Херчег, Л.К. Варга

11:40 ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДЛЯ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ЗАПИСИ ИНФОРМАЦИИ
А.А. Валиуллин, А.С. Камзин, Л.Р. Тагиров, Л.Д. Зарипова

12:00 СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ ТИПА ЯДРО@ОБОЛОЧКА НА ОСНОВЕ КАРБИДОВ И ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА
С.С. Старчиков, В.А. Заяханов, А.Л. Васильев, И.С. Любутин, К.О. Фунтов, М.В. Любутина, Н.К. Чумаков, Л.Ф. Куликова, В.Н. Агафонов, В.А. Давыдов

12:20 МАГНИТНЫЕ И МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ Fe, Fe_XCo_{1-X} И Fe_XNi_{1-X}
И.В. Перунов, К.В. Фролов, М.А. Чуев, И.М. Долуденко, Д.Л. Загорский, Н.К. Чумаков, И.С. Любутин

13:00 ОБЕД

Секция 3. Перспективные материалы и современные технологии их получения

14:30 *Пленарный доклад*
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И РОЛЬ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ЕЁ ИССЛЕДОВАНИИ
И.С. Любутин, И.А. Троян, А.Г. Гаврилюк

15:00 *Пленарный доклад*
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
А.К. Аржников

15:30 КРИТИЧЕСКОЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ СВЕРХВЫСОКОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ
В.А. Шабашов

15:50 КОФЕ-БРЕЙК

16:10 МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БОГАТЫХ ЖЕЛЕЗОМ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Fe-Mn В АНАЛОГИЧНЫХ УСЛОВИЯХ НАГРЕВА ПУЧКОМ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ Ar^+ ЭНЕРГИЕЙ 15 кэВ И БЕСКОНТАКТНЫМНАГРЕВАТЕЛЕМ
В.В. Овчинников, Е.В. Макаров, В.А. Семенкин, Н.В. Гущина

16:30 НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ Fe-Al-Sn ИЗ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МЕХАНИЧЕСКОГО СПЛАВЛЕНИЯ
Е.В. Воронина, А.Г. Иванова, А.Ф. Абдуллин, А.Е. Денисов, А.К. Аржников

16:50 ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОДОЗНОГО НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ИНДУСТРИАЛЬНОЙ СТАЛИ ЭП823
К.А. Козлов, В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, В.А. Семенкин, А.В. Козлов, В.Л. Панченко

17:10 МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО И МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ НАНОКОМПОЗИТА СОСТАВА $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ ПОСЛЕ МЕХАНОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ПОСЛЕДУЮЩИХ ОТЖИГОВ
А.А. Чулкина, А.И. Улянов, А.Л. Ульянов, В.Е. Порсев

17:30 МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДАЛЬНЕГО АТОМНОГО ПОРЯДКА В СПЛАВЕ Fe-6,25 AT.% Si
Е.В. Макаров, В.В. Овчинников, В.А. Семенкин

18:00 УЖИН

Среда, 7 сентября 2022 г.

Секция 4. Биологические и медицинские применения

09:30 *Пленарный доклад*
МОЛЕКУЛЯРНО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ И ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КЛЕТКАХ БАКТЕРИЙ ПРИ ВЫСУШИВАНИИ
А.А. Камнев, А.В. Тугарова, К. Ковач, Э. Кузманн

10:00 НАНОРАЗМЕРНЫЕ «ЖЕЛЕЗНЫЕ ЯДРА» ФЕРРИТИНА И ЕГО ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ: ВЫЯВЛЕНИЕ АНОМАЛЬНЫХ ТЕМПЕАРТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ ПАРАМЕТРОВ
И.В. Аленькина, Э. Кузманн, И. Фелнер, В.К. Киш, Д.В. Беляев, М.И. Оштрах

10:20 ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ С ИСТЕКШИМ СРОКОМ ГОДНОСТИ ПО ДАННЫМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
Д.В. Беляев, И.В. Аленькина, М.И. Оштрах

Секция 5. Синхротронное излучение и гамма-оптика

10:40 МЁССБАУЭРОВСКИЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$ НА ESRF
М.А. Андреева, Р.А. Баулин, А.П. Носов, В.В. Изюров, И.В. Грибов, О.А. Кондратьев, И.А. Субботин, Э.М. Пашаев

11:00 КОФЕ-БРЕЙК

13:00 ОБЕД

14:00 ОБЗОРНАЯ ЭКСКУРСИЯ ПО ЕКАТЕРИНБУРГУ

Четверг, 8 сентября 2022 г.

Секция 6. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие

09:30 *Пленарный доклад*
РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ФАЗ НЕКОТОРЫХ ДИФФЕРЕНЦИИРОВАННЫХ И НЕДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫХ МЕТЕОРИТОВ
А.А. Максимова, Е.В. Петрова, М.В. Горюнов, И. Фелнер, А.В. Чукин, Э. Кузманн, З. Хомоннай, М.И. Оштрах

10:00 О ВКЛАДЕ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ МЕТЕОРИТА ЧЕЛЯБИНСК
В.И. Гроховский, М.И. Оштрах

10:20 ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ЖЕЛЕЗОМАРГАНЕВЫХ КОРОК
А.А. Новакова, С.И. Панфилов, В.В. Авдонин, Е.А. Жегалло

10:40 СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СИДЕРИТОВ ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО, ОСАДОЧНОГО И МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ
Н.И. Чистякова, А.В. Антонова, Д.Г. Заварзина, Т. Кмеч, Я. Кохоут, Т.Ю. Киселева, М.С. Чернов, Е.Н. Лукьянова, В.Д. Седых, В.С. Русаков

11:00 КОФЕ-БРЕЙК

11:20 РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДЛЯ ВЕЩЕСТВА ОБЫКНОВЕННОГО ХОНДРИТА KEMER L4 И КОРЫ ПЛАВЛЕНИЯ
Е.В. Петрова, А.А. Максимова, И. Фелнер, А.В. Чукин, М.И. Оштрах

11:40 РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФФРАКЦИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ МИНЕРАЛОВ В ИМПАКТИТЕ ЯНИСЪЯРВИ
А.А. Максимова, А.В. Чукин, М.И. Оштрах

Секция 7. Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь

12:00 НОВЫЙ ПОДХОД К ИНТЕРПРЕТАЦИИ МЕССБАУЭРОВСКИХ ИЗОМЕРНЫХ СДВИГОВ ЖЕЛЕЗА
С.К. Дедушенко, Ю.Д. Перфильев

12:20 МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША
К.В. Фролов, М.В. Иванцов, М.В. Куликова

13:00 ОБЕД

14:30 ТУР ПРОГРАММА

20:00 БАНКЕТ

Пятница, 9 сентября 2022 г.

Секция 8. Техника эксперимента и методология

09:30 НОВАЯ МОДЕЛЬ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРОМЕТРА MS-2020
Д.А. Сарычев, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич, В.В. Китаев

09:50 МЁССБАУЭРОВСКИЙ СПЕКТРОМЕТР С ПОДВИЖНЫМ РЕЗОНАНСНЫМ ДЕТЕКТОРОМ И СИНХРОННОЙ СИСТЕМОЙДОПЛЕРОВСКОЙ МОДУЛЯЦИИ
Д.А. Сарычев, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич

10:10 ДОПЛЕРОВСКИЙ МОДУЛЯТОР: ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ
В.Г. Семенов, В.В. Панчук, Н.А. Макаров

10:30 ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЙ МЕТОД ОДНОВРЕМЕННОГО ИЗМЕРЕНИЯ АМПЛИТУДЫ КОЛЕБАНИЙ ЯДЕР НА ПОВЕРХНОСТИ И В ОБЪЕМЕ ОБРАЗЦА ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗБУЖДЕНИИ
А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов

10:50 КОФЕ-БРЕЙК

11:10 ОЦЕНКА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ СИСТЕМЫ ДВИЖЕНИЯ В МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОМЕТРАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭТАЛОННОГО ПОГЛОТИТЕЛЯ ФОЛЬГИ α-Fe
В.А. Семенкин, Э. Кузманн, З. Хомоннай, М.И. Оштрах

11:30 О ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ СЕГРЕГАЦИЯХ И СОПУТСТВУЮЩИХ ЯВЛЕНИЯХ В МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ
Г.А. Дорофеев, В.Е. Порсев, А.Л. Ульянов, О.М. Немцова

11:50 МОДЕРНИЗАЦИЯ КРИОСТАТА ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА ДЛЯ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
В.А. Заяханов, С.С. Старчиков, К.О. Фунтов, М. Клёнов, И. Бондаренко, К.В. Фролов, И.С. Любутин

12:10 СОЗДАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ В ПРОГРАММЕ SpectrRelax
М.Е. Мацнев, В.С. Русаков

12:30 ЗАКРЫТИЕ

13:30 ОБЕД

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция 1. Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме

СВЕРХТОНКИЕ МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $Fe_2O(SeO_3)_2$
А.В. Соболев, А.А. Асландукова, Я.С. Глазкова, И.А. Пресняков

ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СПИН-МОДУЛИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-y}$ ($x = 0 \div 0.1$)
В.С. Покатилов, В.С. Русаков, А.М. Гапочка, А.О. Макарова

ИССЛЕДОВАНИЕ КУБИКОВ МАГНЕТИТА СО СПИН-ВОРТЕКСНЫМ ПОВЕДЕНИЕМ МЕТОДАМИ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И FORC
Т.Ю. Киселева, С. Кобаяши, В.С. Русаков, К.В. Фролов, Д. Маньяна, Н. Жаргалан, Д. Сангаа

ЭНЕРГИЯ ОБРАЗОВАНИЯ И ПАРАМЕТРЫ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРОЙНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ Fe-Al. РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ
А.Ф. Абдуллин, Е.В. Воронина

АНАЛИЗ СВЕРХТОНКИХ ПОЛЕЙ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ FeNi
А.Ю. Гермов, Б.Ю. Голобородский, А.С. Конев, Д.А. Прокопьев, И.А. Курмачёв, Е.В. Суворкова, А.С. Минин, М.А. Уймин

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ЛЕНТ СПЛАВА $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКИ
А.В. Протасов, О.А. Головня, А.Г. Попов, Л.А. Сташкова, В.С. Гавико

МАГНИТНАЯ СТУРКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ ($x = 0.05, 0.10, 0.15$)
А.М. Гапочка, В.С. Русаков, Я.С. Глазкова, Т.В. Губайдулина, М.Е. Мацнев, И.А. Пресняков

Секция 2. Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА НАНОЧАСТИЦЫ α-Fe_2O_3
М.С. Фадеев, А.Л. Козловский, В.С. Русаков, К.К. Кадыржанов

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОПИРОВАНИЯ Au, Gd, Nd НА МАГНИТНЫЕ И ГИПЕРТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe_3O_4 НАНОКОМПОЗИТОВ
А.Л. Козловский, К. Егизбек, М.С. Фадеев, В.С. Русаков, К.К. Кадыржанов

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЕЛЯ ОТ ТОЛЩИНЫ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$
В.В. Изюров, М.А. Андреева, Р.А. Баулин, А.П. Носов, И.В. Грибов, О.А. Кондратьев, И.А. Субботин, Э.М. Пашаев

Секция 3. Перспективные материалы и современные технологии их получения

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ В МЕТАСТАБИЛЬНЫХ Fe–Ni ИНВАРАХ
В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, С.Е. Данилов

ТЕПЛОТА ОБРАЗОВАНИЯ НИТРИДОВ И МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ СТАЛЕЙ, УПРОЧНЯЕМЫХ ДИСПЕРСНЫМИ НИТРИДАМИ ТИТАНА
В.А. Шабашов, К.А. Ляшков, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, Е.Г. Новиков

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЧАСТИЦ ИТТРИЕВОГО ФЕРРИТА ГРАНАТА В РЕЖИМАХ ГОРЕНИЯ
Т.Ю. Киселева, В.С. Русаков, Р. Аббас, Е.В. Лазарева, П.Ю. Тяпкин, К.Д. Мартинсон, Д. Сангаа, В.И. Попков

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ИНДУСТРИАЛЬНЫХ СТАЛЯХ ЭП823 И ЭП823-ДУО ПРИ ВЫСОКОДОЗНОМ НЕЙТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ
К.А. Козлов, В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, А.В. Козлов, В.Л. Панченко

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ $PbSnO_3$
С.П. Кубрин, И.П. Раевский, Д.А. Сарычев, Н.М. Олехнович, А.В. Пушкарев, Ю.В. Рядуш

ТВЕРДОФАЗНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ВЫСОКОАЗОТИСТОГО ХРОМОМАРГАНЦЕВОГО АУСТЕНИТА
К.А. Ляшков, В.А. Шабашов, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, Е.Г. Новиков

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЛИЯНИЯ АЛЮМИНИЯ НА МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ $MgFe_{2-X}Al_XO_4$
К.Е. Худяков, Е.В. Лазарева, И. Кишигдемберел, П.Ю. Тяпкин, Т.Ф. Григорьева, И.П. Иваненко, Т.Ю. Киселева, Е. Уянга, Д. Сангаа

Секция 4. Биологические и медицинские применения

БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ GrO-ФЕРРИТ И НАНОСТРУКТУР ТИПА ЯДРО/ОБОЛОЧКА: СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКИ
А.С. Камзин

НОВЫЙ МЕТОД МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА
С.В. Столяр, О.А. Ли, Е.Д. Николаева, А.М. Воротынов, Д.А. Великанов, Ю.В. Князев, О.А. Баюков, Р.С. Исхаков

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ $CoFe_2O_4$
С.В. Столяр, О.А. Ли, Е.Д. Николаева, А.М. Воротынов, Д.А. Великанов, Ю.В. Князев, О.А. Баюков, Р.С. Исхаков, В.Ф. Пьянков

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК НА ОСНОВЕ БИСГЛИЦИНАТА ЖЕЛЕЗА
А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов

Секция 5. Синхротронное излучение и гамма-оптика

МЁССБАУЭРОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ПЛОХОРАЗРЕШЕННЫХ СПЕКТРОВ
Р.А. Баулин, М.А. Андреева, М.А. Миляев, Д.А. Пономарев, Л.Н. Ромашев, В.В. Устинов

Секция 6. Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие

МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТЕРМООБРАБОТАННОГО ТУРМАЛИНА ИЗ КОПИ МИНИСТЕРСКАЯ (СРЕДНИЙ УРАЛ)
М.В. Воронин, Л.В. Сипавина

СВЕРХТОНКИЕ ПАРАМЕТРЫ ^{57}Fe В СПЛАВЕ Fe-Ni РАЗЛИЧНЫХ МЕТЕОРИТОВ
М.В. Горюнов, М.И. Оштрах

ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД БЛИЖНЕГО ВОСТОКА (Королевство Саудовская Аравия, Турция)
М.М. Гусейнов

Секция 8. Техника эксперимента и методология

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФОРМЫ ЛИНИИ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА
Е.Н. Дулов, М.Т.Р. Заитов

УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В ПРИЛОЖЕНИИ К МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ
О.М. Немцова, Г.Н. Коныгин

МНОГОМЕРНОЕ РАЗРЕШЕНИЕ КРИВЫХ ДЛЯ ОБРАБОТКИ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ
В.В. Панчук, Б. Дебус, Д.О. Кирсанов, В.Г. Семенов

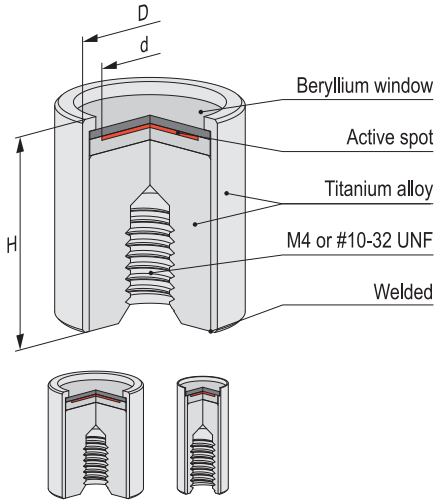
Mössbauer Sources: ^{57}Co

Mössbauer resonance on ^{57}Fe

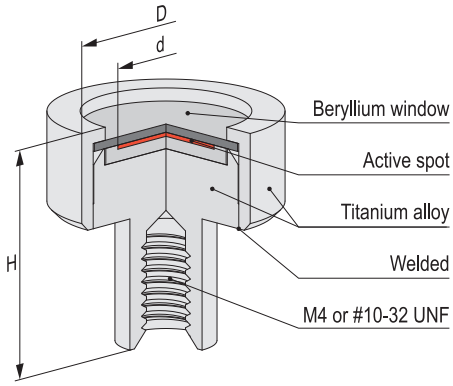
Mössbauer source active part is prepared by electrodepositing high purity carrier-free ^{57}Co onto a thin metal backing (matrix) followed by controlled annealing process. Standard matrix is rhodium. Other matrices are available on request.

Capsule type	D×H, mm	d, mm	Nominal activity *		Linewidth, mm/s	Code
			mCi	MBq		
1	11.2×13	8	5	185	0.11-0.13	MCo7.111
			10	370		MCo7.112
			25	925		MCo7.113
			50	1850		MCo7.114
			100	3700		MCo7.115
2	14×14	8	5	185	0.11-0.13	MCo7.121
			10	370		MCo7.122
			25	925		MCo7.123
			50	1850		MCo7.124
			100	3700		MCo7.125
6	6×13	4	5	185	0.11-0.15	MCo7.161
			10	370		MCo7.162
			25	925		MCo7.163
			50	1850		MCo7.164
			100	3700		MCo7.165
9	4×14	1	5	185	0.13-0.15	MCo7.191
			10	370		MCo7.192
10	6×17	1	5	185	0.13-0.15	MCo7.1101
			10	370		MCo7.1102

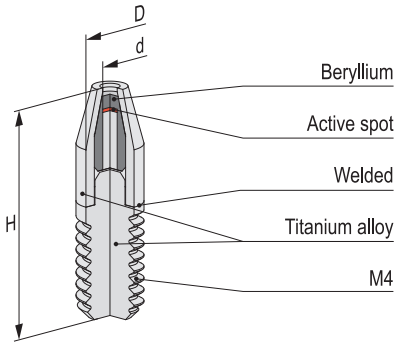
* — tolerance -5...+10 %
Recoilless fraction: 0.75
14.41 keV photon emission efficiency: ≥ 75 %
ISO classification:
Capsule 1, 2, 6: C54243
Capsule 9, 10: C34243
Temperature range:
Capsule 1, 2, 6: 4.2 - 700 K **
Capsule 9, 10: 220 - 450 K
Recommended working life: 10 years
All sources are carefully tested on certified equipment. Each source is supported by a Test Report with measured values of Mössbauer spectra parameters.
** — additional notification is required for liquid helium temperature application



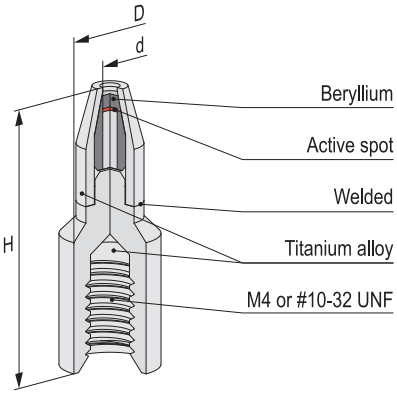
1 6



2



9

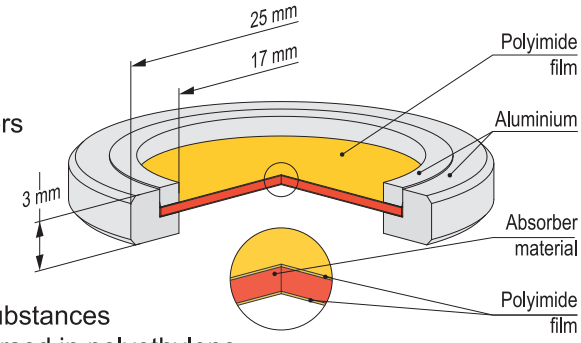


10

Reference Absorbers

Description	Thickness, mg $^{57}Fe/cm^2$	Code *
Enriched iron reference absorbers		
$K_2MgFe(CN)_6$	0.25-1.00	MRA.1.1.X
$FeC_2O_4 \times 2H_2O$	0.50-1.00	MRA.1.2.X
Fe_2O_3	1.00-2.00	MRA.1.3.X
α-Fe foil	3 μm	MRA.1.6
Natural iron reference absorbers		
$FeC_2O_4 \times 2H_2O$	0.13-0.25	MRA.2.2.X
Fe_2O_3	0.13-0.25	MRA.2.3.X
$K_4Fe(CN)_6 \times 3H_2O$	0.13-1.00	MRA.2.4.X
α-Fe foil	30 μm	MRA.2.6

* — "X" is the thickness of the reference absorber in mg ($^{57}Fe/cm^2$): X = 1, 2, 3, 4 and 5 for 0.13, 0.25, 0.50, 1.00 and 2.00 respectively.

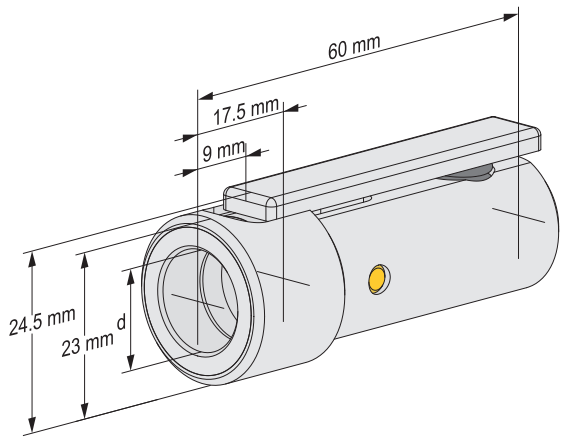


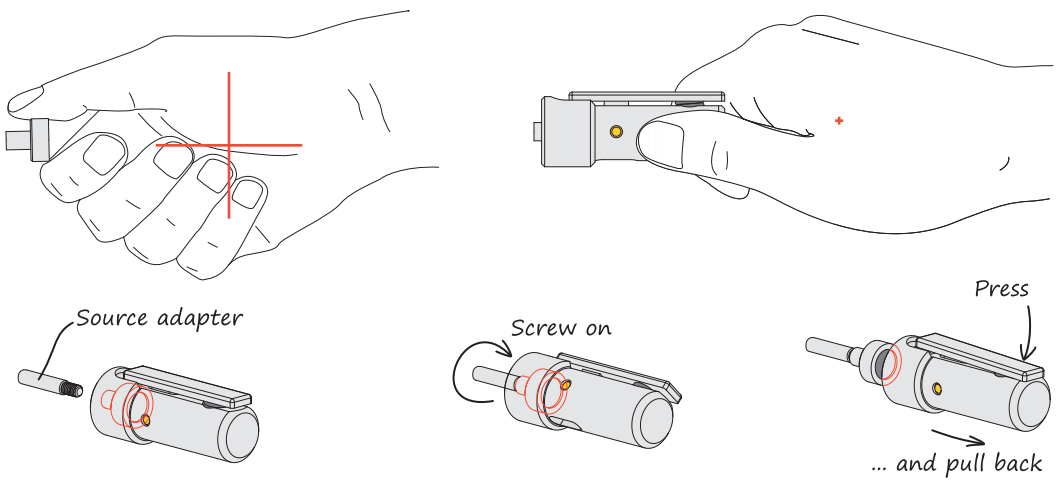
Reference absorbers contain chemical substances synthesized with either enriched ^{57}Fe (> 95 %) or natural iron. The substances are uniformly dispersed in polyethylene and shaped in discs: 1 mm thickness and 20 mm in diameter, placed between two polyimide films with total thickness of 100 ± 10 μm in aluminium holders. Potassium and potassium-magnesium ferrocyanide [$K_4Fe(CN)_6 \times 3H_2O$; $K_2MgFe(CN)_6$] exhibit unsplit narrow line in Mössbauer absorption spectra. Ferrous oxalate dihydrate [$FeC_2O_4 \times 2H_2O$] exhibits quadrupole splitting, leading to two narrow lines in Mössbauer absorption spectrum. Metallic iron and iron oxide [α-Fe; Fe_2O_3] exhibit magnetic hyperfine splitting, leading to six narrow lines in Mössbauer absorption spectra.
All reference absorbers are carefully tested on certified equipment. Each absorber is supported by a Test Report with measured values of Mössbauer spectra parameters.

Mössbauer Sources Grippers

Grippers are designed for mounting and dismounting of Mössbauer sources (MCo7 and MSn9) manufactured by RITVERC on an NGR-spectrometer. Significant decrease of gamma radiation dose provided by using of tungsten shield.

Code	Capsule type	d, mm
GrMS.1	1	11.2
GrMS.2	2	14
GrMS.6	6	6





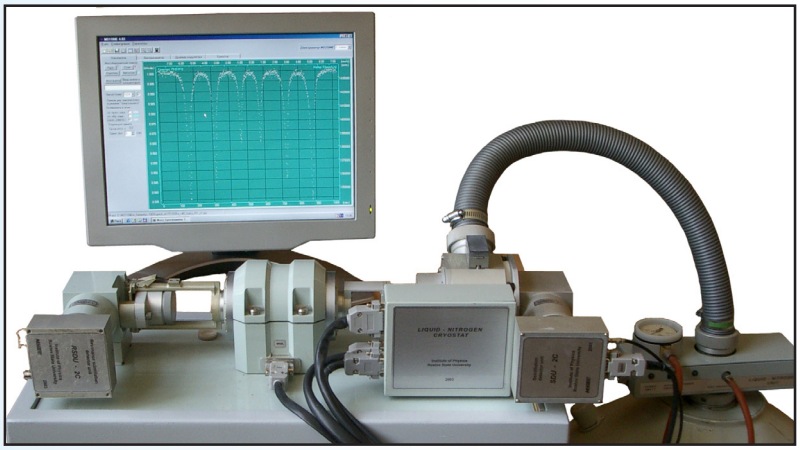
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
ЮЖНОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО
УНИВЕРСИТЕТА

МС-1104Ем

ЭКСПРЕССНЫЙ МЕССБАУЭРОВСКИЙ СПЕКТРОМЕТР

Экспрессный мессбауэровский спектрометр МС1104Ем предназначен для трансмиссионных и эмиссионных мессбауэровских измерений с фиксированной геометрией при температурах от комнатной до 85 К.

Конструкция спектрометра позволяет производить модуляцию энергии резонансных гамма-квантов путем перемещения как мессбауэровского источника, так и исследуемого образца.



Количество одновременно измеряемых спектров	1 или 2 (по выбору)
Максимальные рабочие значения скорости (для 255 поддиапазонов)	0.5 – 100 мм/с.
Закон движения поглотителя или источника (по выбору) при измерениях мессбауэровских спектров	с постоянным ускорением в режимах: треугольном; пилообразном; на заданном интервале скоростей; на двух заданных интервалах скоростей попеременно с раздельным накоплением спектров в интервалах
Максимальная нелинейность скоростной характеристики при максимальных скоростях:	
0.5 —20 мм/с.	<0.05% от Vmax
20—100 мм/с.	<0.2% от Vmax
Дрейф нуля скорости при длительной работе	<0.003 мм/с.
Дрейф цены канала скорости при длительной работе при длительной работе в диапазоне регламентированных температур эксплуатации	<0.2% от цены канала
Амплитуда шума скорости при величине максимальной скорости до 20 мм/с	<0.01 мм/с
Применяемые типы детекторов	СД, РСД, КЭМД*
Системы стабилизации работы детекторов	Имеются
Число каналов при регистрации мессбауэровского спектра	128, 256, 512, 1024 (по выбору)
Диапазон возможных температур измерений мессбауэровских спектров	85 – 310 К стабильность ±0.2 К
Наличие компьютерного управления для автоматизированного измерения спектров, записи результатов и их обработки	имеется
Допустимая активность источника (по Co-57) без применения дополнительной защиты	<50 мКи

* *Примичание:* СД — сцинтилляционный детектор NaI(Tl) толщиной 0.1мм, РСД-Fe,Sn,Eu – резонансные сцинтилляционные детекторы для этих элементов, КЭМД – газовый пропорциональный детектор конверсионных электронов.

344090, г. Ростов-на-Дону,
пр. Стачки 194, НИИ Физики ЮФУ

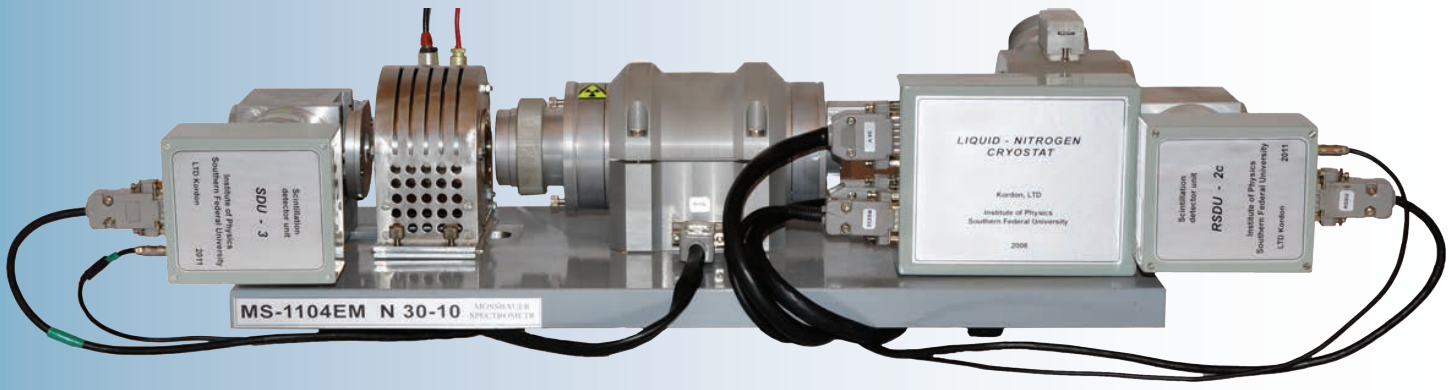
тел /факс: (863) 243-48-16
e-mail: i110@ip.rsu.ru

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ЮЖНОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА

ПЕЧЬ ДЛЯ МЕССБАУЭРОВСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Печь для мессбауэровских измерений обладает следующими параметрами:

Максимальная рабочая температура - до 750 К
Газовая среда – окислительная (воздух)
Теплоизоляция: минеральная вата
Вакуумная откачка – не требуется
Охлаждение печи – возд ушное
Управление температурой печи - микропроцессорный контроллер
Погрешность установки и удержания температуры не более ±1 К
Потребляема мощность печи – не более 40 вт
Температура кожуха и фланцев печи (без обдува) - не более 180ºС.



Печь предназначена для трансмиссионных измерений мессбауэровских спектров в составе спектрометров ряда МС1104Ем. Высота оптической оси печи над поверхностью стола спектрометра 55 мм, диаметр образцов – до 21 мм, длина печи в направлении оптической оси - не более 70 мм. Образец устанавливается в свинчивающейся кассете и теплоизолируется от внешней среды двумя экранами с каждой стороны из майлара и тонкой алюминиевой фольги или графлекса. Суммарное поглощение излучения 14.4 кэВ экранами не превышает 10-15%.

Печь крепится к плите спектрометра МС1104Ем невыпадающими винтами и при необходимости (например, при использовании камеры для регистрации конверсионных электронов или иной оснастки) легко снимается и устанавливается обратно. Откидное крепление печи позволяет производить оперативную замену образцов, не ожидая ее остывания , проводить оперативную градуировку спектрометра, не снимая печи, и измерять мессбауэровские спектра поглотителей при комнатной температуре вне ее в геометрии с движущимся источником либо поглотителем, в том числе в «сжатой» геометрии и с применением резонансных детекторов.

344090, г. Ростов-на-Дону,
пр. Стачки 194, НИИ Физики ЮФУ
тел./факс: (863) 243-28-16
e-mail: i110@ip.rsu.ru

Секция 1

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МАГНЕТИЗМЕ

Section 1

HYPERFINE INTERACTIONS IN SOLID STATE PHYSICS AND MAGNETISM

ORBITAL PHYSICS: MÖSSBAUER DIAGNOSTIC

I. Presniakov[1*], A. Sobolev[1], V. Rusakov[2]

[1] *Chemistry Department, Lomonosov University MSU, Moscow, Russia*
[2] *Physics Department, Lomonosov University MSU, Moscow, Russia*
**e-mail: ipresniakov1969@mail.ru*

Orbital physics is one of the actively developing in the last decade branch of solid state physics, which combines very big class of materials with a strong electron correlation. Their very rich properties are largely determined by the strong interplay of different degrees of freedom: charge, spin and orbital. Orbital effects play a very important role in these systems.

Using real examples of materials (multiferroics, iron-containing superconductors, metal-ion conductors, mixed-valence systems, frustrated spin-modulated magnets, etc.), we report an overview analysis of the possibilities of Mössbauer spectroscopy for studying phenomena, which can be attributed to orbital physics. Mössbauer spectroscopy is considered both in its "traditional version" (resonant nuclide is the main component of the compound) and in the "probe version" (sources of information are probe Mössbauer atoms).

[1] Presniakov I., Demazeau G., Baranov A., Pokholok K., Sobolev A., Phys.Rev. B. **71**, 054409 (2005).
[2] Presniakov I.A., Rusakov V.S., Gubaidulina T.V., Sobolev A.V. *et al.*, Phys. Rev.B. **76**, 214407 (2007).
[3] Presniakov I., Demazeau G., Baranov A., Sobolev A., Gubaidulina T., Rusakov V., Z. Naturforsch. **63b**, 244 (2008).
[4] Sobolev A., Akulenko A., Glazkova I., Belik A., Furubayashi T., Shvanskaya L., Dimitrova O., Presniakov I., J. Phys. Chem. C, **122**, 19767 (2018).
[5] Sobolev A., Akulenko A., Glazkova I., Pankratov D., Presniakov I. Phys. Rev. B, **97**, 104415 (2018).
[6] Sobolev A., Glazkova I., Akulenko A., Sergueev I., Chumakov A., Wei Yi, Belik A., Presniakov I. J.Phys. Chem. C, **123**, 23628 (2019).
[7] Uma S., Vasilchikova T., Sobolev A., Raganyan G., Sethi A., Koo Hyun-Joo, Whangbo M.-H., Presniakov I., Glazkova I., Vasiliev A., Streltsov S., Zvereva E., Inorg. Chem., **58**, 11333 (2019).
[8] Sobolev A., Rusakov V., Gapochka A., Glazkova I., Gubaidulina T., Matsnev M., Belik A., Presniakov I., Phys. Rev. B, **101**, 224409 (2020)
[9] Nawa K., Avdeev M., Berdonosov P., Sobolev A., Presniakov I. *et al*. Scientific reports, **11**, 24049 (2021)

ОРБИТАЛЬНАЯ ФИЗИКА: МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА

И.А. Пресняков[1*], А.В. Соболев[1], В.С. Русаков[2]

[1]*Химический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Физический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*
**e-mail: ipresniakov1969@mail.ru*

Орбитальная физика - активно развивающееся в последнее десятилетие направление физики конденсированного состояния, которое объединило в себе различные классы соединений с сильной электронной корреляцией, в основе необычных физико-химических свойств которых лежат явления зарядового, орбитального и спинового упорядочений.

В докладе на конкретных примерах (мультиферроики, железосодержащие сверхпроводники, металл-ионные проводники, смешанно-валентные системы, фрустрированные спин-модулированные магнетики, и др.) представлен обзорный анализ возможностей мессбауэровской спектроскопии для исследования явлений, которые в последнее время относят к орбитальной физике. Мессбауэровская спектроскопия рассматривается как в своем традиционном варианте (резонансные нуклиды являются основными компонентами соединения), так и зондовом варианте (источники информации - зондовые мессбауэровские атомы).

[1] Presniakov I., Demazeau G., Baranov A., Pokholok K., Sobolev A., Phys.Rev. B. **71**, 054409 (2005).
[2] Presniakov I.A., Rusakov V.S., Gubaidulina T.V., Sobolev A.V. *et al.*, Phys. Rev.B. **76**, 214407 (2007).
[3] Presniakov I., Demazeau G., Baranov A., Sobolev A., Gubaidulina T., Rusakov V., Z. Naturforsch. **63b**, 244 (2008).
[4] Sobolev A., Akulenko A., Glazkova I., Belik A., Furubayashi T., Shvanskaya L., Dimitrova O., Presniakov I., J. Phys. Chem. C, **122**, 19767 (2018).
[5] Sobolev A., Akulenko A., Glazkova I., Pankratov D., Presniakov I. Phys. Rev. B, **97**, 104415 (2018).
[6] Sobolev A., Glazkova I., Akulenko A., Sergueev I., Chumakov A., Wei Yi, Belik A., Presniakov I. J.Phys. Chem. C, **123**, 23628 (2019).
[7] Uma S., Vasilchikova T., Sobolev A., Raganyan G., Sethi A., Koo Hyun-Joo, Whangbo M.-H., Presniakov I., Glazkova I., Vasiliev A., Streltsov S., Zvereva E., Inorg. Chem., **58**, 11333 (2019).
[8] Sobolev A., Rusakov V., Gapochka A., Glazkova I., Gubaidulina T., Matsnev M., Belik A., Presniakov I., Phys. Rev. B, 101, 224409 (2020)
[9] Nawa K., Avdeev M., Berdonosov P., Sobolev A., Presniakov I. *et al*. Scientific reports, **11**, 24049 (2021)

THERMAL BEHAVIOR OF TWO MAGNETIC STATES IN SMART ANTI-CORROSION COATINGS

F.F. Chausov*, A.L. Ul'yanov, I.S. Kazantseva, L.V. Dobysheva

Udmurt Federal Research Center, Ural Br. of Rus.Ac.Sci., Izhevsk, Russia
**e-mail: chaus@udman.ru*

The compounds of nitrilotris(methylenephosphonic acid) (NTP) with transition metals are often used as steel corrosion inhibitors. As improvement of their effectiveness and efficiency is important, the protective coatings need to be fundamentally studied. An anti-corrosion FeNTP coating $[Fe(H_2O)_3\ NH(CH_2\ PO_3\ H)_3]_n$ forms on steel surface. Addition of some metals (for example Zn^{2+} or Cd^{2+}) improves the anti-corrosive properties. The most efficient inhibitor contains one Cd atom per NTP molecule, and the forming protective coating has Cd atoms replacing 1/8 of Fe [1]. The optimal concentration of Zn is approximately 4 times higher [2,3]. Despite the full isostructurality of FeNTP and FeCdNTP, the Cd doping leads to changes in the electronic structure and properties [4]: 1) Fe atoms in FeNTP are in a high-spin (HS) state, while FeCdNTP contains Fe in a low-spin (LS) state (X-ray photoelectron spectra); 2) difference in the quadru-pole splitting (Mössbauer spectra) also resembles relationship between HS and LS; 3) Fe–O bond in FeNTP has a predominantly ionic character, and Me–O bond in FeCdNTP is covalent (XRD).

In [5], a DFT calculation (FP-LAPW method, WIEN2k) was conducted to study the electronic structure of FeNTP. Two solutions with different magnetization (M_{Fe}=4 and 0 μ_B) were found for FeNTP, and the Fe magnetic moments, quadrupole splitting, and electron density around Fe atoms well coincided with experimentally found in [4] for FeNTP and FeCdNTP, correspondingly. The following hypothesis was put forward: inserting Cd in place of 1/8 of Fe atoms changes the energy relationship between the HS and LS states, and makes the other spin state energetically preferable.

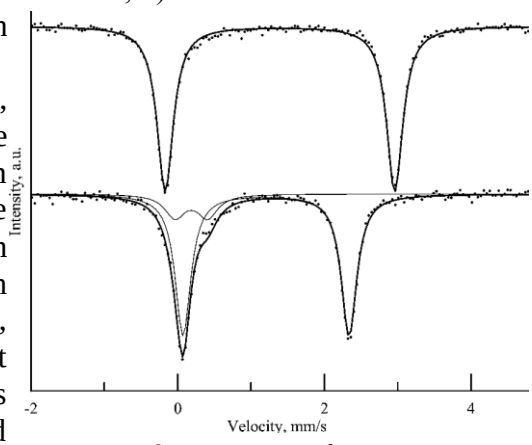


Fig.1. Mossbauer spectra of FeNTP at 77K (up) and 373K (down).

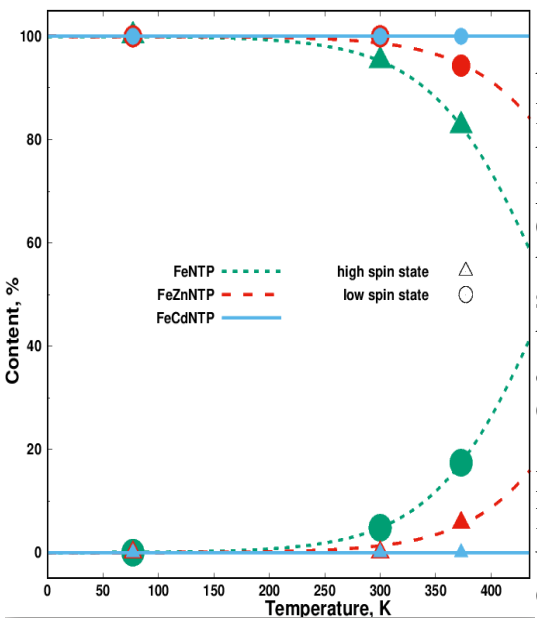


Fig.2. Contribution of HS and LS states to the Mossbauer spectra of FeNTP, FeZnNTP and FeCdNTP.

Here we check the hypothesis on coexistence of the two states. Mossbauer spectra of FeNTP (Fig.1), FeZnNTP, and FeCdNTP are obtained at different temperatures (77, 300, and 373 K), in order to study possible thermal redistribution between the two states. The data (Fig.2) evidence that during the temperature increase, there appears a second component in FeNTP (the ground state is HS, and LS component appears at room temperature, already), the ground state of FeZnNTP is LS, and the HS component appears at 373 K. FeCdNTP has only one component (LS) at all the temperatures studied.

The study was carried out within State Task of the Ministry of Science and Higher Education of Russia Federation (#121030100002-0 and #121030100003-7), with equipment of "Center of physical and physical-chemical methods of analysis and research of properties and characteristics of surfaces, nanostructures, materials, and samples" of the UdmFRC UrB RAS. Calculations have been performed using "Uran" supercomputer of IMM UB RAS.

[1] F.F. Chausov, N.V. Somov, R.M. Zakirova, A.A. Alalykin, S.M. Reshetnikov, V.G. Petrov, V.A. Aleksandrov, and M.A. Shumilova, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **81**, 365–367 (2017).
[2] F.F. Chausov, I.S. Kazantseva, S.M. Reshetnikov, N.V. Lomova, A.N. Maratkanova, and N.V. Somov, ChemistrySelect **5**, 13711–13719 (2020).
[3] F.F. Chausov, N.V. Somov, R.M. Zakirova, A.A. Alalykin, S.M. Reshetnikov, V.G. Petrov, V.A. Aleksandrov, M.A. Shumilova, Bull. of the Russ. Acad. of Sci.: Phys. **81**, 365–367 (2017).
[4] F.F. Chausov, N.V. Lomova, L.V. Dobysheva, N.V. Somov, A.L. Ul'yanov, A.N. Maratkanova, A.V. Kholzakov, and I.S. Kazantseva, J. Solid State Chem. **286**, 121324, 1-8 (2020).
[5] L.V. Dobysheva, F.F. Chausov, and N.V. Lomova, Materials Today Comm. **29**, 102892, 1-7 (2021).

ПОВЕДЕНИЕ ДВУХ МАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ С ТЕМПЕРАТУРОЙ В "УМНЫХ" АНТИКОРРОЗИОННЫХ ПОКРЫТИЯХ

Ф.Ф. Чаусов*, А.Л. Ульянов, И.С. Казанцева, Л.В. Добышева

Удмуртский федеральный исследовательский центр, УрО РАН, Ижевск, Россия
**e-mail: chaus@udman.ru*

Соединения нитрилотриметиленфосфоновой кислоты (NTP) с переходными металлами часто используют в качестве ингибиторов коррозии стали. Поскольку повышение их эффективности и экономичности является важным, необходимо проводить их фундаментальное исследование. На поверхности стали образуется антикоррозионное покрытие FeNTP, состоящее из $[Fe(H_2O)_3NH(CH_2PO_3H)_3]_n$. Добавление некоторых металлов (например, Zn^{2+} или Cd^{2+}) намного улучшает антикоррозионные свойства. Наиболее эффективный ингибитор содержит один атом Cd на молекулу NTP, а формирующееся защитное покрытие содержит атомы Cd, замещающие 1/8 часть Fe [1]. Оптимальная концентрация Zn примерно в 4 раза выше [2,3]. Несмотря на полную изоструктурность FeNTP и FeCdNTP, допирование кадмием приводит к существенным изменениям электронной структуры и свойств [4]: 1) атомы Fe в составе FeNTP находятся в высокоспиновом (HS) состоянии, тогда как FeCdNTP содержит атомы Fe с нулевым спином (LS) (рентгеноэлектронные спектры); 2) различие в квадрупольном расщеплении (мессбауэровская спектроскопия) также специфично для соотношения между HS- и LS-состояниями; 3) связи Fe–O в FeNTP носят преимущественно ионный характер, а связи Fe(Cd)–O в FeCdNTP – ковалентный (PCA).

В работе [5] были проведены расчеты DFT (метод FP-LAPW WIEN2k) электронной структуры FeNTP. Было найдено два решения с различной намагниченностью (M_{Fe}=4 и 0 μ_B), и магнитные моменты Fe, квадрупольное расщепление и плотность электронов вокруг атомов Fe совпадали с экспериментально найденными в [4] для FeNTP и FeCdNTP соответственно. Была выдвинута следующая гипотеза: введение Cd вместо 1/8 атомов Fe меняет энергетическое соотношение между HS и LS состояниями и делает другое спиновое состояние энергетически выгодным.

Здесь мы проверяем гипотезу о сосуществовании двух состояний. Получены мессбауэровские спектры FeNTP (рис.1), FeZnNTP и FeCdNTP при различных температурах (77, 300 и 373 K) для изучения возможного теплового перераспределения между двумя состояниями. Данные (Рис.2) свидетельствуют, что при повышении температуры в FeNTP появляется вторая компонента (основное состояние – HS, LS проявляется уже при комнатной,), в FeZnNTP (основное состояние LS, HS при 373 K). FeCdNTP имеет только одну LS компоненту при всех исследованных температурах.

Работа выполнена по гос заданию Министерства науки и высшего образования РФ (№ 121030100002-0 и 121030100003-7), на оборудовании «Центра физических и физико-химических методов анализа и исследования свойств и характеристик поверхностей, наноструктур, материалов и образцов» УдмФИЦ УрО РАН. Расчеты частично выполнены на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН.

MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN 4f-3d INTERMETALLIC COMPOUNDS WITH CUBIC STRUCTURE: MÖSSBAUER STUDY

N.V. Mushnikov*, N.M. Kleinerman, S.P. Naumov

Institute of Metal Physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia
**e-mail: mushnikov@imp.uran.ru*

For the rare earth - iron intermetallic compounds, the ferromagnetic (FM) and antiferromagnetic (AF) ground states in Fe sublattice can have virtually the same free energy. For such compounds, the magnetic state appears to be very sensitive to the external parameters (magnetic field, temperature, pressure), which enables their use in magnetocaloric and magnetoresistive applications. In this work, in order to elucidate the mechanism of change in the type of magnetic ordering, we studied magnetic properties and Mössbauer spectra of two cubic structure systems in which the FM-AF transition is initiated by alloying.

For the $La(Fe_{1-x}M_x)_{13}$ alloys, the cubic $NaZn_{13}$-type structure is stabilized by M = Al or Si additives. For $x = 0.12$ the compound with M = Si exhibits FM ordering, while the Al-substituted compound orders antiferromagnetically. The $La(Fe_{0.88}Si_xAl_{0.12-x})_{13}$ compounds are ferromagnetic at a silicon concentration $x > 0.05$ and antiferromagnetic at $x < 0.01$. In the concentration range $0.01 \leq x \leq 0.05$, the compounds undergo the AF-FM phase transition during cooling, and the magnetic phase transition temperature increases with increasing x.

Mössbauer spectra of the $La(Fe_{0.88}Si_xAl_{0.12-x})_{13}$ measured at 100 K were analyzed via a two-core distribution of quadrupole shifts. It was found that local surrounding of resonant Fe atom is different in the FM and AF state. For the FM state, the volume fractions of the regions with the positive and negative quadrupole shifts are close to each other. Upon the transition to the AF state, the volume fraction of local regions with the negative quadrupole shift sharply decreases [1]. Using the obtained data, we suggest a model of the formation of a magnetic structure, according to which the local distortions of iron icosahedra provide the formation of a long-range AF ordering in the $La(Fe,M)_{13}$ compounds.

Ferromagnetic compound $CeFe_2$ crystallizes into a cubic $MgCu_2$-type Laves phase. The compound undergoes the FM-AF magnetic phase transition upon low substitution of different atoms, Al, Si, Co, Ga, etc., for Fe. The transition is accompanied by rhombohedral lattice distortions. X-ray and neutron diffraction studies do not reveal any signs of ordering of substitutional atoms in the Fe sublattice. We studied the $Ce(Fe_{1-x}Si_x)_2$ ($x = 0 – 0.075$) system that undergo the FM-AF transition with increasing x. It was shown that features of the Mössbauer spectrum measured on the antiferromagnetically ordered compound $Ce(Fe_{0.93}Si_{0.07})_2$ with the rhombohedral structure are retained upon its temperature-induced transition to the FM state with the cubic lattice. This testifies to the existence in the cubic structure of local rhombohedral distortions, which can trigger the ferro- to antiferromagnetic phase transition.

The analysis of Mössbauer data and simulation results showed that the distribution of Si atoms over the iron 3b and 9e sites is nonrandom [2]. The substitutional Si atoms occupy preferably such sites in the Fe sublattice that, on going from the cubic lattice to the rhombohedral one, become 3b sites. The detected ordering of Si atoms can cause with lowering temperature the transformation from the cubic to rhombohedral structure and the related ferro- to antiferromagnetic transition.

Support by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Magnet”) is acknowledged.

[1] A.V. Vershinin, V.V. Serikov, N.M. Kleinerman, V.S. Gaviko, N.V. Mushnikov, J. Alloys Compds, **621**, 274 (2015).
[2] S.P. Naumov, N.V. Mushnikov, P.B. Terentev, M.I. Oshtrakh, N.M. Kleinerman, J. Alloys Compds, **893**, 162198 (2022).

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В 4f-3d ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ С КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ: МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Н.В. Мушников*, Н.М. Клейнерман, С.П. Наумов

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия
**e-mail: mushnikov@imp.uran.ru*

В редкоземельных интерметаллидах с железом ферромагнитное (ФМ) и антиферромагнитное (АФ) основное состояние в подрешетке Fe могут иметь почти одинаковую свободную энергию. Для таких соединений магнитное состояние оказывается очень чувствительным к внешним параметрам (магнитному полю, температуре, давлению), что позволяет использовать их в магнитокалорических и магниторезистивных приложениях. В настоящей работе для выяснения механизма смены типа магнитного упорядочения были изучены магнитные свойства и мёссбауэровские спектры двух систем с кубической структурой, в которых ФМ-АФ переход возникает в результате легирования.

В сплавах $La(Fe_{1-x}M_x)_{13}$ кубическая структура типа $NaZn_{13}$ стабилизируется введением M = Al или Si. При $x = 0.12$ соединения с M = Si имеют ФМ упорядочение, а соединения с замещением Al – упорядочиваются антиферромагнитно. Соединения $La(Fe_{0.88}Si_xAl_{0.12-x})_{13}$ ферромагнитны при концентрации Si $x > 0.05$ и антиферромагнитны при $x < 0.01$. В интервале составов $0.01 \le x \le 0.05$ наблюдается магнитный фазовый переход АФ-ФМ при охлаждении, и температура перехода увеличивается с ростом x.

Измеренные при 100 К ^{57}Fe мёссбауэровские спектры $La(Fe_{0.88}Si_xAl_{0.12-x})_{13}$ были проанализированы в модели двухъядерного распределения квадрупольных сдвигов. Было обнаружено, что локальные окружения резонансных атомов Fe в ФМ и АФ состояниях отличаются. В ФМ состоянии объемные доли областей с положительным и отрицательным квадрупольными сдвигами близки. При переходе в АФ состояние объемная доля локальных областей с отрицательным квадрупольным сдвигом резко уменьшается [1]. На основе полученных данных была предложена модель формирования магнитной структуры, в соответствии с которой локальные искажения икосаэдров Fe обеспечивают формирование дальнодействующего АФ упорядочения в соединениях $La(Fe,M)_{13}$.

Ферромагнетик $CeFe_2$ кристаллизуется в кубическую фазу Лавеса типа $MgCu_2$. В соединении наблюдается магнитный фазовый переход ФМ-АФ под действием небольшого замещения Fe атомами Al, Si, Co, Ga и др. Переход сопровождается ромбоэдрическими искажениями решетки. Рентгеновские и нейтронные исследования не обнаружили следов упорядочения легирующих атомов в подрешетке Fe. Мы изучили систему $Ce(Fe_{1-x}Si_x)_2$ (x = 0 – 0.075), в которой с ростом x происходит ФМ-АФ переход. Показано, что черты мёссбауэровского спектра, измеренного в антиферромагнитно упорядоченном соединении $Ce(Fe_{0.93}Si_{0.07})_2$ с ромбоэдрической структурой, сохраняются при переходе в ФМ состояние с кубической структурой при увеличении температуры. Это свидетельствует о наличии в кубической структуре локальных ромбоэдрических искажений, которые инициируют ФМ-АФ переход.

Анализ мёссбауэровских данных и результаты расчетов показали, что распределение атомов Si по позициям железа 3*b* и 9*e* отличается от статистического [2]. Атомы Si преимущественно заполняют те места в подрешетке Fe, которые при переходе из кубической структуры в ромбоэдрическую становятся 3*b* позициями. Обнаруженное упорядочение атомов Si может вызвать при понижении температуры переход от кубической к ромбоэдрической структуре и связанный с этим переход ферромагнетик - антиферромагнетик.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки (тема «Магнит»).

[1] A.V. Vershinin, V.V. Serikov, N.M. Kleinerman, V.S. Gaviko, N.V. Mushnikov, J. Alloys Compds, **621**, 274 (2015).

[2] S.P. Naumov, N.V. Mushnikov, P.B. Terentev, M.I. Oshtrakh, N.M. Kleinerman, J. Alloys Compds, **893**, 162198 (2022).

PHASE TRANSITIONS IN A $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ MULTIFFERROIC AT LOW TEMPERATURES DOWN TO 2.6 K AND HIGH PRESSURES UP TO 72 GPa

K.V. Frolov[1*], S.S. Starchikov[1], E.S. Smirnova[1], O.A. Alekseeva[1], I.S. Lyubutin[1], V.A. Zayakhanov[1], A. Chumakov[2], G. Garbarino[2], S.A. Kharlamova[3], I.A. Gudim[3], V.L. Temerov[3], V.R. Kuchesheva-Titova[3]

[1]*Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*
[2]*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*
[3]*Kirensky Institute of Physics SB RAS, Krasnoyarsk, Russia*
**e-mail: green@crys.ras.ru*

Multiferroic materials have attracted a lot of attention in the last 15 years due to the coexistence and interrelation of ferroelectric and magnetic ordering in these compounds. One of the actively studied multiferroics are the rare-earth ferroborates $RFe_3(BO_3)_4$ (R = Y, La-Lu) as a model object with two magnetic subsystems of iron and rare-earth ions, magnetic and structural phase transitions, and a variety of properties depending on the R element in the chemical composition [1]. One of the most interesting compounds in the family is $GdFe_3(BO_3)_4$ because it shows the cascade of phase transitions at wide range of temperatures (4 – 500 K) and high pressure up to 43 GPa [2-4].

We present the results of the X-ray diffraction and ^{57}Fe synchrotron Mössbauer spectroscopy measurements of the $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ single crystal performed in the Shubnikov Institute of Crystallography RAS, and on the ESRF ID18 nuclear resonance beamline in the diamond anvil cell under high pressure up to 72 GPa in the temperature range 2.6 – 295 K. The temperature dynamics of structural phase transition at P = 25 GPa and high spin – low spin crossover at P = 45 GPa were studied and discussed.

This work was supported by the Russian Ministry of Science and Higher Education within the State assignment of the FSRC "Crystallography and Photonics" of RAS and performed using the equipment of the Shared Research Center of the Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS.

[1] A.M. Kadomtseva, Yu.F. Popov, G.P. Vorob'ev, A.P. Pyatakov, S.S. Krotov, K.I. Kamilov, V.Yu. Ivanov, A.A. Mukhin, A.K. Zvezdin, A.M. Kuz'menko, L.N. Bezmaternykh, I.A. Gudim, V.L. Temerov, Low Temp. Physic **36**, 511 (2010).
[2] R.Z. Levitin, E.A. Popova, R.M. Chtsherbov, A.N. Vasiliev, M.N. Popova, E.P. Chukalina, S.A. Klimin, P.H.M. van Loosdrecht, D. Fausti, L.N. Bezmaternykh, JETP Lett. **79**, 423 (2004).
[3] A.G. Gavriliuk, S.A. Kharlamova, I.S. Lyubutin, I.A. Troyan, S.G. Ovchinnikov, A.M. Potseluiko, M.I. Eremets, R. Boehler, JETP Lett. **80**, 426 (2004).
[4] A.G. Gavriliuk, S.A. Kharlamova, I.S. Lyubutin, S.G. Ovchinnikov, A.M. Potseluyko, I.A. Trojan, V.N. Zabluda, J. Phys. Condens. Matter **17**, 7599 (2005).

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ДО 2.6 К И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 72 ГПа

К.В. Фролов[1*], С.С. Старчиков[1], Е.С. Смирнова[1], О.А. Алексеева[1], И.С. Любутин[1], В.А. Заяханов[1], А. Чумаков[2], Г. Гарбарино[2], С.А. Харламова[3], И.А. Гудим[3], В.Л. Темеров[3], В.Р. Кучешева-Титова[3]

[1]*Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
[2]*Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция*
[3]*Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия*
**e-mail: green@crys.ras.ru*

Мультиферроики привлекают большое внимание в последние 15 лет из-за наблюдаемых сосуществования и взаимодействия сегнетоэлектрического и магнитного упорядочений в этих соединениях. Одними из активно изучаемых мультиферроиков являются редкоземельные ферробораты $RFe_3(BO_3)_4$ (R = Y, La-Lu) как модельный объект с двумя магнитными подсистемами ионов железа и редкоземельных ионов, магнитными и структурными фазовыми переходами и разнообразием свойств, которые зависят от элемента R в химическом составе [1]. Одним из наиболее интересных соединений в семействе является $GdFe_3(BO_3)_4$, так как он демонстрирует каскад фазовых переходов в широком диапазоне температур (4 – 500 К) и высоких давлений до 43 ГПа [2-4].

Мы представляем результаты измерений методами рентгеновской дифракции и синхротронной мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe монокристалла $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$, выполненных в Институте кристаллографии им. Шубникова РАН и на ядерно-резонансной станции ESRF ID18 в ячейке с алмазными наковальнями под высокого давления до 72 ГПа в диапазоне температур 2.6 – 295 К. Изучена и обсуждается температурная динамика структурного фазового перехода при P = 25 ГПа и спинового кроссовера при P = 45 ГПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН с использованием оборудовании Центра коллективного пользования Института кристаллографии имени Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

PROBE MÖSSBAUER STUDY OF STRUCTURAL AND MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN $BiMn_7O_{12}$ MANGANITE

V.I. Nitsenko, A.V. Sobolev, I.S. Glazkova*, I.A. Presniakov

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
**e-mail: janglaz@bk.ru*

In recent years, due to the development of high pressure – high temperature (HP–HT) synthetic methods, the AMn_7O_{12} family of double manganites has been significantly expanded: perovskite-like phases containing *A* cations, "unusual" in terms of both geometric dimensions and electronic structure, have been obtained. Stabilization of Bi^{3+} cations in the structure, which are characterized by a streochemically active lone electron pair, in combination with the Jahn-Teller character of Mn^{3+} cations, leads to a significant structural distortion and the appearance of a whole cascade of thermally induced structural phase transitions. In this case, the lattice symmetry successively changes from triclinic to cubic ($P1 \rightarrow I2/m \rightarrow I2/m(o) \rightarrow Im\bar{3}$) with increasing temperature ($T_3 \approx 290$ K, $T_2 \approx 460$ K, $T_1 \approx 608$ K, respectively) [1].

In this paper, we present the results of a probe Mössbauer study of the double manganite $BiMn_7O_{12}$ on ^{57}Fe nuclei in a wide temperature range. Previously, this approach was successfully applied to study the features of structural and magnetic phase transitions in AMn_7O_{12} (*A* = Ca, Cd, Sr, Pb) manganites, which also have a double perovskite structure [2].

As a result of the studies, the influence of impurity probe iron cations on the macroscopic properties of bismuth manganite (critical points – temperatures T_i of structural phase transitions, Neel temperatures T_N) was studied in comparison with an undoped sample. The Mössbauer measurements of $BiMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ were carried out in a wide temperature range above and below $T_{N1} \approx 53$ K. It was shown that the ^{57}Fe probe atoms isovalently substitute the Jahn-Teller Mn^{3+} cations in the octahedral sublattice, and each temperature range is characterized by the specific type of Mössbauer spectrum. The number of partial spectra Fe(*i*) and their hyperfine parameters (first of all, the quadrupole splittings Δ_i) are highly sensitive to the type of crystallographic structure of bismuth manganite, the nature of the splitting of the octahedral sites of manganese (Mn*i*) and their local environment at a given temperature.

A physical and mathematical approach to the theoretical analysis of the parameters of the electric field gradient (EFG) has been developed, taking into account the behavior of bismuth and manganese cations in the structure, which made it possible to explain the nature and driving force of phase transitions at T_1-T_3. It has been established that in the range of temperatures of existence of the monoclinic phase *I*2/*m*, the anomalous behavior of the quadrupole splitting of ^{57}Fe impurity nuclei is associated with the dynamic Jahn-Teller effect in the manganese sublattice.

In the temperature range of magnetic ordering ($T < T_{N1}$), the spectra exhibit a complex hyperfine structure of a relaxation nature. This is presumably due to the dynamic behavior of hyperfine magnetic fields at the $^{57}Fe^{3+}$ impurity centers in the $BiMn_7O_{12}$ complex magnetic structure with competing exchange interactions. The region of coexistence of paramagnetic and magnetically ordered phases found near T_{N1} can indicate the formation of a complex domain magnetic structure in $BiMn_7O_{12}$.

The work was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (grant No. 19-73-10034).

[1] A.A. Belik, Y. Matsushita, Y. Kumagai et al., Inorg. Chem. **56**, 12272 (2017).
[2] A.A. Belik, Y.S. Glazkova, Y. Katsuya et al., J. Phys. Chem. C **120**, 8278 (2016).

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МАНГАНИТЕ $BiMn_7O_{12}$

В.И. Ниценко, А.В. Соболев, Я.С. Глазкова*, И.А. Пресняков

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
**e-mail: janglaz@bk.ru*

В последние годы, благодаря развитию методов высокотемпературного синтеза с применением высокого давления, семейство двойных манганитов AMn_7O_{12} удалось существенно расширить: были получены перовскитоподобные фазы, содержащие катионы *A*, “необычные” с точки зрения как геометрических размеров, так и электронной структуры. Стабилизация в структуре катионов Bi^{3+}, характеризующихся стреохимически активной неподелённой электронной парой в совокупности с ян-теллеровским характером катионов Mn^{3+} приводит к значительному структурному искажению и появлению целого каскада термически индуцируемых структурных фазовых переходов. При этом симметрия решётки последовательно меняется от триклинной до кубической ($P1 \rightarrow I2/m \rightarrow I2/m(o) \rightarrow Im\overline{3}$) при повышении температуры ($T_3 \approx 290$ K, $T_2 \approx 460$ K, $T_1 \approx 608$ K соответственно) [1].

В настоящей работе представлены результаты зондового мессбауэровского исследования двойного манганита $BiMn_7O_{12}$ на ядрах ^{57}Fe в широком диапазоне температур. Ранее данный подход был успешно применен для изучения особенностей структурных и магнитных фазовых переходов в манганитах AMn_7O_{12} (*A* = Ca, Cd, Sr, Pb), также имеющих структуру двойного перовскита [2].

В результате проведенных исследований было изучено влияние примесных катионов железа на макроскопические свойства манганита висмута (точки структурных и магнитных фазовых переходов) в сравнении с недопированным образцом. Мессбауэровские измерения $BiMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ проведены в широком диапазоне температур, включающем все магнитные и фазовые переходы. Показано, что зондовые атомы ^{57}Fe изовалентно замещают янтеллеровские катионы Mn^{3+} только в октаэдрической подрешётке, при этом каждому температурному диапазону соответствует свой вид мессбауэровского спектра. Количество парциальных спектров Fe(*i*) и их сверхтонкие параметры (в первую очередь, величина квадрупольного расщепления Δ_i) оказались в высокой степени чувствительны к изменению симметрии элементарной ячейки и были проанализированы и количественно охарактеризованы для каждой фазы и изучена их температурная эволюция.

Разработан физико-математический подход к теоретическому анализу параметров градиента электрического поля (ГЭП), учитывающий особенности поведения катионов висмута и марганца в структуре, позволивший объяснить природу и движущую силу фазовых переходов при T_1-T_3. Установлено, что в области температур существования моноклинной фазы *I*2/*m* аномальное поведение квадрупольного расщепления примесных ядер ^{57}Fe связано с динамическим эффектом Яна-Теллера в подрешетке марганца.

В области температур магнитного упорядочения ($T < T_{N1}$) спектры демонстрируют сложную сверхтонкую структура релаксационного характера, что предположительно обусловлено динамическим поведением сверхтонких магнитных полей на ядрах примесных центров $^{57}Fe^{3+}$ в сложной магнитной структуре $BiMn_7O_{12}$, характеризующейся конкуренцией обменных взаимодействий. Обнаруженная вблизи T_{N1} область сосуществования парамагнитной и магнитоупорядоченной фаз может указывать на формирование сложной доменной магнитной структуры в $BiMn_7O_{12}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10034).

[1] A.A. Belik, Y. Matsushita, Y. Kumagai et al., Inorg. Chem. **56**, 12272 (2017).
[2] A.A. Belik, Y.S. Glazkova, Y. Katsuya et al., J. Phys. Chem. C **120**, 8278 (2016).

CORRELATION BETWEEN Fe ATOM VALENCE AND OXYGEN VACANCIES IN SUBSTITUTED $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ ORTHOFERRITE UNDER HEAT TREATMENT

V.D. Sedykh[1*], V.S. Rusakov[2], T.V. Gubaidulina[2], O.G. Rybchenko[1], V.I. Kulakov[1]

[1]*Osipyan Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka, Russia*
[2]*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
**e-mail: sedykh@issp.ac.ru*

The substituted $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ orthoferrite was studied by X-ray diffraction analysis and Mössbauer spectroscopy. A series of vacuum heat treatment in the temperature range of 200°C ÷ 650°C was performed resulting in negligible changes in the samples crystal structure.

It follows from the room-temperature Mössbauer measurements that Fe ions are in the averaged valence state. It is caused by fast electron transfer between Fe ions. The average hyperfine magnetic field at ^{57}Fe nuclei and isomer shift increase with the increasing temperature t_{ann} under vacuum annealing which is associated with an increase of vacancy quantity and correspondingly with a decrease of Fe^{4+} amount. The 85 K Mössbauer measurements showed that the averaged valence Fe state was not detected with a decreasing measurement temperature, i.e. electron transfer between Fe ions is frozen. The hyperfine parameters of low-temperature partial Mössbauer spectra obtained as a result of their model fitting [1] allow us to conclude that one of them with the smallest isomer shift and hyperfine magnetic field belongs to Fe^{4+} ions and the others, to Fe^{3+} ones. The presence of several Zeeman sextets in the spectra associated to Fe^{3+} ions is caused by the appearance of oxygen vacancies (breaking of exchange couplings Fe^{3+}–O^{2-}–Fe) and Fe^{4+} ions (weakening of exchange couplings Fe^{3+}–O^{2-}–Fe) in the nearest ionic environment of Fe atoms. Both these factors decrease the hyperfine magnetic field and change the isomer shift. A total probability of either breaking or weakening of exchange couplings decreases with increasing t_{ann}, a number of Fe^{4+} atoms decreases, and an amount of oxygen vacancies increases, Fig. 1.

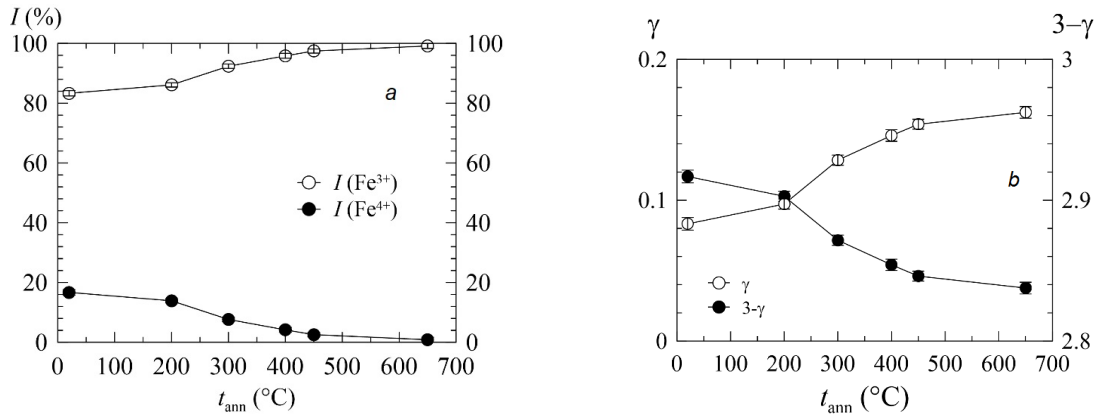


Fig.1. The t_{ann} dependence of relative intensities of partial spectra: of all Fe^{3+} ions and Fe^{4+} ions (*a*), and an amount of oxygen vacancies (γ) and oxygen ions (3–γ) (*b*) per formula unit of $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$.

Weakening of exchange couplings caused by the presence of Fe^{4+} ions plays the main role in the change of Fe^{3+} partial spectra at low annealing temperatures, and their breaking caused by the presence of oxygen vacancies, at high annealing temperatures.

As a result of model fitting the numbers of oxygen vacancies and Fe^{4+} ions per a formula unit were determined for all samples depending on the annealing temperature t_{ann}, Fig. 1. It is shown that the oxygen leaving the lattice practically finishes at the vacuum annealing temperatures higher than 450°C, and only Fe^{3+} ions are detected.

The obtained data on the relative intensities of partial spectra of different Fe ions indicate a random distribution of oxygen vacancies and Fe^{4+} ions over their crystallographic positions in the structure of substituted $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ orthoferrite.

This work was performed in the framework of the State task of the Ministry of Education and Science of the Russian federation.

[1] M.E. Matsnev, V.S. Rusakov. AIP Conf. Proceed. **1489**, 178 (2012).

ВЗАИМОСВЯЗЬ ВАЛЕНТНОСТИ АТОМОВ Fe И КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В ЗАМЕЩЕННОМ ОРТОФЕРРИТЕ $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМООБРАБОТКИ

В.Д. Седых[1*], В.С. Русаков[2], Т.В. Губайдулина[2], О.Г. Рыбченко[1], В.И. Кулаков[1]

[1] *Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия*
[2] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
**e-mail: sedykh@issp.ac.ru*

Методами рентгеноструктурного анализа и мессбауэровской спектроскопии исследован замещенный ортоферрит $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$. Выполнена серия вакуумных отжигов в интервале температур t_{ann} 200°C - 650°C, в ходе которых не обнаружено каких-либо значительных изменений в структуре образцов.

Из мессбауэровских измерений при комнатной температуре следует, что ионы Fe находятся в усредненно-валентном состоянии, что обусловлено быстрым электронным переносом между ионами Fe. При вакуумном отжиге с увеличением t_{ann} растет среднее сверхтонкое магнитное поле на ядрах ^{57}Fe и изомерный сдвиг спектра, что связано с ростом числа вакансий и, соответственно, уменьшением количества Fe^{4+}. Мессбауэровские измерения при 85 К показали, что с понижением температуры измерения усредненно-валентное состояние железа не проявляется, т.е. электронный перенос между ионами Fe замораживается. Сверхтонкие параметры парциальных низкотемпературных мессбауэровских спектров, полученные в результате их модельной расшифровки [1], дают основание заключить, что один из них, с наименьшим изомерным сдвигом и сверхтонким магнитным полем, принадлежит ионам Fe^{4+}, а остальные – Fe^{3+}. Наличие в спектрах нескольких зеемановских секстетов, относящихся к ионам Fe^{3+}, обусловлено появлением кислородных вакансий (обрыв обменной связи Fe^{3+}–O^{2-}–Fe) и ионов Fe^{4+} (ослабление обменной связи Fe^{3+}–O^{2-}–Fe) в ближайшем ионном окружении атомов Fe. Оба фактора вызывают уменьшение сверхтонкого магнитного поля и изменение изомерного сдвига спектра. С повышением t_{ann} общая вероятность или обрыва, или ослабления обменной связи падает, число атомов Fe^{4+} уменьшается, а число кислородных вакансий растет, рис. 1.

При малых температурах отжига основную роль в изменении парциальных спектров Fe^{3+} играет ослабление обменных связей, вызванное наличием ионов Fe^{4+}, а при высоких температурах – их обрыв из-за наличия кислородных вакансий.

В результате модельной расшифровки мессбауэровских спектров определены числа кислородных вакансий и ионов Fe^{4+} на формульную единицу для всех образцов в зависимости от температуры вакуумного отжига t_{ann}, рис. 1. Показано, что при температурах вакуумного отжига выше 450°C процесс выхода кислорода из решетки заканчивается, и детектируются только ионы Fe^{3+}. Полученные данные об относительных интенсивностях парциальных спектров различных ионов железа указывают на случайное распределение кислородных вакансий и ионов Fe^{4+} по своим кристаллографическим позициям в структуре замещенного ортоферрита $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ.

HYPERFINE STRUCTURE OF MÖSSBAUER SPECTRA IN SOLID SOLUTIONS $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$

N. Snegirev[1*], I. Lyubutin[1], M. Chuev[2], S. Starchikov[1], S. Yagupov[3], Yu. Mogilenec[3], M. Strugatsky[3]

[1]*FSRC "Crystallography and Photonics" of RAS, Moscow, Russia*
[2]*Valiev Institute of Physics and Technology of RAS, Moscow, Russia*
[3]*Crimean Federal University, Simferopol, Russia*
[*]*e-mail: niksnegir@yandex.ru*

Iron borate based solid solutions $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ are of great interest both for fundamental science and for practical applications [1,2]. In this work, the values of the hyperfine interaction parameters of single crystals of $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ in a wide temperature range, including the region of magnetic phase transitions (T_N), are determined by Mössbauer spectroscopy.

The Mössbauer spectra for $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ single crystals were obtained in a wide temperature range of 10–400 K. The spectra were corrected taking into account the effective thickness of the absorber using the technique described in Ref. [3]. As an example, room temperature spectra of –$FeBO_3$ and $Fe_{0.94}Ga_{0.06}BO_3$ are shown in the Fig. 1. It can be seen that even a small content of diamagnetic gallium essentially changes the shape of the spectrum of $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ in comparison with the spectrum of $FeBO_3$.

A theoretical model for describing nuclear resonance transitions in iron atoms in the approximation of combined magnetic dipole and electric quadrupole hyperfine interaction has been developed. The distribution of the hyperfine magnetic field H centered around the characteristic maxima of the binomial distribution was taken into account for different surroundings of Fe atoms by neighboring Fe and Ga atoms. The results of theoretical modeling are in good agreement with experimental data (Fig. 1).

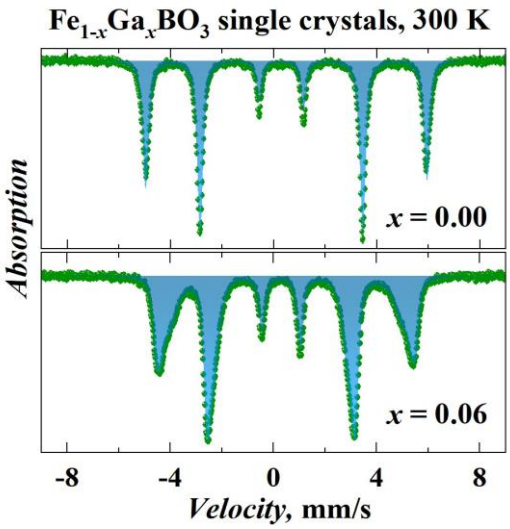


Fig. 1. Room temperature Mössbauer spectra of $FeBO_3$ (top) and $Fe_{0.94}Ga_{0.06}BO_3$ (bottom) single crystals. The dots are experimental data, the colored areas are the result of theoretical modelling.

It has been found that the spectra of $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ are a superposition of hyperfine components with different areas, which corresponds to non-equivalent environment of iron atoms by Fe and/or Ga neighbors. The relative width of the hyperfine magnetic field distribution dH/H increases with increasing temperature due to thermal fluctuations. For the $Fe_{0.94}Ga_{0.06}BO_3$ crystal, the value of the dH/H parameter is equal to 0.008 at 10 K and 0.351 at 330 K (near the T_N). This means that at low temperatures the contribution of the additional hyperfine component is negligibly small, and the spectrum is a sextet with narrow resonant lines. At high temperatures, a well-resolved additional hyperfine component appears in the spectra.

Additionally, magnetic phase transition temperatures T_N for $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ single crystals with $0 \leq x \leq 0.83$ were determined. The results obtained will be useful for elucidating the nature of the effects of gallium doping on the properties $FeBO_3$ single crystals.

This work is funded by the Russian Foundation for Basic Research, project number 19-29-12016-мк.

[1] Smirnova E. S. et al. Acta Crystallographica Section B **76,** 1100-1108 (2020).
[2] Snegirev N. et al. Journal of Alloys and Compounds **889,** 161702 (2021)
[3] Lyubutin I. S. et al. Journal of Alloys and Compounds **906,** 164348 (2022).

СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА В МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$

Н.И. Снегирёв[1*], И.С. Любутин[1], М.А. Чуев[2], С.С. Старчиков[1], С.В. Ягупов[3], Ю.А. Могиленец[3], М.Б. Стругацкий[3]

[1]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
[2]*Физико-технологический институт им. К.А Валиева РАН, Москва, Россия*
[3]*ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского», Симферополь, Россия*
e-mail: niksnegir@yandex.ru

Твердые растворы $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$, полученные на основе бората железа, могут быть использованы как в фундаментальных научных исследованиях, так и для практического применения [1,2]. В настоящей работе мётодом мёссбауэровской спектроскопии определены параметры сверхтонкого взаимодействия в монокристаллах $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ в широком диапазоне температур, включая область магнитного фазового перехода (T_N).

Мёссбауэровский спектры монокристаллов были получены в диапазоне 10–400 K. Спектры были скорректированы с учетом эффективной толщины используемого поглотителя по методике, развитой в работе [3]. На Рис. 1, в качестве примера, приведены спектры кристаллов $FeBO_3$ и $Fe_{0.94}Ga_{0.06}BO_3$. Как видно из рисунка, даже небольшое содержание диамагнитной «примеси» галлия существенно влияет на форму спектра $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ по сравнению со спектром $FeBO_3$.

Была разработана теоретическая модель, которая описывает резонансные переходы ядер железа в приближении комбинированного магнитного дипольного и электрического квадрупольного взаимодействия. Биноминальный характер распределения магнитного сверхтонкого поля H вблизи характеристических максимумов учитывался для различного типа окружения атомов Fe атомами Fe и Ga. Результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными (см. Рис. 1).

Установлено, что спектры $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ представляют собой суперпозицию сверхтонких компонент с различными площадями, которые соответствуют неэквивалентным окружениям атомов железа атомами Fe и/или Ga. Относительная ширина распределения сверхтонкого магнитного поля dH/H возрастает с увеличением температуры вследствие тепловых возмущений. Так, для кристалла $Fe_{0.94}Ga_{0.06}BO_3$ значение параметра dH/H составляет 0.008 при 10 K и 0.351 при 330 K (вблизи T_N). Это означает, что при низких температурах вклад дополнительных сверхтонких компонент пренебрежимо мал, и спектры представляют собой секстет с узкими резонансными линиями. При высоких температурах в спектрах наблюдается хорошо разрешенная дополнительная компонента.

Кроме того, температуры магнитного фазового перехода T_N были определены для кристаллов $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ с $0 \leq x \leq 0.83$. Полученные результаты будут важны для описания природы эффектов, наблюдаемых при допировании галлием монокристаллов $FeBO_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016-мк.

MAGNETIC HYPERFINE INTERACTIONS IN THE QUASI-1D ANTIFERROMAGNET $Fe_2O(SeO_3)_2$

A.V. Sobolev[1*], A.A. Aslandukova[1,2], I.S. Glazkova[1], I.A. Presniakov[1]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[2]*University of Bayreuth, Bavarian Research Institute of Experimental Geochemistry and Geophysics, Bayreuth, Germany*
**e-mail: alex@radio.chem.msu.ru*

The present work is devoted to the Mössbauer study of iron oxoselenite $Fe_2O(SeO_3)_2$ which magnetic structure is driven by rather unusual saw-tooth chains of of vertex-sharing iron ions triangles. Below the magnetic ordering temperature this compound is characterized by a sharp dichotomy of the behavior of the dependence of magnetic susceptibility in zero-field and field cooling. The observed spin-flop transition at low temperatures suggests the predominance of antiferromagnetic interactions ($T_N \approx 105$ K).

The ^{57}Fe Mossbauer spectra at $T >> T_N$ confirm the presence of three nonequivalent crystallographic sites of high-spin Fe^{3+} ions. At the same time, below T_N all the spectra demonstrate a well-resolved Zeeman structure for each type of ferric ions. Abnormally low values of magnetic hyperfine saturation fields for all subspectra of ^{57}Fe nuclei are discussed in terms of the spin reduction model ($<\Delta S> \sim 0.31$), which is associated with a reduced dimension of the magnetic subsystem. Combined analysis of the values of the hyperfine parameters obtained by interpreting the spectra below the magnetic ordering point in a full Hamiltonian of combined hiperfine interactions approach, the theoretical calculations of the parameters of the electric field gradient tensor (EFG), the analysis of the temperature dependence of the hyperfine magnetic fields, and the theoretical calculations of the energies of intra- and inter-chain exchange interactions within the framework of density functional theory (DFT) allowed us to propose $Fe_2O(SeO_3)_2$ spin structure [1]. The obtained ratios of magnitudes of magnetic exchanges are in agreement with the values estimated by us in the framework of the spin reduction model. It is shown that the magnetic structure is noncollinear with a high degree of frustration of magnetic moments. The observed phenomenon of spin relaxation in the system in the temperature range $T^* < T < T_N$ ($T^* \sim 90$ K) is also consistent with the feature of the magnetic structure. The magnetic structure of $Fe_2O(SeO_3)_2$ oxoselenite proposed in this work by Mössbauer spectroscopy was confirmed recently by neutron powder diffraction (NPD) [2].

The work was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (grant No. 19-73-10034).

[1] A.V. Sobolev, A.A. Aslandukova, E.S. Kozlyakova et al., J. Alloys Compd., **822**, 153549 (2020)
[2] K. Nawa, M. Avdeev, P. Berdonosov et al., Sci. Rep. **11**, 24049 (2021).

СВЕРХТОНКИЕ МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $Fe_2O(SeO_3)_2$

А.В. Соболев[1*], А.А. Асландукова[1,2], Я.С. Глазкова[1], И.А. Пресняков[1]

[1]*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Университет Байройта, Баварский научно-исследовательский институт экспериментальной геохимии и геофизики, Байройт, Германия*
**e-mail: alex@radio.chem.msu.ru*

Настоящая работа посвящена мессбауэровскому исследованию оксоселенита железа $Fe_2O(SeO_3)_2$, магнитная структура которого определяется достаточно необычными пилообразными цепочками из закрученных по спирали треугольных фрагментов, содержащих катионы железа. Ниже точки магнитного упорядочения это соединение характеризуется резкой дихотомией поведения зависимости магнитной восприимчивости при охлаждении в магнитном поле и без него. Наблюдающийся спин-флоп переход при низких температурах предполагает преобладание антиферромагнитных взаимодействий ($T_N \approx 105$ K).

Мессбауэровские спектры ^{57}Fe при $T >> T_N$ подтверждают наличие трех неэквивалентных кристаллографических позиций высокоспиновых ионов Fe^{3+}. При этом ниже T_N в спектрах присутствует хорошо разрешенная зеемановская структура для каждого сорта ионов железа. Аномально низкие значения сверхтонких полей насыщения для всех подспектров ядер ^{57}Fe обсуждаются в рамках модели спиновой редукции ($<\Delta S> \sim 0.31$), которая связана с пониженной размерностью магнитной подсистемы. Комбинированный анализ значений сверхтонких параметров, полученных при интерпретации спектров ниже точки магнитного упорядочения в рамках полного гамильтониана комбинированных сверхтонких взаимодействий, теоретические расчеты параметров тензора градиента электрического поля (ГЭП), анализ температурной зависимости сверхтонких полей и теоретические расчеты энергий обменных внутри- и межцепочечных взаимодействий в рамках теории функционала плотности (DFT) позволили в совокупности предложить модель спиновой структуры $Fe_2O(SeO_3)_2$ [1]. Полученные отношения величин магнитных обменов находятся в согласии со значениями, оцененными нами в рамках модели спиновой редукции. Показано, что магнитная структура является неколлинеарной с высокой степенью фрустрации магнитных моментов. Наблюдаемое явление спиновой релаксации в системе в диапазоне температур $T^* < T < T_N$ ($T^* \sim 90$ K) так же согласуется с характером магнитной структуры. Предложенная в этой работе на основании мессбауэровского исследования магнитная структура оксоселенита $Fe_2O(SeO_3)_2$ позднее была подтверждена методом дифракции нейтронов [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10034).

[1] A.V. Sobolev, A.A. Aslandukova, E.S. Kozlyakova et al., J. Alloys Compd., **822**, 153549 (2020)
[2] K. Nawa, M. Avdeev, P. Berdonosov et al., Sci. Rep. **11**, 24049 (2021).

MAGNETITE CUBES WITH SPIN VORTEX BEHAVIOR INVESTIGATION BY MOSSBAUER SPECTROSCOPY AND FORC

T.Yu. Kiseleva[1*], S. Kobayashi[2], V.S. Rusakov[1], K.V. Frolov[3], J. Manjanna[4], N. Jargalan[5], D. Sangaa[5]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Physics Faculty, Moscow Russia*
[2]*Iwate University, Faculty of Science and Engineering, Morioka, Japan*
[3]*Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and photonics", RAS, Moscow, Russia*
[4]*Rani Channamma University, Department of Chemistry, Belagavi, India*
[5]*Institute of Physics and Technology, Ulaanbaatar, Mongolia*
**e-mail: Kiseleva.tyu@physics.ms.ru*

Unceasing attention to iron-oxide magnetic nanoparticles is due to their high potential in the field of biomedicine such as targeted drug delivery, magnetic hyperthermia, magneto-mechanical stimulation, components of bioimplants etc. It was shown yet that depending on the morphology, magnetic nanoparticles exhibit various magnetic states. The very interesting from fundamental and practical point of view is spin vortex state of the oxide's particles.

In recent work - magnetic behavior of the nanosized magnetite Fe_3O_4 particles synthesized in the form of cubes and bubbles were investigated below and above Verwey transition temperature Tv~110 K [1-2]. Formation and annihilation of spin vortexes in specimens were shown applying magnetization measurements in the form of magnetic first-order reversal curves (FORC).

We apply Mossbauer spectroscopy measurements from 300 to 90 K to study of cubic nanosized particles behavior through magnetic transition. The sophisticated spectra fitting with SpectrRelax software in the approach including magnetite known structure model representation so as revelation of the size and stoichiometry effects allowed us to obtain additional information about cube's specimens magnetic behavior peculiarity.

Authors acknowledge RFBR 19-52-44003 Joint project for support

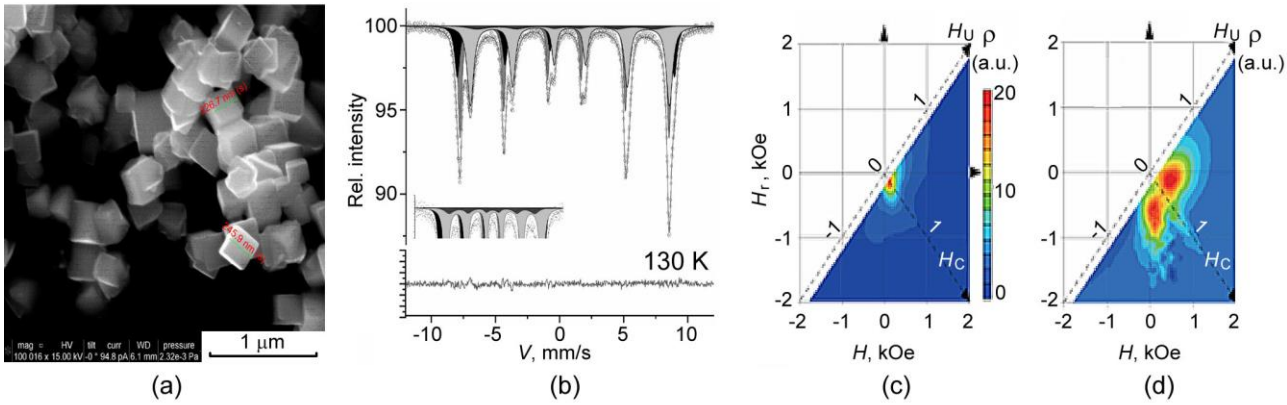


Fig.1 SEM image (a), Mossbauer spectrum of magnetite cubes with enlargement of spectrum fine structure in inclusion (b) and FORC magnetization behavior diagram at different temperature through transition at 300K(c), 90K(d).

[1] S. M. Chiba, S. Kobayashi et al J.Magnetism and magnetic materials. 512 (2020)
[2] T. Sato, K. Nagaoka, S.Kobayashi et al. AIP Adv. 7 (2017)

ИССЛЕДОВАНИЕ КУБИКОВ МАГНЕТИТА СО СПИН-ВОРТЕКСНЫМ ПОВЕДЕНИЕМ МЕТОДАМИ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И FORC

Т.Ю. Киселева[1*], С. Кобаяши[2], В.С. Русаков[1], К.В. Фролов[3], Д. Маньяна[4], Н. Жаргалан[5], Д. Сангаа[5]

[1]*Московский государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Университет Ивате, Факультет науки и инженерии, Мариока, Япония*
[3]*Институт кристаллографии имени Шубникова ФЦ «Кристаллография и фотоника», РАН, Москва, Россия*
[4]*Университет Рани Чаннамма, Химический факультет, Белагава, Иедия*
[5]*Институт физики и технологии Монгольской академии наук, Улан-Батор, Монголия*
**e-mail: Kiseleva.tyu@physics.msu.ru*

Пристальное внимание к магнитным наночастицам оксида железа обусловлено их высоким потенциалом в области биомедицины (адресной доставки лекарств, магнитной гипертермии, магнитомеханической стимуляции, использования в качестве компонент биоимплантов). Было показано, что в зависимости от морфологии, магнитные наночастицы проявляют различные магнитные состояния. Интересным с фундаментальной и практической точки зрения является спин-вортексное состояние частиц оксида железа.

В работах [1-2] исследовалось магнитное поведение ниже и выше температуры перехода Вервея Tv~110 К наноразмерных частицах магнетита Fe_3O_4, синтезированных в виде кубиков и сфер. Анализ диаграмм кривых перемагничивания (FORC) при разных температурах показал формирование и аннигиляцию спинового вихря в образцах.

Мы провели исследование наноразмерных частиц магнетита кубической формы методом мессбауэровской спектроскопии при разных температурах (90-300К). Комплексная аппроксимация спектров с помощью программного обеспечения SpectrRelax в методическом подходе, включающем представление модели кристаллической и магнитной структуры магнетита с выявлением размерных эффектов, стехиометрии частиц и их поверхностных состояний, позволила нам получить дополнительную информацию о факторах, влияющих на особенности магнитного поведения образцов.

STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN LOW-NICKEL Fe-Ni ALLOYS PROBED BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

N.M. Kleinerman[1*], A.V. Protasov[1,2], S.P. Naumov[1,2], V.S. Gaviko[1,2].

[1]*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia*
[2]*Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia*
**e-mail: kleinerman@imp.uran.ru*

The current century's development of experimental and computational tools opens up a possibility of investigating many well-known binary systems at a novel level. One of the examples is Fe-Ni system. Alloys of this system take significant place in applications of modern engineering. Yet, among the numerous studies, far scarcer are those devoted to Fe-Ni alloys of the low-nickel end of the phase diagram, though these alloys are of special interest for the researchers who study both fundamental problems of martensitic transformations and properties of the Fe-Ni binary and quasibinary alloys for particular applications. By composition, $Fe_{100-x}Ni_x$ alloys (x = 3 – 20) fall in the region of conventional phase diagram where martensitic transformation takes place and boundaries are drawn between the regions of existence of α_1-phase formed by the diffusion mechanism and α_2 phase attributed to martensitic $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation, the specificity of the latter being broadened X-ray reflections. Several works reported on anomalies in the behavior of lattice parameters of BCC phase and average magnetic moment, which are still paid poor attention. With this, particulars of structural state of the alloys under discussion remain unclear. Minding the scale-related limitations of integral morphological techniques, application of local investigation methods such as Mössbauer spectroscopy seems demandable. Hence, the task set in this work is to describe fine peculiarities of the martensitic structure and phase composition of Fe-Ni alloys with the Ni content ranging from 3 to 20 at.% using Mössbauer spectroscopy

Two series of samples were investigated: water-quenched after homogenization at 1100°C for 50 h and annealed further at 500°C for 72 h and water-quenched.

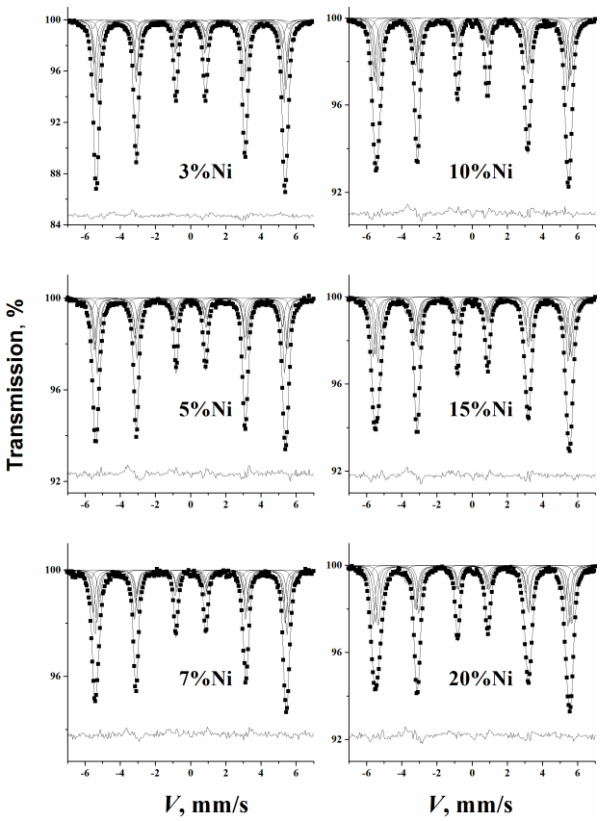


Fig. 1. Mössbauer spectra of alloys subjected to quenching and their fitting.

Mössbauer spectra were treated using both restoration of distributions of probability densities of hyperfine fields and fitting with a number of subspectra. As an example, in Fig. 1, spectra measured after quenching and treated with 6 subspectra are shown. Analysis of spectral parameters makes it possible to conclude on the fine structural peculiarities of the alloys undergone martensitic transformations.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme "Magnet").

МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ Fe-Ni С НИЗКИМ СОДЕРЖАНИЕМ НИКЕЛЯ

Н.М. Клейнерман[1*], А.В. Протасов[1,2], С.П. Наумов[1,2], В.С. Гавико[1,2].

[1] *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2] *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: kleinerman@imp.uran.ru*

Современное развитие экспериментальных и расчетных методик открывает возможности исследования на новом уровне многих хорошо известных систем. Одним из примеров является система Fe-Ni. Сплавы этой системы занимают значительное место в современных технических применениях. Тем не менее, среди многочисленных исследований, посвященные сплавам с низким содержанием никеля работы встречаются значительно реже, хотя эти сплавы представляют особый интерес, как для решения фундаментальных проблем мартенситных превращений, так и для понимания свойств бинарных и квазибинарных сплавов для специальных применений.

Сплавы $Fe_{100-x}Ni_x$ (x = 3 – 20) находятся в области фазовой диаграммы, в которой происходят мартенситные превращения, и показаны границы существования α_1-фазы, сформированной по диффузионному механизму, и α_2 фазы, которая является результатом мартенситного превращения. Особенностью α_2 фазы считаются уширенные пики на рентгеновских дифрактограммах. В ряде работ сообщалось об аномалиях поведения среднего параметра решетки ОЦК фазы и среднего магнитного момента в этом концентрационном диапазоне, но объяснению этих аномалий и структурных особенностей таких сплавов было уделено мало внимания. С учетом ограничений интегральных морфологических методов в отношении размерности структурных компонентов возрастает роль локальных методов исследования. Задачей данной работы было описание особенностей мартенситной структуры и фазового состава сплавов Fe-Ni с концентрацией никеля от 3 до 20 ат.%, используя метод мёссбауэровской спектроскопии.

Были исследованы две серии образцов: сплавы, закаленные в воду после гомогенизации при 1100°C в течение 50 часов, и эти же сплавы, прошедшие дополнительный отжиг при 500°C в течение 72 часов и вновь закаленные в воду.

Мессбауэровские спектры были обработаны с использованием двух подходов: построение функций распределения сверхтонких полей и описание спектров с помощью набора подспектров. На рис. 1 показаны спектры сплавов, прошедших закалку, и их описание с помощью 6 подспектров. Анализ спектральных параметров позволяет делать выводы о тонких структурных особенностях сплавов, претерпевших мартенситные превращения.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Магнит»)

HYPERFINE INTERACTIONS IN THE NONSTOICHIOMETRIC $ErFe_2Mn_x$ COMPOUNDS

S.P. Naumov[1,2*], N.V. Mushnikov[1,2], N.M. Kleinerman[1], V.G. Semenov[3]

[1] *M.N. Mikheev Institute of Metal Physics UB RAS, Ekaterinburg, Russia*
[2] *Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia*
[3] *Saint Petersburg University, Saint Petersburg, Russia*
**e-mail: naumov_sp@imp.uran.ru*

Compounds RFe_2, which crystallize into a cubic Laves phase, are actively investigated in view of their giant magnetostriction and magnetocaloric effect. It was supposed that such compounds cannot exist off the stoichiometry; yet, in recent years, a series of nonstoichiometric RFe_2Mn_x compounds with the Laves-type crystal structure were synthesized, their magnetic properties being unusual.

In the work presented, ^{57}Fe Mössbauer spectra (Fig. 1) of new nonstoichiometric compounds $ErFe_2Mn_x$ (x = 0 - 0.4) with the cubic structure, were measured and treated in the frame of tensor model for the description of anisotropy of hyperfine interactions [1].

It is shown that increasing Mn concentration in the samples results in a decrease in both anisotropic part of hyperfine field (HFF), which turned out virtually equal for all possible configurations of a Fe-atom neighborhood in each sample, and isotropic part as well. However, the isotropic part of HFF differs for various local coordinations of the ^{57}Fe neighborhood (0, 1, 2, 3 Mn atoms). Each additional Mn atom in the nearest neighborhood lowers the isotropic part of HFF by 23-24 kOe. The data obtained served to estimate the corresponding change in the magnetic moment Fe atom as $\Delta\mu_{Fe} = 0.16\ \mu_B$/ат.Mn.

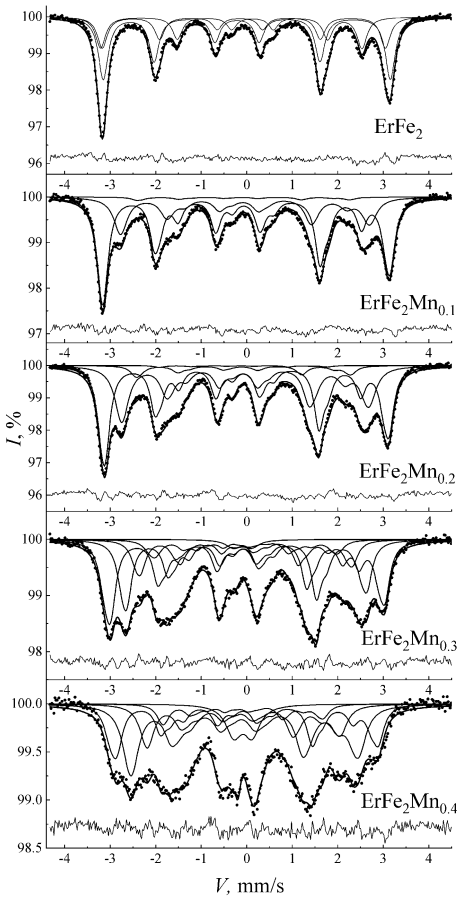


Fig. 1. Mössbauer spectra of the $ErFe_2Mn_x$ compounds and their fitting within tensor approach to the description of the anisotropy of hyperfine interactions.

It is shown that the direction of HFF in all samples lies in the plane (110) off the [111] axis of the unit cell, and, with increasing Mn content, declines toward the [110] axis. This can indicate a spin reorientation of magnetic moments of Fe atoms brought by Mn atoms.

Analysis of isomer shifts (IS) of subspectra characterizing different atomic configurations showed that, for all samples, IS of the subspectrum related to the Fe-atom neighborhood free of Mn atoms is unchanged, which testifies to the invariance of electronic structure of Fe atoms. On appearing of Mn atoms in the nearest neighborhood of Fe atoms, IS of the corresponding subspectra decreases; the decrease being stronger, the higher the content of Mn atoms. This evidences increasing effective density of *s*-electrons at ^{57}Fe nuclei in such configurations.

It is found that the ratio of intensities of susbspectra describing different local atomic configurations obtained for each particular spectrum differs from that expected for the cases of both Mn substitution for Fe solely and equiprobable Mn occupation of both types of positions - Er and Fe. A conclusion can be made that Mn atoms are distributed over both sublattices; yet, this distribution is more complicated than an ordinary statistical substitution without formation of vacancies.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Magnet”), supported in part by RFBR and Government of Sverdlovsk Region (project No. 20-42-660008).

[1] V. S. Rusakov, V. S. Pokatilov, T. V. Gubaidulina, M. E. Matsnev, Phys. Met. Metalogr. **120**, 339–344 (2019).

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ $ErFe_2Mn_x$

С.П. Наумов[1,2*], Н.В. Мушников[1,2], Н.М. Клейнерман[1], В.Г. Семёнов[3]

[1] *Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2] *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*
[3] *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
**e-mail: naumov_sp@imp.uran.ru*

Соединения RFe$_2$, кристаллизующиеся в кубическую фазу Лавеса, активно исследуются благодаря гигантской магнитострикции и большой величине магнитокалорического эффекта. Предполагалось, что такие соединения не испытывают отклонения от стехиометрии, но в последние годы были получены нестехиометрические соединений RFe$_2$Mn$_x$, которые также кристаллизуются в фазу Лавеса и демонстрируют необычные магнитные свойства.

В настоящей работе получены ^{57}Fe мёссбауэровские спектры (Fig. 1) новых нестехиометрических соединений $ErFe_2Mn_x$ (x = 0 - 0.4) с кубической структурой, которые были обработаны в рамках тензорной модели описания анизотропии сверхтонких взаимодействий [1].

В результате показано, что увеличение содержания Mn вызывает уменьшение как анизотропной части сверхтонкого поля (СТП), которая оказалась практически одинаковой для всех возможных окружений атома Fe в каждом образце, так и изотропной части СТП. Однако изотропная часть отличается для разных локальных окружений ^{57}Fe (без Mn, с 1, 2, 3 атомами Mn). Каждый дополнительный атом Mn в ближайшем окружении Fe вызывает уменьшение изотропной части СТП на 23-24 кЭ, что позволило оценить соответствующее изменение магнитного момента на Fe – $\Delta\mu_{Fe}$ = 0.16 μ_B/ат.Mn.

Показано, что направление СТП на ядрах ^{57}Fe для всех образцов лежит в плоскости (110) и не совпадает с осью [111] элементарной ячейки, а с увеличением содержания марганца все больше отклоняется в сторону [110], что может говорить о спиновой переориентации магнитных моментов атомов Fe при добавлении марганца.

Анализ изомерных сдвигов подспектров, характеризующих различные атомные окружения ^{57}Fe, показал, что для всех образцов сдвиг подспектра, описывающего окружения без Mn, остается одинаковым, что говорит о неизменности электронной структуры атомов Fe в таких окружениях. При появлении атомов Mn в ближайшем окружении Fe изомерный сдвиг соответствующих подспектров уменьшается, причем, тем сильнее, чем больше Mn содержит образец. Это свидетельствует об увеличении эффективной плотности s-электронов на ядрах ^{57}Fe в таких окружениях.

Соотношение интенсивностей подспектров, описывающих различные типы локальных окружений атомов Fe, в рамках каждого отдельного мёссбауэровского спектра отличается от того, что следовало бы ожидать как при замещении марганцем только позиций Fe, так и при равновероятном замещении атомами Mn обоих типов позиций - Er и Fe. Можно сделать вывод, что атомы Mn распределяются по обеим подрешеткам, но это распределение носит более сложный характер, чем простое статистическое замещение без образования вакансий.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Магнит») при частичной поддержке РФФИ и Правительства Свердловской области (проект № 20-42-660008).

FEATURES OF SPATIAL SPIN-MODULATED STRUCTURE IN MULTIFERROICS $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1)

V.S. Pokatilov[1*], V.S. Rusakov[2], A.M. Gapochka[2], A.O. Makarova[1]

[1]*MIREA– Russian Technological University, Moscow, Russian Federation*
[2]*M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
**e-mail: pokatilov@mail.ru*

The report presents the results of a study of the nature and mechanisms of the formation of a spatial spin-modulated structure (SSMS) of cycloid type, local atomic, valence and magnetic states of iron atoms in multiferroics based on $BiFeO_3$ – in substituted ferrites $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1). Single-phase samples were obtained by solid-state synthesis. X-ray diffraction studies performed on a MiniFlex 600 diffractometer showed that the samples had a rhombohedral structure.

Model fitting of the Mössbauer spectra of samples of the $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1) system, obtained at room temperature, was carried out within the framework of the anharmonic spin modulation (ASM) model realised in the SpectrRelax program [1]. For an adequate description of the Mossbauer spectra, the existence of various states and positions of trivalent iron cations with six, five and four oxygen atoms in the nearest atomic environment (octahedral, pyramidal and tetrahedral oxygen environments) were taken into account. These iron cations corresponded to three partial spectra in the model of a single anharmonic spin wave, in which the spins of all iron atoms take part.

It was found that in the studied multiferroics $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ **(**x = 0÷0.1) there is a cycloid-type SSMS. The spin wave anharmonicity parameter m is determined, which increases with increasing Sr concentration from m = 0.115 at x = 0 to m = 0.46 at x = 0.1. In $BiFeO_3$ ferrite, there is a magnetic anisotropy with a positive effective magnetic anisotropy constant $K_{eff} > 0$. It is found that the substitution of trivalent Bi atoms with divalent Sr atoms increases the magnetic anisotropy constant K_{eff} from 0.57 erg/cm^3 (at x = 0) to 2.14 erg/cm^3 (at x = 0.10). As the estimates of the contributions to K_{eff} have shown, the growth of K_{ef} with an increase in x is due to an increase of the contribution of uniaxial magnetic anisotropy K_u, which is typical for an antiferromagnetic system in which there is no skew of magnetic sublattices.

The concentration dependences of the isotropic H_{is} and anisotropic H_{an} of hyperfine magnetic fields, the isomer shift δ, and the lattice contribution ε_{lat} to the quadrupole shift of the Mössbauer spectrum components for ^{57}Fe nuclei in multiferroics $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1) at room temperature are obtained. There are three groups of parameters H_{is}, δ, and ε_{lat} corresponding to trivalent iron atoms in octahedral, pyramidal, and tetrahedral oxygen environments.

The work was supported by RFBR grant No. 20-02-00795. The authors thank M.V. Lomonosov Moscow State University for updating the equipment for scientific research used in the performance of the work.

[1] M.E. Matsnev and V.S. Rusakov, *AIP Conference Proceedings* **1622**, 40–49 (2014).

ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СПИН-МОДУЛИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1)

В.С. Покатилов[1*], В.С. Русаков[2], А.М. Гапочка[2], А.О. Макарова[1]

[1]*МИРЭА – Российский Технологический университет, Москва, Россия*
[2]*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
**e-mail: pokatilov@mail.ru*

В докладе представлены результаты исследования природы и механизмов формирования пространственной спин-модулированной структуры (ПСМС) циклоидного типа, локальных атомных, валентных и магнитных состояний атомов железа в мультиферроиках на основе $BiFeO_3$ – в замещенных ферритах $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1). Однофазные образцы получены методом твердотельного синтеза. Рентгеноструктурные исследования, выполненные на дифрактометре MiniFlex 600, показали, что образцы имели ромбоэдрическую структуру.

Модельная обработка мессбауэровских спектров образцов системы $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1), полученных при комнатной температуре, проведена в рамках модели ангармонической спиновой модуляции (ASM), реализованной в программе SpectrRelax [1]. Для адекватного описания мессбауэровских спектров учитывалось существование различных состояний и позиций трехвалентных катионов железа с шестью, пятью и четырьмя атомами кислорода в ближайшем атомном окружении (октаэдрическом, пирамидальном и тетраэдрическом кислородном окружениях). Этим катионам железа соответствовали три парциальных спектра в модели единой ангармонической спиновой волны, в которой принимают участие спины всех атомов железа.

Установлено, что в исследованных мультиферроиках $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1) существует ПСМС циклоидного типа. Определен параметр ангармонизма спиновой волны m, который с увеличением концентрации Sr увеличивается от m = 0.115 при x = 0 до m = 0.46 при x = 0.1. В феррите $BiFeO_3$ существует магнитная анизотропии с положительной эффективной константой магнитной анизотропии $K_{eff} > 0$. Установлено, что замещение трехвалентных атомов Bi двухвалентными атомами Sr константа магнитной анизотропии K_{eff} увеличивается от 0.57 эрг/см^3 (при x = 0) до 2.14 эрг/см^3 (при x = 0.10). Как показали оценки вкладов в K_{eff}, рост K_{eff} при увеличении x обусловлен ростом вклада одноосной магнитной анизотропии K_u, которая типична для антиферромагнитной системы без скоса магнитных подрешеток.

Получены концентрационные зависимости изотропного H_{is} и анизотропного H_{an} сверхтонких магнитных полей, сдвига мессбауэровского спектра δ и решеточного вклада ε_{lat} в квадрупольное смещение компонент мессбауэровского спектра для ядер ^{57}Fe в мультиферроиках $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-\gamma}$ (x = 0÷0.1) при комнатной температуре. Наблюдаются три группы значений параметров H_{is}, δ и ε_{lat}, соответствующих трехвалентным атомам железа в октаэдрическом, пирамидальном и тетраэдрическом кислородных окружениях.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант No. 20-02-00795а. Авторы благодарят Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова за обновление оборудования для научных исследований, использованного при выполнении работы.

EFFECT OF HEAT TREATMENT ON THE STRUCTURE AND MAGNETIC STATE OF TERNARY MECHANICALLY SYNTHESIZED $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 at.%) ALLOYS

A.G. Ivanova[1*], E.V. Voronina[1], A.F. Abdullin[1], A.K. Arzhnikov[2]

[1]*Kazan Federal University, Kazan, Russia*
[2]*Udmurt Federal Research Center, Izhevsk, Russia*
**e-mail: 19ivanova91@gmail.com*

The inherent magnetic inhomogeneities is one of the leading motivations for a detailed study of a whole group of materials actual for magnetoelectronic technologies. One of these groups are Fe-Al alloys [1, 2]. Most of studies are devoted to the magnetic behavior of $Fe_{100-x}Al_x$ – based alloys, x = 30÷50 at.% Al. It was shown in [3] that the addition of a small amount of boron (<1 at.%) to the $Fe_{55}Al_{45}$ binary alloy and subsequent heat treatment significantly improve its mechanical properties.

The purpose of present work is to study the effect of the boron addition into the binary alloy $Fe_{65}Al_{35}$ and to find the influence of the heat treatment on structure and magnetic properties of the ternary mechanically alloyed from the elemental constituents powders $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 at.%). The synthesized disordered nanocrystalline and ordered alloys were studied by X-ray diffraction, Mössbauer spectroscopy and magnetic measurements. Theoretical calculations of local magnetic characteristics were performed within the the density functional theory [4].

Figures 1 and 2 show X-ray diffraction patterns and Mössbauer spectra of the $Fe_{65}Al_{30}B_5$ alloy after mechanical alloying and subsequent annealing of different durations at different temperatures. Annealing at 400°C for 2, 4, and 32 h made it possible to obtain ternary ordered alloys $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 at.%) in a single-phase state. An analysis of the Mössbauer spectra measured at different temperatures (4.2–300 K), together with the data of magnetic measurements, indicates that the dominant magnetic phase of the ternary alloys under study is ferromagnetic.

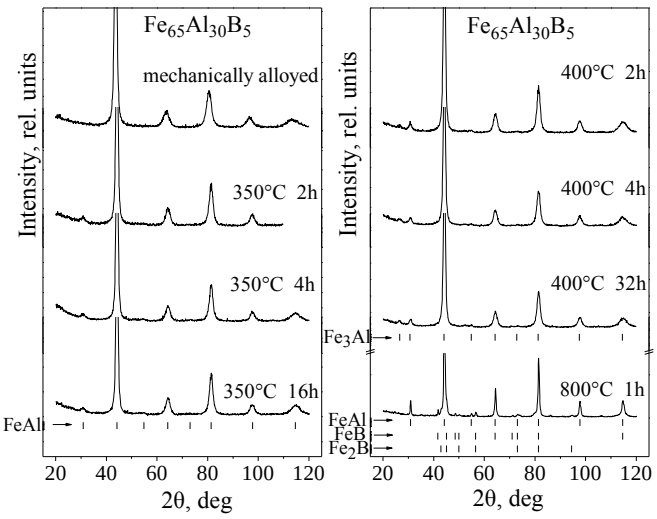


Fig. 1. X-ray diffraction patterns of the $Fe_{65}Al_{30}B_5$ alloy after mechanical alloying and subsequent annealing of different durations at different temperatures.

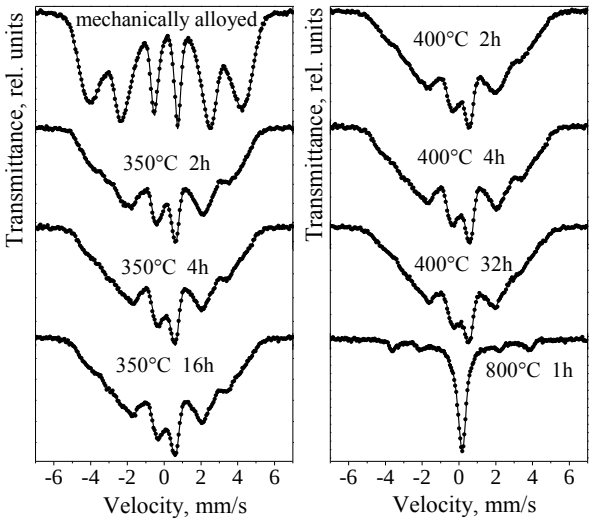


Fig. 2. Room temperature Mössbauer spectra for the $Fe_{65}Al_{30}B_5$ alloy after mechanical alloying and subsequent annealing.

In order to interpret the Mössbauer spectroscopy results, *ab initio* calculations were performed. It was found that when B atoms are added to the $D0_3$ Fe-Al supercell, the local symmetry inside the cell reduces. This results in an increase in the distances between Fe atoms and in growth of local magnetic characteristics, as a consequence. The ^{57}Fe HFF calculated under the assumption that boron atoms occupy, as lattice sites as interstices, made it possible to explain and approximate the Mössbauer spectra of the Fe-Al-B system.

[1] J.W. Cable et al., Phys. Rev. B. **16**, 1132–1137 (1977).
[2] D.R. Noakes et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 217201 (2003).
[3] J. Bystrzycki and R.A. Varin, Mater. Sci. Eng. A. **270**, 151–161 (1999).
[4] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran and L. D. Marks, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, (2018).

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ ТРОЙНЫХ МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ СПЛАВОВ $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 ат. %)

А.Г. Иванова[1*], Е.В. Воронина[1], А.Ф. Абдуллин[1], А.К. Аржников[2]

[1]*Казанский федеральный университет, Казань, Россия*
[2]*УдмФИЦ, Ижевск, Россия*
**e-mail: 19ivanova91@gmail.com*

Естественное присутствие магнитных неоднородностей является одной из ведущих мотиваций детального изучения целой группы материалов актуальных для магнитоэлектронных технологий. Одну из таких групп представляют сплавы Fe-Al [1, 2]. Большинство работ посвящено магнитному поведению сплавов на основе $Fe_{100-x}Al_x$ в диапазоне концентраций x = 30 ÷ 50 ат.% Al. В работе [3] было показано, что добавление небольшого количества бора (< 1 ат.%) в двойной сплав $Fe_{55}Al_{45}$ и последующая термическая обработка значительно улучшают его механические свойства.

Целью данной работы является изучение эффекта введения бора в двойной сплав $Fe_{65}Al_{35}$ и влияния условий термической обработки тройных механосплавленных из элементарных компонентов порошков $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 ат.%) на их магнитное и структурное состояния. Синтезированные разупорядоченные нанокристаллические и упорядоченные сплавы исследовались методами рентгеноструктурного анализа, мессбауэровской спектроскопии и магнитных измерений. Теоретические расчеты локальных магнитных характеристик были выполнены в рамках теории функционала плотности [4].

На рисунках 1 и 2 приведены рентгеновские дифрактограммы и мессбауэровские спектры сплава $Fe_{65}Al_{30}B_5$, соответственно, после механического сплавления и последующего отжига разной длительности при различных температурах. Отжиг при 400°C в течение 2, 4, 32 ч позволил получить тройные упорядоченные сплавы $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 ат.%) в однофазном состоянии. Анализ мессбауэровских спектров, измеренных при различных температурах (4.2–300 К), в совокупности с данными магнитных измерений свидетельствует о том, что доминирующая магнитная фаза исследуемых тройных сплавов – ферромагнитная.

С целью интерпретации мессбауэровских спектров $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ были выполнены расчеты из первых принципов, которые показали, что при добавлении атомов B в $D0_3$ сверхячейку Fe-Al локальная симметрия внутри ячейки понижается. Это приводит к увеличению расстояний между атомами Fe и, как следствие, к росту локальных магнитных характеристик. СТМП на ядре ^{57}Fe, рассчитанные в предположении, что атомы бора занимают, и узлы решетки и междоузлия, позволили объяснить и аппроксимировать мессбауэровские спектры системы Fe-Al-B.

RELAXATION PROCESSES OBSERVED IN Ca- AND Sr-DOPED LANTHANUM MANGANITES REVEALED BY ^{57}Fe MÖSSBAUER SPECTROSCOPY AND MAGNETIC MEASUREMENTS

D.I. Pchelina[1*], V.D. Sedykh[2], N.I. Chistyakova[1], Yu.A. Alekhina[1], A.N. Tselebrovskiy[1], V.S. Rusakov[1]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[2]*Institute of Solid State Physics, RAS, Chernogolovka, Russia*
**e-mail: di.pchelina@physics.msu.ru*

Doped lanthanum manganites $La_{1-x}A_xMnO$, where *A* is a divalent alkali-earth metal ion Ca^{2+}, Sr^{2+} or Ba^{2+}, are of great interest due to the wide diversity of physical properties exhibited [1-3]. Varying over a wide concentration range and the type of doping element *A* significantly changes the properties of these materials, which leads to the formulation attractive problems in the physics of strongly correlated systems, including the mechanisms elucidation of the relationship between their crystal structure and magnetic properties. There are still questions about appearance of the spontaneous magnetization in doped lanthanum manganites, mechanisms of the onset of magnetic phase transitions, and the nature of relaxation processes.

In this work, investigations of the aliovalent-doped lanthanum manganites $La_{1-x}A_xMnO_{3+\delta}$ (*A* = Ca, Sr; x = 0.05, 0.10, 0.20) prepared by sol-gel method followed with heat treatment (non-stoichiometric and stoichiometric composition) in the temperature range with the magnetic phase transitions temperatures were carried out, including magnetic measurements and ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy (Fig. 1).

All studied lanthanum manganites of non-stoichiometric composition are single-phase with a rhombohedral structure (sp. gr. *R-3c*), which undergo a transition from the ferromagnetic to the paramagnetic state at temperatures from 186 to 274 K for the Sr-doped system, and from 214 to 225 K – for Ca-doped system. Vacuum annealing at 650°C of nonstoichiometric doped lanthanum manganites leads to the formation of phase-separated systems, which are complex of orthorhombic phases (sp. gr. *Pnma*) with different ferromagnetic and antiferromagnetic positions of the spin moments of Mn. The Curie and Neel temperatures for such systems are in the range from 146 to 188 K and from 119 to 134 K, respectively.

In all studied systems, nanosized ferromagnetic clusters with fluctuations of their magnetic moment were observed. The formation of clusters occurs due to the presence of competing ferro- and antiferromagnetic interactions, leading to the frustration of the magnetic moment of the cluster, which causes its relaxation behavior. The size of ferromagnetic clusters in the superparamagnetic state calculated, the size varies within 3–6 nm. The size of the clusters for ferromagnetic phases does not depend on the *A* content. Phases with antiferromagnetic ordering are characterized by a smaller cluster size.

The young scientist is a scholarship holder of the Foundation for the Development of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS" №21-2-2-37-1.

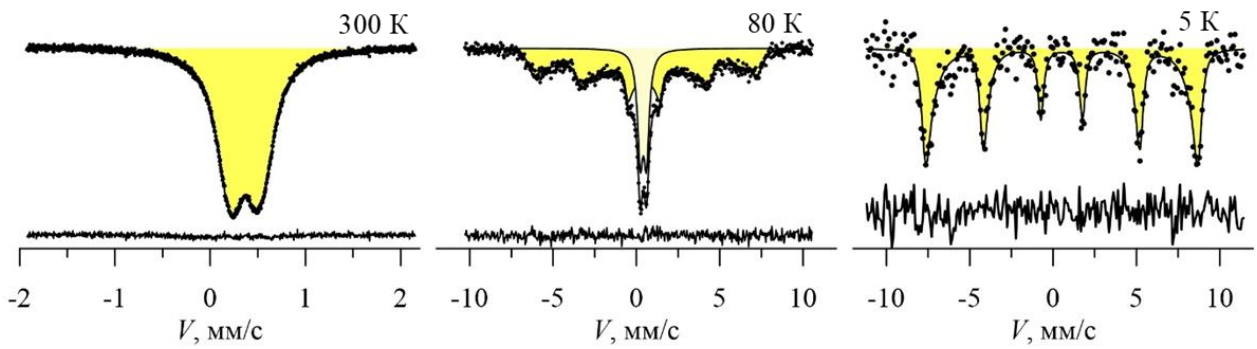


Fig. 1. ^{57}Fe Mössbauer spectra of $La_{0.95}Ca_{0.05}MnO_{3+\delta}$ measured at 300 K, 80 K and 5 K.

[1] R.J. Singh, J. Mod. Phys. 04 (2013) 191–199.
[2] J.M. De Teresa, M.R. Ibarra, P.A. Algarabel, C. Ritter, C. Marquina, J. Blasco, J. Garcia, A. del Moral, Z. Arnold, Nature. 386 (1997) 256–259.
[3] S.S.P. Parkin, Annu. Rev. Mater. Sci. 25 (1995) 357–388.

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ, ВЫЯВЛЕННЫЕ В Ca- И Sr-ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТАХ ЛАНТАНА МЕТОДАМИ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МАГНИТНЫМИ ИЗМЕРЕНИЯМИ

Д.И. Пчелина[1*], В.Д. Седых[2], Н.И. Чистякова[1], Ю.А. Алехина[1], А.Н. Целебровский[1], В.С. Русаков[1]

[1] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2] *Институт физики твердого тела, Черноголовка, Россия*
**e-mail: di.pchelina@physics.msu.ru*

Интерес к манганитам лантана $La_{1-x}A_xMnO_3$, легированных щелочноземельными элементами Ca^{2+}, Sr^{2+} или Ba^{2+}, связан с большим разнообразием проявляемых ими физических свойств [1-3]. Варьирование в широких пределах концентраций и типа легирующего элемента *A* существенно меняет свойства данных материалов, что приводит к постановке ряда интересных задач в физике сильнокоррелированных систем, в том числе выяснение механизмов взаимосвязи между их кристаллической структурой и магнитными свойствами. До сих пор остаются вопросы о причинах появления спонтанной намагниченности в системе легированных манганитов лантана, механизмах возникновения магнитных фазовых переходов и природе релаксационных процессов.

В данной работе проведены исследования, включающие магнитные измерения и зондовую мессбауэровскую спектроскопию на ядрах ^{57}Fe атомов Fe (Рис. 1), гетеровалентно легированных манганитов лантана $La_{1-x}A_xMnO_{3+\delta}$ (*A* = Ca, Sr; x = 0.05, 0.10, 0.20), синтезированных золь-гель методом с последующей вакуумной термообработкой (нестехиометрического и стехиометрического составов), в диапазоне температур, включающем температуры магнитных фазовых переходов.

Все исследованные манганиты лантана нестехиометрического состава являются однофазными с ромбоэдрической структурой (пр. гр. *R-3c*), которые претерпевают переход из ферромагнитного в парамагнитное состояние при температурах от 186 до 274 К для соединения, легированного атомами стронция, и от 214 до 225 К – атомами кальция. Вакуумный отжиг при 650°С легированных манганитов лантана нестехиометрического состава приводит к формированию фазово-расслоенных систем, представляющих собой совокупности орторомбических фаз (пр. гр. *Pnma*) с разным ферромагнитным и антиферромагнитным расположением спиновых моментов атомов марганца. Температуры Кюри и Нееля для таких соединений находятся в интервале от 146 до 188 К и от 119 до 134 К соответственно.

Во всех исследованных образцах обнаружены наноразмерные ферромагнитные кластеры с флуктуацией их магнитного момента. Образование кластеров происходит за счет наличия конкурирующих ферро- и антиферромагнитных взаимодействий, приводящих к фрустрации магнитного момента кластера, что обуславливает его релаксационное поведение. Проведен расчет размеров ферромагнитных кластеров в суперпарамагнитном состоянии, величина которых варьируется в пределах 3÷6 нм. Размер кластеров для ферромагнитных фаз не зависит от содержания легирующего элемента. Фазы с антиферромагнитным упорядочением характеризуются меньшим размером кластеров.

Д.И. Пчелина является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» №21-2-2-37-1.

IRON LOCAL MICROENVIRONMENTS IN Ni^{2+}, Cu^{2+} AND Mg^{2+} FERRITES: STUDY USING MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

M.V. Ushakov[1*], R. Kalai Selvan[2], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*

[2]*Department of Physics, Bharathiar University, Coimbatore-641 046, Tamil Nadu, India*

**e-mail: um.mjolnir@gmail.com*

Various nanosized spinel ferrites demonstrate interesting magnetic and electrochemical properties and these ferrites are widely used in different industrial and research applications. Their magnetic properties depend on various factors including preparation due to effect on the iron local microenvironments in spinels. Therefore, some nanosized spinel ferrites, namely, $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ were studied using Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution and binomial calculations for analysis of the iron local microenvironments.

All these ferrites nanoparticles samples were synthesized using one of a known combustion method with differences in synthesis conditions (fuel, temperature) [1-3]. The room temperature Mössbauer spectra of these spinel ferrites are shown in Fig. 1. These spectra were decomposed using larger number of magnetic sextets than in the case of the spectra measurement with a low velocity resolution. Basing on the values of isomer shift δ and magnetic hyperfine field H_{eff}, magnetic sextets were assigned to the ^{57}Fe in the tetrahedral (A) and octahedral [B] sites, respectively. The presence of several magnetic sextets attributed to the (A) and [B] sites in each spinel were considered as a result of different iron local microenvironments in these sites in $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ spinels.

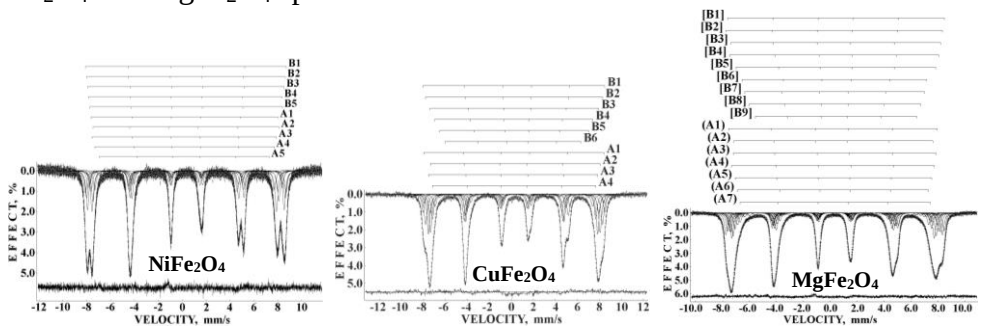


Fig. 1. Room temperature Mössbauer spectra of $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ nanoparticles. Indicated components are the results of the best fits. The differential spectra are shown on the bottom.

To check this suggestion the binomial calculations of the Fe^{3+} local microenvironments in both (A) and [B] sites in the ideal crystals of $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ were carried out. All these crystals have inverse spinel structure with 8 (A) and 16 [B] positions for metal cations. In $NiFe_2O_4$ samples Fe^{3+} cations occupy both [B] and (A) sites while Ni^{2+} cations occupy the [B] sites only. $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ has the inverse spinel structure also where Cu^{2+}, Mg^{2+} and Fe^{3+} cations occupy both the (A) and [B] sites. Inversion parameter for $CuFe_2O_4$ is 0.125 whereas for $MgFe_2O_4$ – 0.9. Calculations showed that the minimal radius of coordination sphere when [B] sites are around both (A) and [B] sites is 3.5 Å for $NiFe_2O_4$ and 3.7 Å for $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$. The variations of metal cations in local microenvironment of the $Fe^{3+}{}_A$ and $Fe^{3+}{}_B$ resulting in different values of H_{eff} on the ^{57}Fe nuclei in both sites. Comparison of the histograms of the relative areas of magnetic sextets in the order of H_{eff} decrease and reliable probabilities of different numbers of Ni^{2+} cations in the Fe^{3+} local microenvironments demonstrates some correlations [1]. Similar correlations were observed in the calculations for $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$.

Thus, the Mössbauer spectra of $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ and $MgFe_2O_4$ nanoparticles were decomposed with a larger number of magnetic sextets related with a presence of distribution of metal cations in tetrahedral (A) and octahedral [B] sites in spinel ferrites.

Acknowledgement. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project № FEUZ-2020-0060).

[1] M.V. Ushakov, B. Senthilkumar, R. Kalai Selvan, I. Felner and M.I. Oshtrakh, *Mater. Chem. Phys.*, **202**, 159–168 (2017).
[2] M.I. Oshtrakh, R. Kalai Selvan, C.O. Augustin and V.A. Semionkin, *Hyperfine Interact.*, **183**, 37–34 (2008).
[3] M.V. Ushakov, V.D. Nithya, N. Rajeesh Kumar, S. Arunkumar, A.V. Chukin, R. Kalai Selvan and M.I. Oshtrakh, *J. Alloys Comp.*, **912**, 165125 (2022).

ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ КАТИОНОВ ЖЕЛЕЗА В Ni^{2+}, Cu^{2+} И Mg^{2+} ФЕРРИТАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

М.В. Ушаков[1*], Р. Калай Сельван[2], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, 620002, Россия*
[2]*Кафедра физики, Университет Брахатпура, Коимбатор-641 046, Тамил Наду, Индия*
**e-mail: um.mjolnir@gmail.com*

Наноразмерные ферриты обладают интересными магнитными и электрохимическими свойствами и поэтому широко используются в различных областях науки и техники. Магнитные свойства ферритов зависят от различных факторов, включая условия синтеза, как результат все эти факторы оказывают влияние на локальное окружение ионов железа в ферритах. Для изучения влияния условий синтеза на локальное окружение ионов железа были проведены исследования наночастиц $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$ методом мессбауэровской спектроскопии с высоким скоростным разрешением, а также построено распределение ионов металлов по позициям A и B в ферритах.

Рассматриваемые в работе образцы наночастиц ферритов [1-3] были получены методом сжигания нитрат-органических прекурсоров, отличия были в условиях синтеза (топливо, температура). Мессбауэровские спектры образцов наночастиц $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$, измеренные при комнатной температуре приведены на Fig.1. Эти спектры были аппроксимированы большим числом магнитных секстетов по сравнению со спектрами, измеренными с низким скоростным разрешением. Полученные при аппроксимации магнитные секстеты были связаны с ядрами ^{57}Fe в тетраэдрических (A) и октаэдрических [B] позициях на основе значений изомерного сдвига δ и магнитного сверхтонкого поля H_{eff}. Наличие нескольких магнитных секстетов, связанных с позициями (A) и [B] является результатом неоднородности локального окружения ^{57}Fe, связанной с наличием распределением катионов металлов по позициям (A) и [B].

Для проверки этого предположения были рассчитаны вероятности и построено биномиальное распределение для локального окружения Fe^{3+} в позициях (A) и [B] в $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$. Кристалл $NiFe_2O_4$ обладают структурой полностью инверсной шпинели с 8 (A) и 16 [B] позициями для катионов металла в элементарной ячейке. Катионы Fe^{3+} могут занимать позиции (A) и [B], а Ni^{2+} – только позиции [B]. Кристаллы $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$ являются не полностью инверсной шпинелью, в них катионы Cu^{2+}, Mg^{2+} и Fe^{3+} могут занимать как позиции (A), так и [B]. Величина коэффициента инверсии для $CuFe_2O_4$ – 0.125, для $MgFe_2O_4$ – 0.9. Моделирование кристаллов, показало, что оптимальным для анализа локального окружения является выбор сфер с радиусом 3.5 Å для $NiFe_2O_4$ и 3.7 Å для $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$. Распределение ионов Ni^{2+}, Cu^{2+} и Mg^{2+} по позициям A и B в локальном окружении ядер ^{57}Fe оказывает влияние на величину магнитного сверхтонкого поля H_{eff} ядер ^{57}Fe в обеих позициях. Сравнение гистограмм относительных площадей магнитных секстетов, расположенных в порядке уменьшения величины магнитного сверхтонкого поля H_{eff} и вероятностей различного числа катионов Ni^{2+} в локальном окружении катионов Fe^{3+} показывают схожий характер изменений [1]. Аналогичные связи между H_{eff} и вероятностями различного числа катионов Cu^{2+} и Mg^{2+} были обнаружены и для $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$.

Таким образом, мессбауэровские спектры образцов наночастиц $NiFe_2O_4$, $CuFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$ были аппроксимированы большим числом магнитных секстетов, что связано с наличием распределения катионов металлов по тетраэдрическими (A) и октаэдрическими [B] в окружении ядер ^{57}Fe.

^{57}Fe PROBE MÖSSBAUER STUDY OF MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN BINARY PHOSPHIDES OF TRANSITION METALS

I. Silkin*, I. Presnyakov, I. Morozov

Department of Chemistry, Moscow State University, Russia
**e-mail: ilia.silkin@chemistry.msu.ru*

Binary phosphides of transition metals (CrAs, MnP, FeP, WP) are of great interest due to their complex magnetic and crystallographic phase transitions, particularly concerning an unusual double-helix type of magnetic ordering. CrAs, MnP, WP were also reported to become superconducting via the application of external pressure in close proximity to magnetic order [1]. Application of hydrostatic pressure, external field, or temperature can induce or suppress magnetic phase transitions in these compounds. This suggests a delicate balance of competing magnetic interactions.

For a detailed description of the complex behavior of MnP we use Mössbauer spectroscopy on a ^{57}Fe probe nuclei introduced in trace amounts ($Mn_{0.995}{}^{57}Fe_{0.005}P$) to the MnP structure to study the hyperfine interactions in a wide temperature range including the temperatures of phase transitions T_N, T*, and T_C. A synthetic approach, based on the fact that monophospides have a much higher thermal stability than diphosphides, was applied for the first time. Mössbauer spectra measured at $T < T_N$ are analyzed with a model proposed in our previous work [2] and tested on FeP.

Our study indicates that ^{57}Fe probes can be used as “local” sources of information about the magnetic structure of MnP. The hyperfine interaction parameters of ^{57}Fe probe atoms are very sensitive to changes in the magnetic ordering of the manganese sub-lattice and reflect parameters of magnetic phase transitions. Mössbauer spectra on ^{57}Fe probe nuclei in $Mn_{0.995}{}^{57}Fe_{0.005}P$ demonstrate an evolution of the magnetic structure in this temperature range that is more complex than what was expected previously.

We find anharmonicity ($\xi \approx 0.044$) of the magnetic moments of iron at $T < T_N$ associated with the magnetocrystalline anisotropy in the (bc) helical plane of the LT phase. The hyperfine magnetic field H_{hf} on a ^{57}Fe nuclei exhibits a significant spatial anisotropy $\Delta H_{anis} = H\alpha(\| b) - H\beta(\| c) \approx 27$ kOe. s: Analysis of $H_{hf(}T)$ within the Bean–Rodbell model has shown that LT ↔ IT magnetic phase transition is a first-order phase transition in a wide temperature range ($T_0 - T_N \approx 60$ K), where both LT and IT magnetic phases coexist and undergo mutual transformations. On the contrary, transition from ferromagnetic (IT) to paramagnetic phase is a second-order phase transition. A weak spectral component, which can be attributed to iron cations in Bloch-type interdomain regions, has been revealed in Mössbauer spectra in the temperature range $T_0 < T < T^*$. A paramagnetic component appears and grows rapidly in the spectra in the temperature range $T^* < T < T_N$ ($T_N - T^* \approx 90$ K), which indicates that iron cations are involved in fast magnetic fluctuations.

[1] Chen RY, Wang NL. Progress in Cr- and Mn-based superconductors: a key issues review. //Rep Prog Phys. 2019. V. 82, N. 1, P. 012503.
[2] A.V. Sobolev, I.A. Presniakov, A.A. Gippius et al., J. Alloys Compd. 675, 277 (2016)

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА НА ЯДРАХ ^{57}Fe МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БИНАРНЫХ ФОСФИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

И.Г. Силкин*, И.А. Пресняков, И.В. Морозов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
**e-mail: ilia.silkin@chemistry.msu.ru*

Научный интерес к бинарным пниктидам переходных металлов, таким как CrAs, MnP, FeP, WP, обусловлен наличием сложных фазовых магнитных переходов и появлением необычной геликоидальной магнитной структуры, механизмы образования которой не до конца изучены, например, затруднена однозначная интерпретация большинства экспериментальных результатов исследования физических свойств подобных соединений. Повышенное внимание к ним также связано с обнаружением сверхпроводимости для CrAs, MnP и WP при низких температурах и повышенном давлении, а также наличии в этих условиях сложного магнитного поведения [1]. Наличие сложных фазовых магнитных переходов обусловлено хрупким равновесием между сверхтонкими взаимодействиями, которое может быть легко нарушено внешними силами: давлением, магнитным полем, химическим замещением.

Для более полного описания сложного поведения MnP было проведено детальное исследование сверхтонких взаимодействий ядер ^{57}Fe в поликристаллическом фосфиде $Mn_{0.995}{}^{57}Fe_{0.005}P$, проведенного в широком диапазоне температур, включающем температуры фазовых переходов T_N , T* и T_C. Впервые был применён синтетический подход, основанный на том, что, монофосфиды MP обладают значительно более высокой термической устойчивостью, по сравнению с дифосфидами. Анализ мёссбауэровских спектров, измеренных при $T < T_N$, осуществлялся с использованием апробированной ранее на изоструктурном фосфиде FeP модели [2], учитывающей особенности пространственной модуляции геликоидальной структуры MnP, в частности, проявления магнитокристаллической анизотропии, а также анизотропии сверхтонкого магнитного поля H_{hf} на ядрах ^{57}Fe.

Проведённое исследование показало эффективность использования зондов ^{57}Fe в качестве “локальных” источников информации о магнитной структуре MnP. В тоже время, МС на ядрах зондовых атомов ^{57}Fe в $Mn_{0.995}{}^{57}Fe_{0.005}P$ демонстрируют более сложную, чем предполагалось ранее, эволюцию магнитной структуры в данной области температур.

Установлено, что геликоидальное упорядочение магнитных моментов железа при $T < T_N$ характеризуется ангармоничностью, связанной с магнитокристаллической анизотропией в плоскости геликоиды (bc) низкотемпературной фазы (LT) $Mn_{0.995}{}^{57}Fe_{0.005}P$. Сверхтонкое магнитное поле H_{hf} на ядрах 57Fe проявляет значительную пространственную анизотропию ΔH_{aniz} = 27 кЭ., На основании анализа зависимости $H_{hf}(T)$ в рамках модели Бина-Родбелла показано, что магнитный фазовый переход LT - IT является фазовым переходом первого рода с широкой областью температур (T_0 - $T_N \approx 60$ K), в которой обе магнитные фазы (LT, IT) сосуществуют и претерпевают взаимное превращение. Напротив, переход из ферромагнитной (IT) в парамагнитную фазу является фазовым переходом второго рода. Для интервала $T_0 < T < T^*$ в МС обнаружена малоинтенсивная спектральная компонента, которая может быть отнесена к катионам железа в междоменных областях “блоховского” типа. В области $T^* < T < T_N$ (T_N - $T^* \approx 90$ K) в спектрах появляется и быстро растет с температурой парамагнитная компонента, свидетельствующая об участии катионов железа в быстрых магнитных флуктуациях.

[1] Chen RY, Wang NL. Progress in Cr- and Mn-based superconductors: a key issues review. //Rep Prog Phys. 2019. V. 82, N. 1, P. 012503.
[2] A.V. Sobolev, I.A. Presniakov, A.A. Gippius et al., J. Alloys Compd. 675, 277 (2016)

FIRST PRINCIPLE CALCULATIONS OF THE FORMATION ENERGY AND PARAMETERS OF HYPERFINE INTERACTION OF TERNARY SYSTEMS BASED ON Fe-Al

A.F. Abdullin[1*], E.V. Voronina[1]

[1]*Kazan Federal University, Kazan, Russia*
**e-mail: ayazik@bk.ru*

Today there is a large amount of experimental information about electronic, magnetic, mechanical, etc. properties of binary alloys Fe-Al [1]. The small addition of the third element to binary compound significantly improves their functional characteristics [2- 4] and understanding the role of such admixture is critical.

The ordered B2 and $D0_3$ ternary alloys were synthesized using nanocrystalline metastable substances as the starting materials. The study of structural phase transition in the process of synthesis of ternary intermetallics from mechanically alloyed powders showed that Fe-Al-V, Fe-Al-Ga, Fe-Al-Mn systems are easily transformed from a single-phase state of a disordered solid solution into a single-phase ordered state. At the same time, the Fe-Al-B and Fe-Al-Sn systems showed a pronounced tendency to separation into several phases. The results of magnetic and Mössbauer measurements of Fe-Al-M (M=V, Mn, B, Ga) ternary systems required studying the effect of the third element addition on the characteristics of the systems in terms of first-principle calculations. To evaluate the phase stability of alloys of a certain elemental composition for the listed systems, the energy of formation was calculated (Table 1). Calculations were performed using the full-potential linearized augmented plane wave (FP LAPW) technique contained in the WIEN2k software package [5, 6].

Table 1. Calculated energy of formation, average hyperfine field (HFF), average magnetic moment (MM) and the equilibrium lattice parameter of some binary and ternary systems

Unit cell	Energy of formation, eV	Average HFF, T	Average magnetic moment, μ_B	Lattice parameter, nm
Fe_4B_2	-0.438	21.2	1.97	0.4161
Fe_2Sn_4	-0.035	13.1	1.81	0.5356
$Fe_{11}Al_5$	-0.210	24.3	1.87	0.2879
$Fe_{11}Al_4B$	-0.142	24.3	1.92	0.2844
$Fe_{11}Al_4Ga$	-0.176	24.7	1.91	0.2883
$Fe_{11}Al_4Sn$	-0.139	24.2	1.83	0.2921
$Fe_{10}Al_5V$	-0.251	18.7	1.46	0.2871

It was found that ternary Fe-Al-V system has the minimum energy. Ternary compounds Fe-Al-B and Fe-Al-Sn are the least stable and their formation is energetically unfavorable. The formation of the Fe_2B phase is energetically favorable and reduces the total energy of the Fe-Al-B system. The analysis showed the mixture of Fe-Al and $FeSn_2$ phases has a lower energy for the Fe-Al-Sn system. The analysis describes qualitatively the main, experimentally observed features of the synthesis of ternary intermetallics from mechanically alloyed solid solutions. The substitution of gallium for aluminum in most of the considered structures causes an enlargement in the distances between iron atoms, leading to the growth in the local magnetic moment. The latter, in turn, leads to increase in the core electrons contribution to the HFF due to the spin polarization of the inner *s*-levels by *d*-electrons. An increase in the local magnetic characteristics with the addition of B atoms to Fe-Al occurs due to an increase in the distances between the Fe atoms from symmetry reduction inside the cell. The ^{57}Fe HFF values calculated under the assumption that the boron atoms occupy the interstitials as well made it possible to explain and to fit the Fe-Al-B Mössbauer spectra. A decrease in the ^{57}Fe HFF for the Fe-Al-V system is explained by the antiferromagnetic orientation of the V atoms magnetic moments.

[1] D. G. Morris, Intermetallics. Special Iss. **13**, 1255-1342 (2005).
[2] J. B. Restorff et al, J. Appl. Phys. **111**, 023905-1–023905-12 (2012).
[3] C. Bormio-Nunes, O. Hubert, JMMM **393**, 404-418 (2015).
[4] B. Hinterleitner, I. Knapp, M. Poneder, Yongpeng Shi, H. Müller et al, Nature **576**, 85-90 (2019).
[5] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran and L. D. Marks, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, (2018).
[6] P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, L. D. Marks, J. Chem. Phys. **152**, 074101-1–074101-30 (2020).

ЭНЕРГИЯ ОБРАЗОВАНИЯ И ПАРАМЕТРЫ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРОЙНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ Fe-Al. РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

А.Ф. Абдуллин[1*], Е.В. Воронина[1]

[1]*Казанский федеральный университет, Казань, Россия*
**e-mail: ayazik@bk.ru*

На сегодняшний день имеется большое количество экспериментальных данных об электронных, магнитных, механических и других свойствах бинарных сплавов Fe-Al [1]. Небольшое добавление третьего элемента в бинарные соединения значительно улучшает их функциональные характеристики [2-4]. Понимание роли такой примеси имеет большое значение.

Упорядоченные тройные сплавы B2 и $D0_3$ были синтезированы с использованием нанокристаллических метастабильных веществ в качестве исходных материалов. Изучение структурно-фазового перехода в процессе синтеза тройных интерметаллидов из механически легированных материалов показало, что системы Fe-Al-V, Fe-Al-Ga, Fe-Al-Mn легко переходят из однофазного состояния неупорядоченного твердого раствора в однофазное упорядоченное состояние. В то же время системы Fe-Al-B и Fe-Al-Sn проявляли ярко выраженную тенденцию к разделению на несколько фаз. Результаты магнитных и мессбауэровских измерений тройных систем Fe-Al-M (M=V, Mn, B, Ga) потребовали дополнительного исследования влияния добавки третьего элемента на характеристики бинарных систем методами вычислений из первых принципов. Для оценки фазовой устойчивости сплавов с определенной концентрацией элементов в перечисленных системах была рассчитана энергия образования (Таблица 1). Расчеты были выполнены с использованием полнопотенциального метода линеаризованных присоединенных плоских волн (FP LAPW), содержащимся в программном пакете WIEN2k [5,6].

Установлено, что минимальной энергией обладает тройная система Fe-Al-V. Тройные соединения Fe-Al-B и Fe-Al-Sn наименее устойчивы и их образование энергетически невыгодно. Образование фазы Fe_2B энергетически выгодно и снижает общую энергию системы Fe-Al-B. Анализ показал, что смесь фаз Fe-Al и $FeSn_2$ имеет более низкую энергию для системы Fe-Al-Sn. Приведенное выше рассмотрение качественно описывает основные, наблюдаемые экспериментально, особенности синтеза тройных интерметаллидов из механосплавленных твердых растворов. Замена алюминия галлием в большинстве рассмотренных структур вызывает увеличение расстояний между атомами железа, что приводит к росту локального магнитного момента. Последнее, в свою очередь, приводит к увеличению вклада остовных электронов в СТМП за счет спиновой поляризации внутренних *s*-уровней *d*-электронами. Увеличение локальных магнитных характеристик при добавлении атомов бора к Fe-Al происходит за счет увеличения расстояний между атомами Fe из-за понижения симметрии внутри ячейки. Значения СТМП на ядрах ^{57}Fe, рассчитанные в предположении, что атомы бора занимают междоузлия, позволили объяснить и аппроксимировать мессбауэровские спектры Fe-Al-B. Уменьшение СТМП для системы Fe-Al-V объясняется антиферромагнитной ориентацией магнитных моментов атомов V.

ANALYSIS OF HYPERFINE FIELDS OF MAGNETIC NANOPARTICLES BASED ON BINARY FeNi ALLOYS

A.Yu. Germov[1*], B.Yu. Goloborodskiy[1], A.S. Konev[1], D.A. Prokopyev[1], I.A. Kurmachev[1], E.V. Suvorkova[2], A.S. Minin[1,2], M.A. Uimin[1,2]

[1]*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation*
[2]*Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation*
**e-mail: germov@imp.uran.ru*

Magnetic nanoparticles are now widely used due to their specific properties [1]. Nanoparticles of the core-shell type, which contain a metal or an alloy are of particular interest [2,3]. The carbon coating of metal nanoparticles reliably protects them from oxidation, but change the magnetic properties due to the penetration of carbon atoms into the particles [3]. Gamma-alpha phase transitions of FeNi alloys in these nanoparticles is drasticaly change magnetic properties and complicated by superparamagnetic behavior of small particle size. This study is devoted to complex analysis of hyperfine fields obtainted with NMR and Mossbauer spectroscopy. Different nuclei ^{61}Ni, ^{57}Fe probed by these methods reveal local environment of each element.

The main methods for investigating nanoparticles are magnetization measurements and electron microscopy. Other conventional methods are found to be inefficient or expensive due to very small particle sizes. Local nuclear resonance methods allow solving several problems at once including phase analysis, analysis of the atomic environment, tracking transitions to a single-domain or superparamagnetic state [4,5].

Magnetic FeNi@C nanoparticles were prepared by gas-phase synthesis [2,3]. Parent materials were Fe and Ni wires. The material was put into the induction levitation melting chamber (P = 150 torr), forming a molten droplet which was in a gas mixture of argon and isobutane.

In this work, Fe_xNi_{1-x}@C (x=0.25; 0.5; 0.75) nanoparticles in a carbon shell were studied using ^{61}Ni and ^{57}Fe NMR at T = 4 K and ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy at T = 295 K. The samples were powders with an average particle size of about 9 nm. Magnetization measurements reveal superparamagnetic behavior of the particles with blocking temperature about T_B = 200 K. According to XRD, the samples mostly contain FCC phase. A complex analysis of the induced hyperfine fields has shown that particles contain solid solution $Fe_xNi_{1-x}C_y$ and local configurations NiC_n and FeC_n. Signals of ^{57}Fe NMR at 4 K (H_{hf} = 295 kOe) are in consistent with ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy (H_{hf} = 275 kOe) at 295 K, taking into account temperature dependence of induced hyperfine field behavior. This allows us to separate signals of ^{61}Ni NMR of FeNi alloys (H_{hf} = 90 kOe), which is absent in literature. Nanosize effect of line shift on the value of demagnetizing field was not observed for this particles, most likely, due to a large line width.

This study was supported by the Russian Science Foundation, project No. 21-72-00007.

[1] D.L. Huber, *Small*, **1**, 482–501 (2005).
[2] M.A. Uimin, et al., *Phys. Met. Metallogr.*, **120**, 228–232 (2019).
[3] A.Y.Yermakov et al., *Materials Letters*, **254**, 202—205 (2019).
[4] A.Yu. Germov et al., *Materials Today Communications*, **27**, 102382 (2021).
[5] D.A. Prokopyev et al., *AIP Conference Proceedings*, **2174**, 020155 (2019).

АНАЛИЗ СВЕРХТОНКИХ ПОЛЕЙ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ FeNi

А.Ю. Гермов[1*], Б.Ю. Голобородский[1], А.С. Конев[1], Д.А. Прокопьев[1], И.А. Курмачёв[1], Е.В. Суворкова[2], А.С. Минин[1,2], М.А. Уймин[1,2]

[1]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*
[2]*Уральский Федеральный Университет, г. Екатеринбург, Россия*
**e-mail: germov@imp.uran.ru*

Магнитные наночастицы в настоящее время широко используются благодаря их специфическим свойствам [1]. Особый интерес представляют наночастицы типа ядро-оболочка, которые содержат металл или сплав [2,3]. Углеродное покрытие металлических наночастиц надежно защищает их от окисления, но изменяет магнитные свойства за счет проникновения атомов углерода внутрь частиц [3]. Гамма-альфа фазовые переходы сплавов FeNi в этих наночастицах резко изменяют магнитные свойства и осложняются суперпарамагнитным поведением частиц малых размеров. Данная работа посвящена комплексному анализу сверхтонких полей, полученных с помощью ЯМР и мессбауэровской спектроскопии. Различные ядра-зонды ^{61}Ni, ^{57}Fe, используемые в этих методах, дают представление о локальном окружении каждого элемента.

Основными методами контроля наночастиц на сегодня являются измерения намагниченности и электронная микроскопия. Другие традиционные методы оказываются малоэффективными или дорогими из-за очень малых размеров частиц. Локальные ядерно-резонансные методы позволяют решить сразу несколько задач, среди которых: аттестация и фазовый анализ, анализ атомного окружения, отслеживание переходов в однодоменное или супепарамагнитное состояния [4,5].

Наночастицы FeNi@C были приготовлены методом газофазного синтеза [2,3]. Исходные материалы для FeNi@C получены из проволок Fe и Ni. Материал подавался в камеру индукционной левитационной плавки (P = 150 мм.рт.ст), образуя расплавленную каплю, которая обдувалась потоком газовой смеси аргона и изобутана.

В данной работе наночастицы Fe_xNi_{1-x}@C (x=0.25; 0.5; 0.75) в углеродной оболочке были исследованы с помощью ЯМР ^{61}Ni and ^{57}Fe при T = 4 K и ^{57}Fe мёссбауэровской спектроскопии при T = 295 K. Образцы представляли собой порошки, средний размер частиц в которых составляет около 9 нм. Измерения намагниченности свидетельствуют о суперпарамагнитном поведении частиц с температурой блокировки около T_B = 200 K. По данным РФА, образцы в основном содержат ГЦК фазу. Комплексный анализ наведённых сверхтонких полей показал, что частицы содержат твердый раствор $Fe_xNi_{1-x}C_y$ и локальные конфигурации NiC_n и FeC_n. Сигналы ЯМР ^{57}Fe при 4 K (H_{hf} = 295 кЭ) согласуются с мёссбауэровской спектроскопией ^{57}Fe (H_{hf} = 275 кЭ) при 295 K с учетом температурной зависимости поведения наведённого сверхтонкого поля. Это позволяет выделить сигналы ЯМР ^{61}Ni от сплавов FeNi (H_{hf} = 90 кЭ), которые в литературных данных отсутствуют. Наноразмерный эффект смещения линии на величину размагничивающего поля для этих частиц не наблюдался, скорее всего, из-за большой ширины линии.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РНФ, проект № 21-72-00007.

[1] D.L. Huber, *Small*, **1**, 482–501 (2005).
[2] M.A. Uimin, et al., *Phys. Met. Metallogr.*, **120**, 228–232 (2019).
[3] A.Y.Yermakov et al., *Materials Letters*, **254**, 202—205 (2019).
[4] A.Yu. Germov et al., *Materials Today Communications*, **27**, 102382 (2021).
[5] D.A. Prokopyev et al., *AIP Conference Proceedings*, **2174**, 020155 (2019).

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ NANOSTRUCTURE RIBBONS IN THE PROCESS OF HEAT TREATMENT

A.V. Protasov[1,2*], O.A. Golovnya[1,2], A.G. Popov [1,2], L.A. Stashkova[1], V.S. Gaviko[1,2]

[1]*IMP UB RAS, Ekaterinburg, Russia*
[2]*UrFU, Ekaterinburg, Russia*
**e-mail: protasov@imp.uran.ru*

The increase in prices of rare-earth metals (Nd, Dy) prompts investigation of new advanced magnetic materials with low- or free-of RM compositions. Alloys with the ThMn12-type structure are one of the main candidates for obtaining magnets with high magnetic properties, comparing with properties of NdFeB magnets[1-4].

In view of the difficulty in obtaining monophasic ThMn12-type structure in bulk alloy and metastable behavior of the main phase in the process of heat treatment, the aim of this work is to study in detail the sequence of phase transformations in the melt-spun Sm0.8Zr0.2(Fe0.92Ti0.08)10 alloy in the course of annealing using XRD, DSC, TMA, Mössbauer spectroscopy, as well as micromagnetic modelling.

The nanocrystalline state was obtained by melt-spinning on a copper wheel rotating at a speed of 30 m/s. The obtained ribbons are x-ray amorphous, which is evidenced by the broad halo in the pattern. Their Curie temperature T_C = 58°C is low.

Annealings at temperatures lower than 700°C hardly change the x-ray amorphous structure observed.

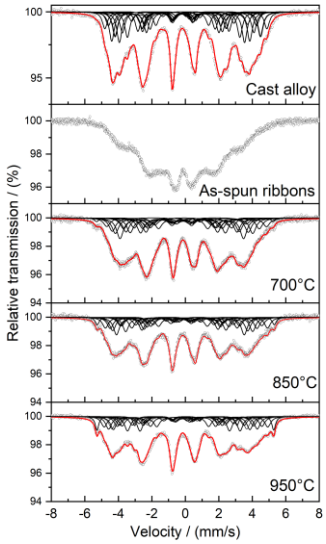


Fig. 1. Mössbauer spectra of cast alloy, as-spun ribbons and ribbons annealed from 700 to 950°C

Upon annealing at 700°C, the $TbCu_7$-type phase develops, which results in the appearance of distinct peaks in the susceptibility curves and x-ray pattern. We also observe typical set of sextets in the Mössbauer spectra. The Curie temperature of the $TbCu_7$-type phase is T_C = 200°C, which agrees with the known data [5]. The value of H_c does not exceed 1.6 kOe, which is caused by the easy-plane anisotropy of the main $TbCu_7$ phase.

After annealing at a higher temperature of 800°C, T_C grows up to 260°C, and the ratios of the partial spectral intensities change, which evidences the gradual transformation of the $TbCu_7$-type phase into the ordered $ThMn_{12}$-type phase. Since the $ThMn_{12}$-type structure has an easy-axis anisotropy, the coercivity grows up to H_c = 2.9 kOe.

The ordering completes upon the annealing at 850°C, which corresponds to the maximum value of coercivity H_c = 4.7 kOe.

Further increase in the temperature of annealing up to 950°C leads to the formation of additional phases, i.e., $SmFe_2$ (10%), Fe_2Ti (15%), and α-Fe (less than 10%), as well as the growth of the grains, which decreases H_c and magnetization σ_{15} down to 3 kOe and 87 emu/g, respectively. The Curie temperature of the $ThMn_{12}$-type phase reaches 300°C, which corresponds to that of the as-cast alloy.

Therefore, it has been established that the phase transformation process can be written as follows: amorphous → amorphous + $TbCu_7$ → $TbCu_7$ + $ThMn_{12}$ + Fe→ $ThMn_{12}$ + Fe + $SmFe_2$ + Fe_2Ti. The optimum temperature of annealing for the melt-spun $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ ribbons is 850°C, which provides H_c = 4.7 kOe.

The research was supported by the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Magnet” No. 122021000034-9).

[1] K. Ohashi, T. Yokoyama, R. Osugi, *et al.*, IEEE Trans. Magn. **23**, 3101–3103 (1987).
[2] D. B. De Mooij and K. H. J. Buschow, J. Less Common Met. **136**, 207–215 (1988).
[3] H. T. Kim, Y. B. Kim, C. S. Kim, *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **152**, 387–390 (1996).

[4] J. Ding and M. Rosenberg, J. Less Common Met. **166**, 303–311 (1990).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ЛЕНТ СПЛАВА $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКИ

А.В. Протасов[1,2*], О.А. Головня[1,2], А.Г. Попов[1,2], Л.А. Сташкова[1], В.С. Гавико[1,2]

[1] *ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2] *УрФУ, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: protasov@imp.uran.ru*

Повышение цена на рынках редких металлов (Nd, Dy) способствовало поиску новых перспективных магнитных материалов с малым содержанием РЗМ или вовсе без них. Сплавы со структурой $ThMn_{12}$ являются одним из основных кандидатов на получение магнитов с высокими магнитными свойствами, сравнимыми со свойствами магнитов NdFeB [1-4].

В связи со сложностью получения монофазного состояния со структурой $ThMn_{12}$ в литом состоянии и с метастабильном поведением основной фазы при термообработках в настоящей работе мы проводили изучение фазовых превращений быстро закаленного сплава $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ в процессе отжигов в диапазоне температур 550 – 950 °C методами XRD, DSC, TMA, Мессбауэровской спектроскопии и микромагнитного моделирования.

Для получения исходного аморфного состояния мы разливали сплав на медное колесо, вращающееся со скоростью 30 м/с. Лента имеет рентгеноаморфное состояние, что проявляется на рентгенограмме широким гало и малую температуру Кюри T_C = 58°C, характерную для сильно разупорядоченного состояния.

Отжиг при температуре до 700°C практически не изменяет рентгеноаморфную структуру.

При температуре 700°C появляется фаза $TbCu_7$, о чем можно судить по выделению отдельных пиков на кривых восприимчивости и дифрактограмме, также появляется характерная группа секстетов на мессбауэровских спектрах. Температура Кюри T_C = 200°C для фазы $TbCu_7$ совпадает с литературными данными [4]. Значение H_c не превышает 1.6 kOe, так как основная фаза типа $TbCu_7$ имеет анизотропию типа легкая плоскость.

С увеличением температуры отжига до 800°C увеличивается T_C до 260°C и изменяются соотношения интенсивностей секстетов, что свидетельствует о постепенном превращении фазы $TbCu_7$ в упорядоченнную фазу $ThMn_{12}$. Так как структура типа $ThMn_{12}$ обладает анизотропией типа легкая ось, коэрцитивная сила увеличивается до значения H_c = 2.9 kOe.

Полное упорядочение происходит после температуры 850°C, что соответствует максимальному значению коэрцитивной силы на кривых размагничивания H_c = 4.7 kOe.

Дальнейшее увеличение температуры до 950°C приводит к появлению дополнительных фаз $SmFe_2$ (10%), Fe_2Ti (15%) и α-Fe (до 10%), а также к укрупнению зерна. Это сопровождается снижением H_c до 3 kOe и намагниченности σ_{15} до 87 emu/g. Температура Кюри фазы типа $ThMn_{12}$ достигает 300°C, что совпадает со значением T_C в исходном сплаве.

В результате установлено, что процесс фазовых переходов можно представить следующим образом: amorphous → amorphous + $TbCu_7$ → $TbCu_7$ + $ThMn_{12}$ + Fe→ $ThMn_{12}$ + Fe + $SmFe_2$ + Fe_2Ti. Оптимальное значение температуры отжига соответствует 850°C для БЗС $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$, что обеспечивает достижение H_c = 4.7 kOe.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Магнит», № 122021000034-9).

[1] K. Ohashi, T. Yokoyama, R. Osugi, *et al.*, IEEE Trans. Magn. **23**, 3101–3103 (1987).
[2] D. B. De Mooij and K. H. J. Buschow, J. Less Common Met. **136**, 207–215 (1988).
[3] H. T. Kim, Y. B. Kim, C. S. Kim, *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **152**, 387–390 (1996).
[4] J. Ding and M. Rosenberg, J. Less Common Met. **166**, 303–311 (1990).

MAGNETIC STRUCTURE AND HYPERFINE INTERACTIONS IN MULTIFERROICS $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (x = 0.05, 0.10, 0.15)

A.M. Gapochka*, V.S. Rusakov, I.S. Glazkova, T.V. Gubaidulina, M.E. Matsnev, I.A. Presniakov

M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
**e-mail: al-gap@physics.msu.ru*

Bismuth ferrite $BiFeO_3$ is of interest as a type I multiferroic, in which ferroelectric and magnetic transitions are realized at high temperatures. However, despite the high degree of spontaneous polarization, the values of magnetization and magnetoelectric coupling in it are significantly less than that would be useful for application. In this ferrite, a spatial spin-modulated structure (SSMS) of a cycloid type is realized. The presence of spin modulation prevents the manifestation of magnetoelectric effects, however, according to literature data, partial substitution of iron atoms by transition 3*d* metal atoms leads to the destruction of the cycloid magnetic structure without significantly changing the high Curie and Neel temperatures. The present work is devoted to Mossbauer studies on ^{57}Fe nuclei of substituted $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ ferrites (x = 0.05, 0.10, 0.15) in temperature ranges including temperatures of magnetic phase transitions.

The Mossbauer spectra obtained in the magnetically ordered temperature range consist of six inhomogeneously broadened asymmetric resonance lines. Fitting of the spectra in terms of the spin wave model (ASM) [1] showed the presence of several subspectra corresponding to Fe(*n*) iron atoms with *n* = 0, 1, 2 ... impurity Co atoms in the first cationic coordination sphere. All these subspectra correspond to the ASM model, while the spins of all Fe atoms participate in spin modulation. For fitting in term of the ASM model, all the Mossbauer parameters, with the exception of isotropic fields, were assumed to be the same for all subspectra [2].

Analysis of the dependences of the relative intensities of the subspectra of ^{57}Fe nuclei in substituted ferrites $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ on the number of n Co atoms in the nearest cationic environment of the Fe atom showed that impurity Co atoms are included in the structure of bismuth ferrite $BiFeO_3$ and their distribution over the positions of Fe atoms is close to random. As a result of the fitting of the spectra, it was also possible to show that the substitution of a Fe atom for a Co atom in the nearest cationic environment of the Fe atom leads to a decrease in the isotropic hyperfine magnetic field, which indicates a low- or medium-spin state of impurity Co^{3+} ions. The shape of the anharmonic spin wave and the character of the distribution p(H_{hf}) of the hyperfine magnetic field H_{hf} show that at low temperatures in the studied multiferroics, an incommensurate anharmonic cycloid-type SSMS with a magnetic anisotropy of the "easy plane" type is formed.

The analysis of the temperature dependence of the anharmonicity parameter (*m*) (Fig. 1) showed that the parameter *m* increases highly with increasing temperature, while tend to the maximum possible value equal to 1. At the same time, it is possible to attempt a good fitting of low-temperature spectra within the ASM model with a sufficiently large value of the parameter *m*. For compositions with x = 0.1 and 0.15, the parameter *m*(*T*) reaches the limit value and practically does not depend on temperature, and for compositions with x = 0.05, the anharmonicity parameter tent to the limit value, but does not reach it (see the insert in Fig. 1). Consequently, with an increase in temperature for compositions with x = 0.10 and 0.15, there is a transition from anharmonic SSMS to a collinear antiferromagnetic ordering of the G-type, and for a composition with x = 0.05, the cycloid structure is preserved, but with a high degree of anharmonicity.

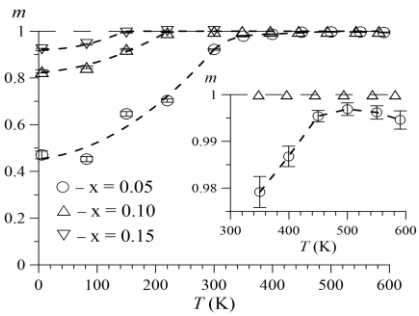


Fig. 1. Temperature dependencies of the anharmonicity parameter *m*.

The authors greatly acknowledge to Dr. A.A. Belik (National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan) for the synthesis and certification of samples.

[1] Matsnev M.E., Rusakov V.S. // AIP Conference Proceedings 1622, 40-49 (2014).
[2] Sobolev A.V., Rusakov V.S., et al. // Phys. Rev. B, 101, 224409 (2020).

МАГНИТНАЯ СТУРКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (x = 0.05, 0.10, 0.15)

А.М. Гапочка*, В.С. Русаков, Я.С. Глазкова, Т.В. Губайдулина, М.Е. Мацнев, И.А. Пресняков

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия
**e-mail: al-gap@physics.msu.ru*

Феррит висмута $BiFeO_3$ вызывает интерес как мультиферроик I рода, в котором реализуется сегнетоэлектрический и магнитный переходы при высоких температурах. Однако, несмотря на высокую степень спонтанной поляризуемости, значения намагниченности и магнитоэлектрической связи в нем значительно меньше, чем значения, допустимые для практического применения. В данном феррите реализуется пространственная спин-модулированная структура (ПСМС) циклоидного типа. Наличие спиновой модуляции препятствует проявлению магнитоэлектрических эффектов, однако, согласно литературным данным, частичное замещение атомов железа атомами переходных 3*d*-металлов приводит к разрушению циклоидной магнитной структуры, не изменяя в существенной степени высокие температуры Кюри и Нееля. Настоящая работа посвящена мессбауэровским исследованиям на ядрах ^{57}Fe замещенных ферритов $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (x = 0.05, 0.10, 0.15) в диапазонах температур, включающих температуры магнитных фазовых переходов.

Мессбауэровские спектры, полученные в магнитоупорядоченной области температур, представляют собой шесть неоднородно уширенных асимметричных резонансных линий. Расшифровка спектров в рамках модели спиновой волны (ASM) [1] показала наличие нескольких парциальных спектров, соответствующих атомам железа Fe(*n*) с *n* = 0, 1, 2 … примесными атомами Co в первой катионной координационной сфере. Все эти парциальные спектры соответствуют модели ASM, при этом в спиновой модуляции участвуют спины всех атомов Fe. При расшифровке в рамках модели ASM, параметры сверхтонких взаимодействий, за исключением изотропных полей, принимались одинаковыми для всех парциальных спектров [2].

Анализ зависимостей относительных интенсивностей парциальных спектров ядер ^{57}Fe в замещенных ферритах $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ от числа *n* атомов Co в ближайшем катионном окружении атома Fe показал, что примесные атомы Co входят в структуру феррита висмута $BiFeO_3$ и их распределение по позициям атомов Fe близко к случайному. В результате расшифровки спектров удалось также показать, что замещение атома Fe на атом Co в ближайшем катионном окружении атома Fe приводит к уменьшению изотропного сверхтонкого магнитного поля, что указывает на низко- или среднеспиновое состояние примесных ионов Co^{3+}. Форма ангармонической спиновой волны и характер распределения $p(H_{hf})$ сверхтонкого магнитного поля H_{hf} показывают, что при низких температурах в исследованных мультиферроиках образуется несоразмерная ангармоническая ПСМС циклоидного типа с магнитной анизотропией типа «легкая плоскость».

Анализ температурной зависимости параметра ангармонизма (*m*) (Рис. 1) показал, что параметр *m* резко увеличивается с ростом температуры, стремясь при этом к максимально возможному значению, равному 1. При этом, достичь адекватного описание низкотемпературных спектров в рамках модели ASM удается при достаточно большом значении параметра *m*. Для составов с x = 0.10 и 0.15 параметр *m*(*T*) достигает предельного значения и практически не зависит от температуры, а для состава с x = 0.05 параметр ангармонизма приближается к предельному значению, но не достигает его (см. вставку на Рис. 1). Следовательно, с повышением температуры для составов с x = 0.10 и 0.15 происходит переход от ангармонической ПСМС к коллинеарному антиферромагниному упорядочению *G*-типа, а для состава с x = 0.05 циклоидная структура сохраняется, но с высокой степенью ангармонизма.

Авторы выражают глубокую признательность А.А. Белику (Национальный институт наук о материалах, Цукуба, Япония) за синтез и паспортизацию образцов.

Секция 2

ПОВЕРХНОСТЬ, ТОНКИЕ ПЛЕНКИ И НАНОСТРУКТУРЫ

Section 2

SURFACE, THIN FILMS AND NANOSTRUCTURES

NON-TRIVIAL SHAPES OF MÖSSBAUER SPECTRA OF MAGNETIC NANOPARTICLES WITH DIFFERENT TYPES OF MAGNETIC ANISOTROPY

M.A. Chuev*

Valiev Institute of Physics and Technology of RAS, Moscow, Russia
**e-mail: m_a_chuev@mail.ru*

Mössbauer spectroscopy is one of the main methods for studying various systems of magnetic nanoparticles, which are widely used in modern nanotechnology due to a number of specific structural, magnetic and thermodynamic properties of these materials found in the process of many-years fundamental research. At the same time, the high sensitivity of the method itself is determined by the fact that the small particle size is usually a decisive factor in the implementation of very different shapes of absorption spectra of such materials [1]. The basis of methodological achievements in solving applied problems is the specific evolution of nanoparticle spectra from a well-resolved magnetic hyperfine structure (sextet of lines for ^{57}Fe nuclei) at low temperatures to a single line (or quadrupole doublet of lines) observed at high ones. This behavior was observed 50 years ago and was interpreted within the framework of the theory of ferromagnetic single-domain particles, which was laid by Neel in the late 40s of the last century [2]. Almost immediately to describe the temperature evolution of the Mössbauer spectra, the simplest two-level relaxation model was proposed for single-domain particles with the energy of axial magnetic anisotropy [3]:

$$E = -KV\cos^2\theta\,. \tag{1}$$

Here, K is the magnetic anisotropy constant, V is the particle volume, θ is the angle between the homogeneous magnetization vector of the particle and the anisotropy axis.

Subsequently, a number of models of varying degree of complexity were proposed to describe specific forms of Mössbauer spectra of ferromagnetic [4-6], antiferromagnetic [7] and ferrimagnetic nanoparticles [8] as a function of temperature, as well as of magnetic field [9]. However, in all these models, the simplest form of magnetic anisotropy (1) was considered, so the question of the influence of various forms of magnetic anisotropy, widely used in magnetism, has so far actually remained behind the scenes.

In this contribution, I will consider continual and quantum-mechanical models of magnetic dynamics of the ferromagnetic nanoparticle system for two types of magnetic anisotropy:

$$E = -KV\cos^2\theta\left(1 + k_2\cos^2\theta\right) \tag{2}$$

and

$$E = -KV\left(\cos^2\theta + \alpha\sin^2\theta\sin^2\varphi\right) \tag{3}$$

(here, k_2 and α are constants, φ is the azimuth angle), as well as the corresponding theory for describing the Mössbauer spectra of such materials. These models significantly expand the methodological base for diagnostics of magnetic nanomaterials.

[1] M.A. Chuev and J. Hesse, in K.B. Tamayo (ed.), Magnetic properties of solids. Nova Science Publishers, New York, p. 1 (2009).
[2] L. Néel. Ann. Geophys. **5**, 99–118 (1949).
[3] H.H. Wickman, in I.J. Gruverman (ed.), Mössbauer effect methodology, v.2, Plenum Press, New York, p. 1 (1966).
[4] D.H. Jones and K.K.P. Srivastava. Phys. Rev. B **34**, 7542-7548 (1986).
[5] M.A. Chuev, M.A. Polikarpov and V.M. Cherepanov. JETP Lett. **92**, 21-27 (2010).
[6] M.A. Chuev. J. Phys.: Condens. Matter **23**, 426003, 1-11 (2011).
[7] M.A. Chuev. JETP Lett. **95**, 295-301 (2012); **103**, 175–180 (2016).
[8] M.A. Chuev. Advances in Condensed Matter Physics **2017**, 6209206. 1–15 (2017).
[9] M.A. Chuev. JETP **114**, 609-630 (2012).

НЕТРИВИАЛЬНЫЕ ФОРМЫ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ С РАЗНЫМИ ФОРМАМИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ

М.А. Чуев*

Физико-технологический институт РАН им. К.А. Валиева, Москва, Россия
**e-mail: m_a_chuev@mail.ru*

Мессбауэровская спектроскопия является одним из основных методов исследования различных систем магнитных наночастиц, которые широко используются в современной нанотехнологии благодаря целому ряду специфических структурных, магнитных и термодинамических свойств этих материалов, обнаруженных в процессе многолетних фундаментальных исследований. При этом высокая чувствительность самого метода определяется тем обстоятельством, что малый размер частиц как правило оказывается решающим фактором в реализации весьма разнообразных форм спектров поглощения таких материалов [1]. Основой методических достижений в решении прикладных задач является специфический характер эволюции спектров наночастиц от хорошо разрешенной магнитной сверхтонкой структуры (секстет линий для ядер ^{57}Fe) при низких температурах к одиночной линии (или квадрупольному дублету линий) – при высоких. Такое поведение наблюдалось еще 50 лет назад и было интерпретировано в рамках теории ферромагнитных однодоменных частиц, основы которой были заложены Неелем в конце 40-х прошлого века [2]. Практически сразу для описания температурной эволюции мессбауэровских спектров была предложена простейшая двухуровневая модель релаксации однодоменной частицы с энергией аксиальной магнитной анизотропии [3]:

$$E = -KV\cos^2\theta\,. \qquad (1)$$

где K – константа магнитной анизотропии, V – объем частицы, θ – угол между вектором однородной намагниченности частицы и осью анизотропии.

В дальнейшем был предложен целый ряд моделей различной степени сложности для описания разнообразных форм мессбауэровских спектров наночастиц разной магнитной природы, ферромагнитных [4-6], антиферромагнитных [7] и ферримагнитных [8] в зависимости от температуры, а также магнитного поля [9]. Однако, во всех этих моделях была рассмотрены простейшая форма магнитной анизотропии (1), так что вопрос о влиянии различных форм магнитной анизотропии, широко используемых в магнетизме, до сих пор фактически остался за кадром.

В настоящей работе будут рассмотрены континуальные и квантово-механические модели магнитной динамики системы ферромагнитных наночастиц для двух типов магнитной анизотропии:

$$E = -KV\cos^2\theta\left(1 + k_2\cos^2\theta\right) \qquad (2)$$

и

$$E = -KV\left(\cos^2\theta + \alpha\sin^2\theta\sin^2\varphi\right) \qquad (3)$$

(k_2 и α – константы, φ – азимутальный угол), а также соответствующая теория для описания мессбауэровских спектров таких материалов. Эти модели существенно расширяют методическую базу диагностики магнитных наноматериалов.

MÖSSBAUER STUDIES OF Fe_3O_4 AND Fe_3O_4@Au NANOPARTICLES SUBJECTED TO THERMAL ANNEALING

V.S. Rusakov[1*], M.S. Fadeev[1], A.L. Kozlovskiy[2]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*
[2]*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan (Kazakhstan)*
**e-mail: rusakov@moss.phys.msu.ru*

The interest in oxide nanostructures based on transition metals is due not only to their unique physicochemical properties, large specific surface area, resistance to external influences, but also to the potential possibilities of their use in biomedicine, photocatalysis, microelectronics, information storage, etc. One of the most promising materials for various practical applications are iron oxide nanoparticles in its various modifications, which are characterized by a variety of structural, magnetic and conductive properties. In order for the properties of magnetic nanoparticles not to degrade when interacting with the environment, their surface must be stabilized. Such stabilization can be provided by coating their surface with various metals or organosilicon compounds, i.e. by creating nanostructures of the "core-shell" type. In addition, such a coating can increase the dispersibility and biocompatibility of nanostructures.

The report presents the results of a study by methods of Mössbauer spectroscopy, powder X–ray diffractometry and scanning electron microscopy of iron oxide Fe_3O_4 nanoparticles uncoated and coated with gold – Fe_3O_4@Au, subjected to thermal annealing at temperatures up to 800°C and subsequent ultrasonic dispersion. For processing and analyzing the Mossbauer spectra using the SpectRelax program, a model was proposed and implemented that takes into account the features of the crystal and magnetic structure of magnetic nanoparticles of Fe_3O_4 oxide, taking into account its nonstoichiometry, the fast electron exchange between neighboring ions in $\{Fe^{2+}Fe^{3+}\}$ pairs and the relaxation behavior of the magnetic moment within the framework of a multilevel superparamagnetic relaxation model. As a result of the model fitting of the Mössbauer spectra of the studied nanoparticles, the values of the relative intensities *I* (Fig. 1) and the hyperfine parameters of the subspectra corresponding to different states of Fe atoms were obtained: isomer shift, quadrupole shift of the hyperfine structure components and the hyperfine magnetic field on ^{57}Fe nuclei.

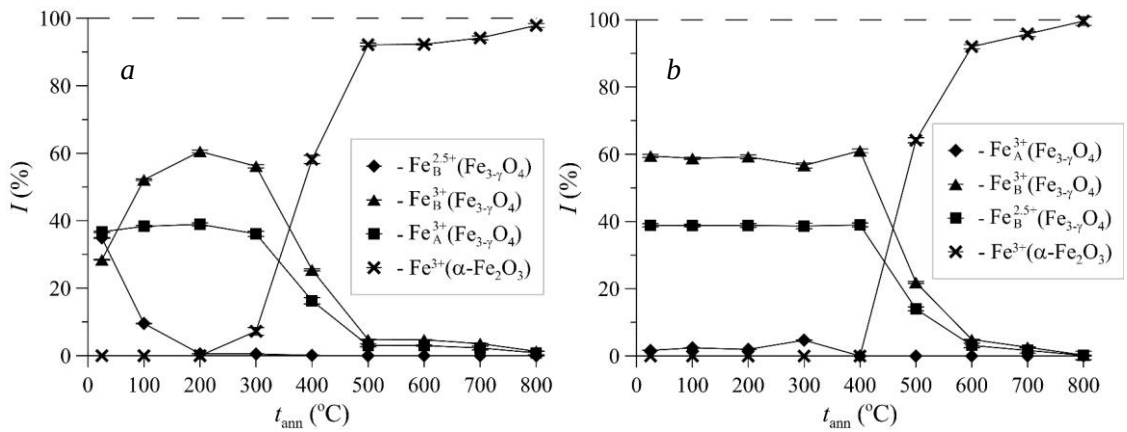


Fig. 1. The dependences of the relative intensities *I* of the Mössbauer subspectra corresponding to different states of Fe atoms on the annealing temperature t_{ann} of Fe_3O_4 iron oxide nanoparticles uncoated (*a*) and with gold coated (*b*).

For nonstoichiometric magnetite $Fe_{3-\gamma}O_4$, the number of vacancies γ per formula unit and the parameter of superparamagnetic relaxation were also obtained, which made it possible to estimate the average size of the magnetic ordering region of iron atoms.

A comparative analysis of the obtained data of Mössbauer spectroscopy, powder X-ray diffractometry and scanning electron microscopy is provided in the report.

МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ Fe_3O_4 И Fe_3O_4@Au НАНОЧАСТИЦ, ПОДВЕРГНУТЫХ ТЕРМИЧЕСКОМУ ОТЖИГУ

В.С. Русаков[1*], М.С. Фадеев[1], А.Л. Козловский[2]

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*
[2]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан (Казахстан)*
**e-mail: rusakov@moss.phys.msu.ru*

Интерес к оксидным наноструктурам на основе переходных металлов обусловлен не только их уникальными физико-химическими свойствами, большой удельной поверхностью, устойчивостью к внешним воздействиям, но и потенциальными возможностями их использования в биомедицине, фотокатализе, микроэлектронике, хранении информации и т.д. Одними из наиболее перспективных материалов для различных практических применений являются наночастицы оксида железа в различных его модификациях, которые характеризуются разнообразием структурных, магнитных и проводящих свойств. Для того чтобы свойства магнитных наночастиц не деградировали при взаимодействии с окружающей средой, их поверхность необходимо стабилизировать. Такая стабилизация может быть обеспечена покрытием их поверхности различными металлами или кремнийорганическими соединениями, т.е. созданием наноструктур типа «ядро-оболочка». Кроме того, такое покрытие может повысить диспергируемость и биосовместимость наноструктур.

В докладе представлены результаты исследования методами мессбауэровской спектроскопии, порошковой рентгеновской дифрактометрии и сканирующей электронной микроскопии наночастиц оксида железа без покрытия (Fe_3O_4) и с покрытием золотом (Fe_3O_4@Au), подвергнутых термическому отжигу при температурах до 800°C и последующему ультразвуковому диспергированию. Для обработки и анализа мессбауэровских спектров с помощью программы SpectrRelax предложена и реализована модель, учитывающая особенности кристаллической и магнитной структуры магнитных наночастиц оксида Fe_3O_4 с учетом его нестехиометрии, быстрого обмена электронами между соседними ионами в парах $\{Fe^{2+}Fe^{3+}\}$ и релаксационного поведения магнитного момента в рамках модели многоуровневой суперпарамагнитной релаксации. В результате модельной расшифровки мессбауэровских спектров исследованных наночастиц были получены значения относительных интенсивностей (Рис. 1) и сверхтонких параметров парциальных спектров, соответствующих различным состояниям атомов Fe: сдвига мессбауэровского спектра, квадрупольного смещения компонент сверхтонкой структуры и сверхтонкого магнитного поля на ядрах ^{57}Fe. Для нестехиометричного магнетита $Fe_{3-\gamma}O_4$ были получены также число вакансий γ на формульную единицу и параметр суперпарамагнитной релаксации, который позволил оценить средний размер области магнитного упорядочения атомов железа. В докладе проведен сравнительный анализ полученных данных мессбауэровской спектроскопии, порошковой рентгеновской дифрактометрии и сканирующей электронной микроскопии.

PROBE MESSBAUER DIAGNOSTICS DYNAMIC PROPERTIES OF 2D-DIMENSIONAL WATER LAYERS ON THE MONTMORILLONITE SUBSTRATE

A.A. Zalutskii*, V.V. Morozov, A.Y. Sokolov, E.N. Shkolnikov

Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russia
**e-mail: zalutskii@mail.ru*

The purpose of this report is to demonstrate a specially created approach based on probe Mössbauer spectroscopy (**MS**), potentially capable of diagnosing the physics of two measurements in thin monofilms of water adsorbed in montmorillonite at a qualitative level using experimental data.

We obtained the following main results:

1. The report presents a set of elastic parameters (shear modulus, Poisson coefficient, Gruneisen parameter) for two-dimensional hexagonal ice and discusses the quantitative assessment of thickness, density, viscosity for a quasi-liquid layer of water. It is confirmed according to [1] that there is no difference between the Messbaur parameters of the spectra for systems in two and three dimensions.

2. The most suitable for solving our problems was the approach of modular design [2] and the model classical-historical (CS) structures built of tetraedral atoms [3] satisfactorily correspond to the system of "surface ice-clay substrate" in their metric and topology. Due to its intense nature, the CS is able [3] (1) to introduce a limited energy, and (2) the transformation of the course itself can be accompanied by its elongation and transformation. Experimental confirmation of (1) and (2) using the MS method can be the temperature nature of the behavior of the Mössbauer parameters ($f' \approx S(T)$, $\Delta = 2\varepsilon$) for probes in the form of Fe^{2+} and Fe^{3+} compounds. The behavior of 2 D-ice is similar to the auxetics, which we first recorded by the probe MS method when analyzing the elastic characteristics of surface ice [4].

3. The Messbauer experiment confirms that melting in a system occurs using two phase transitions with the presence of an intermediate hexatic phase (GF) in it. At the same time, the crystal passes into GF through a continuous Berezinsky-Kosterlitz-Taules transition (BKT) [5], and GF turns into an isotropic liquid using a transition of the first kind. The report provides a probe MS technique to reliably diagnose these mechanisms (or types of phase transitions) and thereby propose an adequate melting scenario in two-dimensional systems.

4. For the study of stochastic processes or dynamic chaos, an MS technique was developed, with the help of which the boundary for various noise regions implemented in the studied system was diagnosed. Along with fixing the quantum dots of water behavior $h\Omega_{kl} \approx k_B T_m$ (see footnotes in [4]), possible scenarios for the path of establishing chaos in a deterministic system were analyzed at a qualitative level.

5. The approaches presented in the report open up new opportunities for studying, along with the classical types of "volumetric" ice (I_c, I_h, etc.), its special type, which is a metastable form of low-density ice (ferroelectric ice "0" and ice "i"). The dependence of the fractal dimension (d_F) of the surface ice on the external pressure (P/P_0) according to [6] can be considered "as a ladder leading to the physics of two dimensions."

[1] Y. Imry and L. Gunther. Physical Review B, **3**, 3939–3945 (1971).
[2] N.A. Bulienkov, Biophysics, **50**, 811-831 (2005).
[3] E.A. Zheligovskaya and N.A. Bulienkov, Biophysics, **62**, 683-690 (2017).
[4] A.A. Zalutskii, Crystallography Reports, **65**, 371-375 (2020).
[5] V.N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, Yu. D. Fomin and E. N. Tsiok, Phys. Usp., **60**, 857–885 (2017)
[6] J.G. Dash, Physics Today, **38**, 26–32 (1985).

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 2D-РАЗМЕРНЫХ СЛОЕВ ВОДЫ НА ПОДЛОЖКЕ МОНТМОРИЛЛОНИТА

А.А. Залуцкий*, В.В. Морозов, А.Ю. Соколов, Е.Н. Школьников

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия
**e-mail: zalutskii@mail.ru*

В реальном трехмерном (3D) мире всегда имеются поверхности (2D), и в зависимости от внешних условий могут фиксироваться взаимные переходы (2D↔3D). Цель доклада – продемонстрировать специально созданный на базе зондовой мессбауэровской спектроскопии (**МС**) подход, потенциально способный на качественном уровне с использованием экспериментальных данных диагностировать физику двух измерений в тонких монопленках воды, адсорбированных в монтмориллоните.

Нами были получены следующие основные результаты:

1. В докладе представлен набор упругих параметров (модуль сдвига, коэффициент Пуассона, параметр Грюнайзена) для двумерного гексагонального льда и обсуждается количественная оценка толщины, плотности, вязкости для квазижидкого слоя воды. Подтверждено согласно [1] отсутствие разницы между мессбауровскими параметрами спектров для систем, находящихся в двух и трех измерениях.

2. Наиболее пригодным для решения наших задач оказался подход модульного дизайна [2] и построенные из тетраэдрических атомов модельные кластерно-стержневые (**КС**) структуры [3] по своей метрике и топологии удовлетворительно соответствуют системе «поверхностный лед-глинистая подложка». По причине своего напряженного характера КС структуры способны [3] (1) высвобождать запасенную упругую энергию, а (2) сама трансформация стержня может сопровождаться его удлинением и раскручиванием. Экспериментальным подтверждением (1) и (2) с помощью метода МС может служить температурный характер поведения мессбауэровских параметров ($f' \approx S(T)$, $\Delta = 2\varepsilon$) для зондов в форме соединений Fe^{2+} и Fe^{3+}. При этом поведение 2D-льда подобно ауксетику, зарегистрированного нами впервые методом зондовой МС при анализе упругих характеристик поверхностного льда [4].

3. Мессбауэровский эксперимент подтверждает, что плавление в системе происходит с помощью двух фазовых переходов с наличием в ней промежуточной гексатической фазы (**ГФ**). При этом кристалл переходит в ГФ посредством непрерывного перехода Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) [5], а ГФ превращается в изотропную жидкость с помощью перехода первого рода.

4. Для исследования стохастических процессов или динамического хаоса разработана методика МС, с помощью которой была диагностирована граница для различных областей шума, реализуемых в изучаемой системе. Наряду с фиксацией квантовых точек поведения воды ($h\Omega_{kl} \approx k_B T_m$) (см. сноски в [4]) были проанализированы на качественном уровне возможные сценарии пути установления хаоса в детерминированной системе.

5. Обсуждаемые в докладе подходы открывают новые возможности изучения наряду с классическими видами «объемного» льда (I_c, I_h, и т.п.) его особый тип, который представляет собой метастабильные формы льда низкой плотности (сегнетоэлектрический лёд «0» и лед «i»). Зависимость фрактальной размерности (d_F) поверхностного льда от внешнего давления (P/P_0) согласно [6] можно рассматривать «как лестницу, ведущую в физику двух измерений».

ANALYSIS OF MAGNETIC ANISOTROPY IN FINEMET ALLOY BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

E. Kuzmann[1*], S. Stichleutner[1,2], L. Machala[3], J. Pechousek[3], R. Vondrasek[3], D. Smrcka[3], L. Kouril[3], Z. Homonnay[1], M.I. Oshtrakh[4], A. Mozzolai[1], V.A. Skuratov[5,6,7], M. Kudor[1], B. Herczeg[1], L.K. Varga[8]

[1]*Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, 1117, Budapest, Hungary*
[2]*Centre for Energy Research, 1121 Budapest, Hungary*
[3]*Department of Experimental Physics, Faculty of Science, Palacký University 771 46 Olomouc, Czech Republic*
[4]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
[5]*Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, Joint Institute for Nuclear Research, JINR, 141980, Dubna, Moscow region, Russian Federation*
[6]*National Research Nuclear University MEPhI, 115409, Moscow, Russian Federation*
[7]*Dubna State University, 141980, Dubna, Moscow Region, Russian Federation*
[8]*Wigner Research Centre for Physics, 1121 Budapest, Hungary*
**e-mail: erno.kuzmann@ttk.elte.hu*

Mössbauer spectroscopic measurements can be advantageously used to follow the formation and change of induced anisotropy in FINEMET alloys. The magnetic anisotropy can be characterized by measuring the relative areas of the 2nd and the 5th lines of the Mössbauer sextets ($A_{2,5}$), compared to those of the 1st and the 6th lines ($A_{1,6}$). The ratio of these relative areas is determined by the angle θ included by the directions of magnetic moment and γ-rays according to the formula [1]:

$$A_{2,5}/A_{1,6} = 4 \sin^2\theta/(3(1 + \cos^2\theta)) \quad (1)$$

In the case of stress field annealed FINEMET ribbons, the change in the relative areas of the 2nd and the 5th lines in the Mössbauer spectra indicated significant variation in the magnetic anisotropy due to the different annealing procedures. A correlation has been established between the permeability and the magnetic anisotropy of the annealed FINEMET samples [2]. We have also found earlier that the irradiation by swift heavy ions [3] is another excellent method to alter the magnetic anisotropy in amorphous and nanocrystalline ribbons in FINEMET alloys.

In the present work ^{57}Fe transmission and conversion electron Mössbauer spectroscopy as well as XRD were used to study the effect of swift heavy ion irradiation on stress annealed FINEMET samples with composition of $Fe_{73.5}Si_{13.5}Nb_3B_9Cu_1$ [4]. XRD of the samples indicated changes neither in the crystal structure nor in the texture of irradiated ribbons as compared to those of non-irradiated ones. However, changes in the magnetic anisotropy both in the bulk as well as at the surface of the FINEMET alloy ribbons irradiated by 160 MeV ^{132}Xe ions with a fluence of 10^{13} ion cm^{-2} were revealed via the decrease in the relative areas of the 2nd and the 5th lines of the magnetic sextets in the corresponding Mössbauer spectra. The irradiation induced change in the magnetic anisotropy in the bulk was found to be similar or somewhat higher than that at the surface. The results are discussed in terms of the defects produced by irradiation and corresponding changes in the orientation of spins depending on the direction of the stress generated around these defects.

This work was supported by grants of the Hungarian OTKA projects No K43687, K68135, K100424, K115913, K115784 and by the Czech-Hungarian Intergovernmental Fund, Grant No. CZ-11/2007 (MEB040806). by the project “Swift heavy ions in research of iron-bearing nanomaterials”, No. of theme 04-5-1131-2017/2021, solved in cooperation of the Czech Republic with the JINR (3+3 projects), furthermore by internal IGA grant of Palacký University (IGA_PrF_2022_003). The authors from Palacký University Olomouc want to thank the project CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_049/0008408 of the Ministry of Education, Youth & Sports of the Czech Republic. M.I.O. was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project № FEUZ-2020-0060 and in part by the Ural Federal University project within the Priority-2030 Program.

[1] E. Kuzmann and I.N. Spirov, *J. Nucl. Mater*., **137**, 22–31 (1986).
[2] E. Kuzmann, S. Stichleutner, A. Sápi, Z. Klencsár, M.I. Oshtrakh, V.A. Semionkin, S. Kubuki, Z. Homonnay and L.K. Varga, *Hyperfine Interact*., **219**, 63–67 (2013).
[3] E. Kuzmann, S. Stichleutner, A. Sápi, L.K. Varga, K. Havancsák, V. Skuratov, Z. Homonnay and A. Vértes, *Hyperfine Interact*., **207**, 73–79 (2012).
[4] E. Kuzmann, S. Stichleutner, L. Machala, J. Pechoušek, R. Vondrášek, D. Smrčka, L. Kouřil, Z. Homonnay, M.I. Oshtrakh, A. Mozzolai, V.A. Skuratov, M. Kudor, B. Herczeg and L.K. Varga, *Nanomaterials*, **12**, 1962 (2022).

АНАЛИЗ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В СПЛАВАХ FINEMET МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Э. Кузманн[1*], Ш. Штихлеутнер[1,2], Л. Махала[3], И. Печусек[3], Р. Вондрасек[3], Д. Смрчка[3], Л. Коурил[3], З. Хомонаи[1], М.И. Оштрах[4], А. Мозолаи[1], В.А. Скуратов[5,6,7], М. Кудор[1], Б. Херчег[1], Л.К. Варга[8]

[1]*Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, 1117, Budapest, Hungary*
[2]*Centre for Energy Research, 1121 Budapest, Hungary*
[3]*Department of Experimental Physics, Faculty of Science, Palacký University 771 46 Olomouc, Czech Republic*
[4]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, 620002, Российская Федерация*
[5]*Лаборатория ядерных реакций им. Флерова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Московская область, Российская Федерация*
[6]*Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409, Москва, Российская Федерация*
[7]*Государственный университет «Дубна», 141980, Дубна, Dubna, Московская область, Российская Федерация*
[8]*Wigner Research Centre for Physics, 1121 Budapest, Hungary*
**e-mail: erno.kuzmann@ttk.elte.hu*

Мессбауэровская спектроскопия может быть успешно использована для исследования формирования и изменения индуцированной анизотропии в сплавах FINEMET. Магнитная анизотропия может характеризоваться измерением относительных площадей 2-й и 5-й линий в магнитном секстете ($A_{2,5}$) в сравнении с относительными площадями 1-й и 6-й линий ($A_{1,6}$). Отношение этих относительных площадей определяется углом θ между направлениями магнитного момента и направлением γ-лучей согласно формуле [1]:

$$A_{2,5}/A_{1,6} = 4 \sin^2\theta/(3(1 + \cos^2\theta)) \quad (1)$$

В случае приложения поля нагрузки во время отжига ленты сплава FINEMET изменение в относительных площадях 2-й и 5-й линий в мессбауэровских спектрах указывает на значительное изменение магнитной анизотропии из-за отличий в процессах отжига. Была установлена корреляция между восприимчивостью и магнитной анизотропией образцов отожженных сплавов FINEMET [2]. Ранее мы также обнаружили, что облучение быстрыми тяжелыми ионами [3] является другим замечательным способом влиять на магнитную анизотропию в аморфных и нанокристаллических лентах сплавов FINEMET.

В настоящей работе мессбауэровская спектроскопия на ядрах ^{57}Fe (трансмиссионная и на конверсионных электронах), а также рентгеновская дифракция были использованы для изучения влияния облучения быстрыми тяжелыми ионами на отожженные образцы сплава FINEMET с составом $Fe_{73.5}Si_{13.5}Nb_3B_9Cu_1$ [4]. Облучение вызывает изменения магнитной анизотропии в массивном образце схожие или чуть большие, чем на поверхности ленты. Результаты обсуждаются на основе образования радиационных дефектов и соответствующих изменений ориентации спинов, зависящих от направления напряжения, создаваемого около этих дефектов.

EMISSION NGR SPECTROSCOPY OF GRAIN BOUNDARIES IN COARSE-GRAINED AND ULTRAFINE-GRAINED NIOBIUM

V.V. Popov[1*], E.V. Osinnikov[1]

[1]*M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia*
**e-mail: vpopov@imp.uran.ru*

The mechanism of grain-boundary diffusion and the state of grain boundaries (GBs) in coarse-grained and ultrafine-grained (UFG) niobium have been studied by the method of emission Mössbauer spectroscopy on ^{57}Co(^{57}Fe) nuclei. Samples of UFG niobium were obtained by severe plastic deformation (SPD) of single-crystal niobium by high-pressure torsion (HPT).

To obtain Mössbauer sample-sources, the Mössbauer radionuclide ^{57}Co in amount of 30–40 MBq was deposited on one of the sample surfaces with an area of ~1 cm^2 by electrolytic deposition. To introduce the Mössbauer isotope atoms into the grain boundaries, the sample was annealed at 400°C for 10 h. The Mössbauer (nuclear gamma-resonance - NGR) spectra were measured on the MS-1101E Mössbauer spectrometer with a BDGRS-2A-Fe resonant detector. After measuring the spectra of the Nb samples annealed at 400°C, annealings were performed at higher temperatures up to 600°C with an interval of 25°C for 2 h, and the NGR spectrum was recorded after each annealing.

The studies have shown that at all the annealing temperatures studied, the Mössbauer spectra of both coarse-grained and UFG niobium contain two lines, one of which (component 1) is formed by atoms of the Mössbauer isotope localized in grain boundaries and the other one (component 2) is formed by atoms located in the near-boundary regions of crystallites. In both cases the isomer shift of component 1 is higher than that of component 2. This indicates that both in coarse-grained and UFG Nb, the grain-boundary diffusion of cobalt proceeds by the interstitial mechanism.

The isomer shifts of spectral lines taken from samples of coarse-grained and UFG Nb have been compared. In case of coarse-grained Nb the isomer shifts of both lines slightly increase with increasing temperature. In this case, the isomer shift of bulk line (component 2) is very close to its tabular value for ^{57}Co(^{57}Fe) atoms in the ideal Nb lattice, which means that the state of atoms in the near-boundary areas of coarse-grained Nb is close to their state in the regular lattice. The most probable reason for the reduced values of spectral line isomer shifts at low annealing temperatures is the formation of interstitial segregations. An increase in isomer shifts with an increase in the annealing temperature is probably due to the escape of interstitial atoms from grain boundaries and near-boundary areas of crystallites.

In case of UFG Nb, the isomer shifts of both lines are significantly lower than for the coarse-grained Nb, especially at relatively low temperatures (400–450°C). This difference, apparently, is explained by the special deformation-modified ("non-equilibrium") state of GBs resulting from SPD. One of the main features of the deformation-modified state of grain boundaries is an excess free volume, which results in the reduced isomer shifts. At annealing temperatures of 400–450°C, the isomer shifts of both lines remain almost unchanged. Apparently, this is explained by the fact that at these temperatures there are no noticeable changes in the state of grain boundaries and near-boundary areas of crystallites. With an increase in the annealing temperature above 450°C, the isomer shifts of both lines sharply increase, and after annealing at 600°C the isomer shift of the bulk line in UFG Nb approaches its value for the coarse-grained sample. An increase in the isomer shifts with an increase in the annealing temperature is explained by the recovery processes in grain boundaries and near-boundary areas of crystallites.

The study is supported by Russian Science Foundation, grant No. 21-13-00063, https://rscf.ru/project/21-13-00063.

ЭМИССИОННАЯ ЯГР СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО НИОБИЯ

В.В. Попов[1*], Е.В. Осинников[1]

[1]*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: vpopov@imp.uran.ru*

Методом эмиссионной мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Co(^{57}Fe) исследован механизм зернограничной диффузии и состояние границ зерен (ГЗ) в крупнокристаллическом и ультрамелкозернистом (УМЗ) ниобии. Образцы УМЗ ниобия были получены интенсивной пластической деформацией (ИПД) монокристаллического ниобия методом кручения под высоким давлением (КВД).

Для получения мессбауэровских образцов-источников на одну из поверхностей образцов площадью ~1 см^2 электролитическим осаждением наносился мессбауэровский радионуклид ^{57}Co в количестве 30–40 МБк. Для внедрения атомов мессбауэровского изотопа в границы зерен образец отжигали при 400°C в течение 10 ч. Измерение мессбауэровских (ядерных гамма-резонансных – ЯГР) спектров осуществлялось на мессбауэровском спектрометре MS-1101E с резонансным детектором БДГРС-2А-Fe. После измерения спектров образцов Nb, отожженных при 400°C, проводили отжиги при более высоких температурах вплоть до 600°C с интервалом 25°C в течение 2 ч, и после каждого отжига снимали ЯГР спектр.

Проведенные исследования показали, что при всех изученных температурах отжига в мессбауэровских спектрах и крупнокристаллического, и УМЗ ниобия имеются две линии, одна из которых сформирована атомами мессбауэровского изотопа, локализованного в ГЗ (компонента 1), а другая – атомами, расположенными в приграничных областях кристаллитов (компонента 2). Изомерный сдвиг компоненты 1 больше, чем компоненты 2, что свидетельствует о том, что в обоих случаях Co диффундирует по ГЗ по межузельному механизму.

Проведено сравнение изомерных сдвигов спектральных линий, снятых с образцов крупнозернистого и УМЗ Nb. В случае крупнозернистого Nb изомерные сдвиги обеих линий незначительно увеличиваются с повышением температуры. При этом изомерный сдвиг объемной линии (компонента 2) очень близок к табличному значению изомерного сдвига для атомов ^{57}Co(^{57}Fe) в идеальной решетке Nb. Это показывает, что состояние атомов в приграничных областях крупнозернистого Nb близко к состоянию атомов в регулярной решетке. Наиболее вероятной причиной пониженных значений изомерного сдвига спектральных линий при низких температурах отжига является образование сегрегаций примесей внедрения. Увеличение изомерных сдвигов при повышении температуры отжига, вероятно, объясняется уходом атомов примесей внедрения из ГЗ и приграничных областей кристаллитов.

В случае УМЗ Nb изомерные сдвиги обеих линий значительно ниже, чем для образца крупнокристаллического Nb, особенно при относительно низких температурах (400-450°C). Это различие, по-видимому, объясняется особым деформационно-модифицированным («неравновесным») состоянием ГЗ, сформировавшимся в результате ИПД. Один из основных признаков деформационно-модифицированного состояния ГЗ - это избыточный свободный объем, следствием которого являются пониженные значения изомерного сдвига. При температурах отжига 400-450°C изомерный сдвиг обеих линий почти не меняется. По-видимому, это объясняется тем, что при этих температурах не происходит заметных изменений состояния ГЗ и приграничных областей кристаллитов. С повышением температуры отжига выше 450°C изомерные сдвиги обеих линий резко увеличиваются, и после отжига при 600°C изомерный сдвиг объемной линии приближается к значению изомерного сдвига объемной линии для крупнозернистого образца. Рост изомерного сдвига при повышении температуры отжига объясняется протеканием процессов возврата в ГЗ и приграничных областях кристаллитов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00063, https://rscf.ru/project/21-13-00063.

RESEARCHING OF PROPERTIES OF MAGNETIC THIN FILMS FOR HEAT-ASSISTED MAGNETIC RECORDING

A.A. Valiullin[1*], A.S. Kamzin[2], L.R. Tagirov[1,3], L.D. Zaripova[1]

[1]*Kazan Federal University, Kazan, Russia*
[2]*Ioffe Physical–Technical Institute of RAS, St. Petersburg, Russia*
[3]*Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center, RAS, Kazan, Russia*
**e-mail: albert.bm@yandex.ru*

A great many studies of thin film magnetic materials focus on increasing their magnetic data density. The data density is often raised by minimizing the size of grains (data storage items in a magnetic film) and by switching from longitudinal to transverse recording. However, the minimum possible size of granules is limited by the emergence of the superparamagnetic effect, which prevents the magnetic data density from increasing. The exchange interaction between granules is another limiting factor.

In this report different methods of synthesis of $L1_0$ FePt thin films are used to overcome these limitations:

1. Further study indicates that the perpendicular anisotropy in $[Fe/Pt]_n$ multilayer films has an intimate correlation with the periodicity n, and, with the increasing of periodicity n, the out-of-plane remanence ratio significantly increases and then decreases slowly. This result suggests that the enhanced perpendicular anisotropy may be caused by the interface anisotropy at the Fe/Pt interfaces in the $[Fe/Pt]_n$ multilayers.

It has been established that, in multilayer structures based on $L1_0$ FePt films obtained by RF magnetron sputtering, the evolution of texture from (111) to (001) can be effectively induced by using multilayer structure. This might be a new method to obtain perpendicular anisotropy and, at same time, to effectively reduce the exchange coupling interaction among grains in FePt films.

2. Bit-patterned media (BPM), which consist of ferromagnetic (FM) nanodots regularly arranged in a nonmagnetic matrix, are a promising candidate to replace continuous film media for ultrahigh density magnetic recording.

It is known that the magnetic properties of FePt films can be tailored by introducing additional elements into them. Adding rhodium (Rh) to the FePt alloy allows us to optimize the magnetic properties of thin films without sacrificing their magnetocrystalline anisotropy energy. $FePt_{1-x}Rh_x$ films with different Rh concentrations ($0 \leq x \leq 0.4$) and a thickness of 20 nm were fabricated by magnetron sputtering. It was found that the film was paramagnetic at room temperature when $x = 0$, and the easy axis of magnetocrystalline anisotropy was perpendicular to the film surface. At rhodium concentrations of $x < 0.32$, the ferromagnetic order was preserved at room temperature in $FePt_{1-x}Rh_x$, and the high magnetocrystalline anisotropy energy that established the perpendicular magnetization orientation was retained.

3. At the present time, two-layer magnetic films prepared from two materials with different properties extensively studied in connection of their possible applications as magnetic springs or composites that are carriers of superhigh-dense magnetic recording.

Magnetic $L1_0$–FePt(10 nm)/Fe(t, nm)/Ta(2 nm) (t is the Fe film thickness that is varied from 0 to 15 nm) multilayer structures have been prepared by magnetron codeposition. It was stated that the exchange interaction between the FePt and Fe layers was stronger as the soft-magnetic Fe layer thickness was less than 3 nm.

ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДЛЯ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ЗАПИСИ ИНФОРМАЦИИ

А.А. Валиуллин[1*], А.С. Камзин[2], Л.Р. Тагиров[1,3], Л.Д. Зарипова[1]

[1]*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
[2]*Физико-техничский институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*
*e-mail: *albert.bm@yandex.ru*

Многие исследования магнитных материалов, связанные с созданием тонких пленок, направлены на повышение плотности магнитной записи информации. Повышение плотности записи достигается за счет минимизации размеров зерен. Однако, дальнейшему уменьшению размеров гранул препятствуют возникновение суперпарамагнитного эффекта и обменное взаимодействие между гранулами. [1]. Для преодоления этих ограничений изучены различные способы создания специальных структур и получены следующие результаты:

1. Пленки FePt $L1_0$-фазы были получены в виде [Fe/Pt]n многослойной структуры с помощью системы магнетронного распыления осаждением на предварительно нагретую стеклянную подложку без какого либо промежуточного слоя путем последовательного напыления Fe и Pt слоя. С увеличением n, энергия перпендикулярной магнитной анизотропии возрастает. Установлено, что пленки [Fe/Pt]n при $n = 16$ обладают преимущественно перпендикулярной плоскости пленок магнитной анизотропией.

2. Одним из наиболее перспективных методов увеличения плотности магнитной записи является использование структурированного носителя информации. В этом случае в пленке создаются ферромагнитные гранулы (наноточки) одинаковых размеров. Добавление родия (Rh) в сплав FePt позволяет оптимизировать магнитные свойства тонких пленок без существенного уменьшения энергии магнитокристаллической анизотропии, что позволяет использовать данный состав в качестве структурированного носителя информации.

3. В трехслойных пленках $L1_0$ FePt / Fe / Ta, в которых слой Ta толщиной 2 нм нанесен для предотвращения коррозии, изучены магнитные свойства, структура и процессы перемагничивания. На основании экспериментальных данных, анализа кривых размагничивания и остаточной намагниченности установлено, что при толщинах магнитомягкого слоя Fe менее 3 нм обменное взаимодействие между слоями FePt и Fe сильнее, чем когда толщина слоя Fe больше 3 нм. Мессбауэровские исследования показали, что минимальное отклонение магнитных моментов (θ) от нормали к поверхности многослойной структуры наблюдается, когда толщина слоя Fe составляет 1 нм.

SYNTHESIS, STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF CORE@SHELL NANOCOMPOSITES BASED ON IRON CARBIDES AND OXIDES

S.S. Starchikov[1*], V.A. Zayakhanov[1], A.L. Vasiliev[1], I.S. Lyubutin[1], K.O. Funtov[1], M.V. Lyubutina[1], N.K. Chumakov[2], L.F. Kulikova[3], V.N. Agafonov[4], V.A. Davydov[3]

[1]*Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*
[2]*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*
[3]*L.F. Vereshchagin Institute for High Pressure Physics of RAS, Troitsk, Moscow, Russia*
[4]*GREMAN, UMR CNRS 7347, Francois Rabelais University, 37200, Tours, France*
**e-mail: sergey.s.starchikov@gmail.com*

Iron carbide nanocomposites in carbon shells currently have a lot of opportunities for practical use in such areas as catalysis, Fischer-Tropsch reactions, data storage devices, ecology, protective coatings, biomedicine, etc. The simplicity of chemical modification of the carbon surface enable to chemically attach various functional groups to nanoparticles. Together with high values of magnetization, absence of cytotoxicity, it provides a wider potential for innovative applications of nanoparticle-encapsulated iron carbides compared to iron oxides, which are currently the main type of base platforms for nanoscale biomedical nanocomplexes [1,2].

This work presents the results of the synthesis and study of the phase composition, crystal structure and magnetic properties of core-shell nanocomposites based on iron carbides, iron oxides and carbon (Fig. 1) [3]. For the synthesis of nanocomposites, polycrystalline ferrocene powder $Fe(C_5H_5)_2$ was used.

Ferrocene was placed in a high pressure cell. After that, the pressure was increased to 8 GPa, heated to high temperatures (High Pressure-High Temperature synthesis, HP-HT) and kept for various times

The ferrocene decomposition products obtained after cooling to room temperature were studied by various methods, including X-ray phase analysis, electron microscopy, Raman and Mössbauer spectroscopy (including at cryogenic temperatures).

Two main types of ferrocene transformations have been identified: *in-situ* during HP-HT and *ex-situ* after the pressure is released and the samples are removed from the high pressure cell, resulting in the formation of new products.

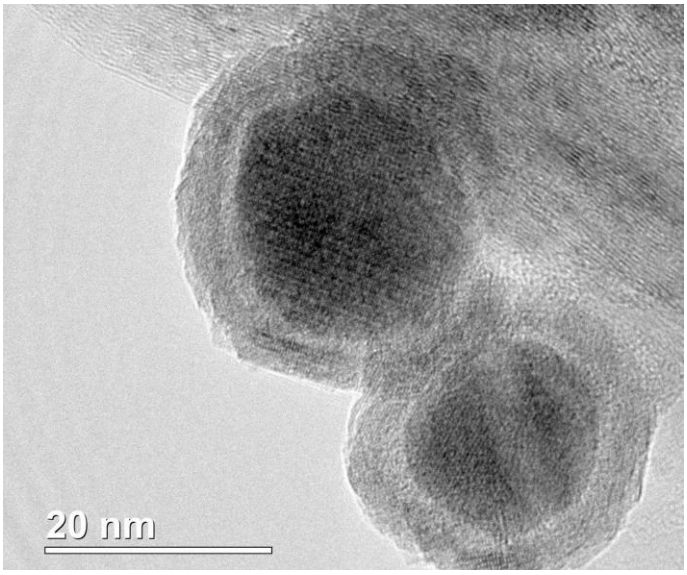


Fig. 1. Core@shell nanocomposites of $Fe_7C_3/Fe_xO_y/C$

Support by Russian Science Foundation (#22-72-00060) is acknowledged.

[1] Davydov V., Rakhmanina A., Kireev I. et al. J. Mater. Chem. B. 2, 4250 (2014).
[2] Yu J., Chen F., Gao W. et al. Nanoscale Horiz. 2, 81, (2017).
[3] S.S. Starchikov, V.A. Zayakhanov, A.L. Vasiliev et.al. Carbon 178, 708-717, (2021)

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ ТИПА ЯДРО@ОБОЛОЧКА НА ОСНОВЕ КАРБИДОВ И ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА

С.С. Старчиков[1*], В.А. Заяханов[1], А.Л. Васильев[1], И.С. Любутин[1], К.О. Фунтов[1], М.В. Любутина[1], Н.К. Чумаков[2], Л.Ф. Куликова[3], В.Н. Агафонов[4], В.А. Давыдов[3]

[1] *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
[2] *Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия*
[3] *Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Москва, Россия*
[4] *GREMAN, UMR CNRS 7347, Francois Rabelais University, 37200, Tours, Франция*
**e-mail: sergey.s.starchikov@gmail.com*

Нанокомпозиты карбидов железа в углеродных оболочках в настоящее время имеют широкие возможности использования в таких областях, как катализ, реакции Фишера-Тропша, устройства хранения данных, экология, защитные покрытия, биомедицина. Простота химической модификации углеродной поверхности позволяет осуществить химическое присоединение к наночастицам различных функциональных групп. В сочетании с высокими значениями намагниченности, отсутствием цитотоксичности, это обеспечивает инкапсулированным наночастицам карбидов железа инновационный потенциал по сравнению с оксидами железа, которые в настоящее время являются основным типом базовых платформ наноразмерных биомедицинских нанокомплексов [1,2].

В данной работе представлены результаты синтеза и исследования фазового состава, кристаллической структуры и магнитных свойств нанокомпозитов типа ядро@оболочка, полученных на основе карбидов, оксидов железа и углерода (Рис. 1) [3]. Для синтеза нанокомпозитов использовался поликристаллический порошок ферроцена $Fe(C_5H_5)_2$. Ферроцен помещался в камеру высокого давления, затем давление повышалось до 8 ГПа и производился нагрев до высоких температур (High Pressure-High Temperature synthesis, HP-HT) при различных временах выдержки. После охлаждения до комнатной температуры, полученные продукты разложения ферроцена исследовались комплексом методов, включая порошковую рентгеновскую дифракцию, электронную микроскопию, рамановскую и мессбауэровскую спектроскопию (в том числе при криогенных температурах).

Установлены два основных вида превращений ферроцена: *in-situ* при высоком давлении и температуре и *ex-situ* с образованием новых продуктов, которые происходят после сброса давления и удаления образцов из камеры высокого давления.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 22-72-00060).

[1] Davydov V., Rakhmanina A., Kireev I. et al. J. Mater. Chem. B. **2**, 4250 (2014).
[2] Yu J., Chen F., Gao W. et al. Nanoscale Horiz. **2**, 81, (2017).
[3] S.S. Starchikov, V.A. Zayakhanov, A.L. Vasiliev et.al. Carbon **178**, 708-717, (2021)

MAGNETIC AND MOSSBAUER STUDIES OF Fe, Fe_XCo_{1-X} AND Fe_XNi_{1-X} NANOWIRES

I.V. Perunov[1*], K.V. Frolov[1], M.A. Chuev[2], I.M. Doludenko[1], D.L. Zagorskii[1], N.K. Chumakov[3], I.S. Lyubutin[1]

[1]*Shubnikov Institute of Crystallography FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*
[2]*Valiev Institute of Physics and Technology RAS, Moscow, Russia*
[3]*National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*
**e-mail: igor_v_perunov@mail.ru*

Magnetic nanowires can be used in magnetic sensors, spintronics devices, hydrogen fuel cell electrodes and in biomedical technologies, including antitumor therapy because of their promising properties [1].

Series of Fe (grown under different deposition potentials), Fe_xCo_{1-x} (x = 6.7; 15.7; 29.7; 38.6; 38.2; 46.5; 52.15; 54.8; 59; 64.4) and Fe_xNi_{1-x} (x = 16.3; 24.6; 43.5; 48.5; 71.4) nanowires were obtained by electrochemical deposition in the pores of polymer track membranes with a pore diameter of 100 nm and studied by electron microscopy, X-ray diffraction, Mossbauer spectroscopy on ^{57}Fe nuclei and vibrational magnetometry. We used the generalized theoretical Stoner-Wolfart model to describe the magnetic properties and calculate the basic physical parameters of nanowires [2,3]. Magnetometry data and Mossbauer spectroscopic measurements show that our series of nanowires have pronounced ferromagnetic properties. It is shown that arrays of Fe magnetic nanowires exhibit more pronounced magnetic properties than electrodeposited continuous layers of similar composition. In FeCo and FeNi nanowires, with an increase in the concentration of iron, both the saturation magnetization and the magnitude of the hyperfine magnetic field at the iron nuclei increase.

The energy of magnetic anisotropy of FeCo and FeNi NWs has high values and does not depend on the concentration of iron in the composition of the NW material. These results suggest a high resistance of the NW to remagnetization. Also we found that the dependencies of the hyperfine magnetic field on the iron concentration for FeCo nanowires and FeCo bulk alloys [4] are very different.

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education within the framework of the state tasks of the Federal Research Institute "Crystallography and Photonics" of the Russian Academy of Sciences and the K.A. Valiev Institute of Physics and Technology of the Russian Academy of Sciences. The equipment of the Center for Collective Usage of the A.V. Shubnikov Institute of Crystallography of the Federal Research Institute "Crystallography and Photonics" of the Russian Academy of Sciences and the equipment of the resource Center for Electrophysical Methods of the National Research Center "Kurchatov Institute" were used.

[1] Vázquez M. (ed.). Magnetic nano-and microwires: design, synthesis, properties and applications. – Woodhead Publishing, 2020, 997 p. 2nd Edition - March 31, 2020
[2] Afanas'ev A. M., Chuev M. A., Hesse J. Mössbauer spectra of Stoner-Wohlfarth particles in rf fields in a modified relaxation model //Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1999. – T. 89. – №. 3. – C. 533-546.
[3] Chuev M. A., Hesse J. Nanomagnetism: extension of the Stoner–Wohlfarth model within Néel's ideas and useful plots //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – T. 19. – №. 50. – C. 506201.
[4] Johnson C. E., Ridout M. S., Cranshaw T. E. The Mössbauer effect in iron alloys //Proceedings of the Physical Society (1958-1967). – 1963. – T. 81. – №. 6. – C. 1079.

МАГНИТНЫЕ И МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ Fe, Fe_XCo_{1-X} И Fe_XNi_{1-X}

И.В. Перунов[1*], К.В. Фролов[1], М.А. Чуев[2], И.М. Долуденко[1], Д.Л. Загорский[1], Н.К. Чумаков[3], И.С. Любутин[1]

[1]*Институт кристаллографии им. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия*
[2]*Физико-технический институт им. В.И. Валиева РАН, Москва, Россия*
[3]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия*
**e-mail: igor_v_perunov@mail.ru*

Магнитные нанопроволоки могут быть использованы в магнитных датчиках, устройствах спинтроники, электродах водородных топливных элементов и в биомедицинских технологиях, включая противоопухолевую терапию, благодаря их многообещающим свойствам [1].

Серии нанопроволок из Fe (варьировались потенциалы осаждения), Fe_xCo_{1-x} (x = 6.7; 15.7; 29.7; 38.6; 38.2; 46.5; 52.15; 54.8; 59; 64.4) и Fe_xNi_{1-x} (x = 16.3; 24.6; 43.5; 48.5; 71.4) были получены методом электрохимического осаждения в порах полимерных трековых мембран с диаметром пор 100 нм и изучены методами электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe и вибрационной магнитометрии. Мы использовали обобщенную теоретическую модель Стонера-Вольфарта для описания магнитных свойств и расчета основных физических параметров нанопроволок [2,3]. Данные магнитометрии и мёссбауэровской спектроскопии показывают, что все серии нанопроволок обладают выраженными ферромагнитными свойствами. Показано, что массивы магнитных нанопроволок из Fe обладают более выраженными магнитными свойствами, чем электроосажденные слои аналогичного состава. В нанопроволоках FeCo и FeNi с увеличением концентрации железа увеличивается как намагниченность насыщения, так и величина сверхтонкого магнитного поля на ядрах железа.

Энергия магнитной анизотропии как у FeCo, так и у FeNi нанопроволок имеет высокие значения и не зависит от концентрации железа в составе материала нанопроволок. Эти результаты свидетельствуют о высокой стойкости нанопроволок к перемагничиванию. Обнаружено, что зависимости сверхтонкого магнитного поля от концентрации железа для нанопроволок FeCo и объемных сплавов FeCo [4] различны.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках государственных заданий ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН и Физико-технического института им. К.А. Валиева РАН. Использовалось оборудование Центра коллективного пользования Института кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН и оборудование ресурсного центра электрофизических методов Национального исследовательского центра "Курчатовский институт".

[1] Vázquez M. (ed.). Magnetic nano-and microwires: design, synthesis, properties and applications. – Woodhead Publishing, 2020, 997 p. 2nd Edition - March 31, 2020
[2] Afanas'ev A. M., Chuev M. A., Hesse J. Mössbauer spectra of Stoner-Wohlfarth particles in rf fields in a modified relaxation model //Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1999. – Т. 89. – №. 3. – С. 533-546.
[3] Chuev M. A., Hesse J. Nanomagnetism: extension of the Stoner–Wohlfarth model within Néel's ideas and useful plots //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2007. – Т. 19. – №. 50. – С. 506201.
[4] Johnson C. E., Ridout M. S., Cranshaw T. E. The Mössbauer effect in iron alloys //Proceedings of the Physical Society (1958-1967). – 1963. – Т. 81. – №. 6. – С. 1079.

STUDY OF THE ELECTRON IRRADIATION EFFECT ON α-Fe_2O_3 NANOPARTICLES

M.S. Fadeev[1*], A.L. Kozlovskiy[2], V.S. Rusakov[1], K.K. Kadyrzhanov[2]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*
[2]*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan (Kazakhstan)*
[*]*e-mail: superxerox@yandex.ru*

During the chemical synthesis of iron-containing oxide nanoparticles and subsequent thermal annealing, in most cases, a large number of vacancy and dislocation defects occur, negatively affecting the degree of perfection of the crystal structure. Additional thermal heating leads to a significant increase in the size of nanoparticles due to their sintering and agglomeration. Therefore, to reduce deformations in the structure, it is necessary to use other methods of annealing defects, such as ionizing radiation. In turn, the interest in α-Fe_2O_3 hematite nanoparticles is due to their potential applicability as catalysts, as well as cathode materials for lithium-ion batteries, for which a decrease in the concentration of defects in the starting material and an increase in the degree of crystallinity can significantly increase the time of operation.

The report presents the results of a study by the methods of Mossbauer spectroscopy using powder X-ray diffractometry and scanning electron microscopy of the effect of electron irradiation (with an energy of 5 MeV and doses up to 250 kGy) on the properties of α-Fe_2O_3 nanoparticles obtained as a result of chemical synthesis (co-deposition of a mixture of iron (II) chloride $FeCl_2$ and iron (III) chloride $FeCl_3$ with the addition of ammonium hydroxide $NH_3 \cdot H_2O$) and subsequent thermal annealing (in an air atmosphere at a temperature of 600°C for 1 hour). Using the method of Mossbauer spectroscopy, it was found that with an increase in the radiation dose, the relative proportion of locally inhomogeneous regions decreases (the relative intensity *I* of the corresponding subspectrum decreases from 9.7 ± 0.8 % to 0.6 ± 0.6 %) (Fig. 1), while locally homogeneous regions of the studied α-Fe_2O_3 nanoparticles improve their crystal and magnetic structure – stresses are removed, and hence lattice deformations, exchange interactions are enhanced (the hyperfine magnetic field of the hematite spectrum increases from 514 kOe to 516 kOe, and the width of the external resonance lines decreases by ~0.02 mm/s). Using X-ray diffraction analysis, it was found that an increase in the radiation dose leads to a decrease in the density of oxygen vacancies and an ordering of the crystal structure, which is accompanied by a decrease in the parameters (*a* and *c*) and, accordingly, the volume of the unit cell, as well as the ratio of the parameters *c*/*a* and an increase in the average size of the crystallites *d* (Fig. 1).

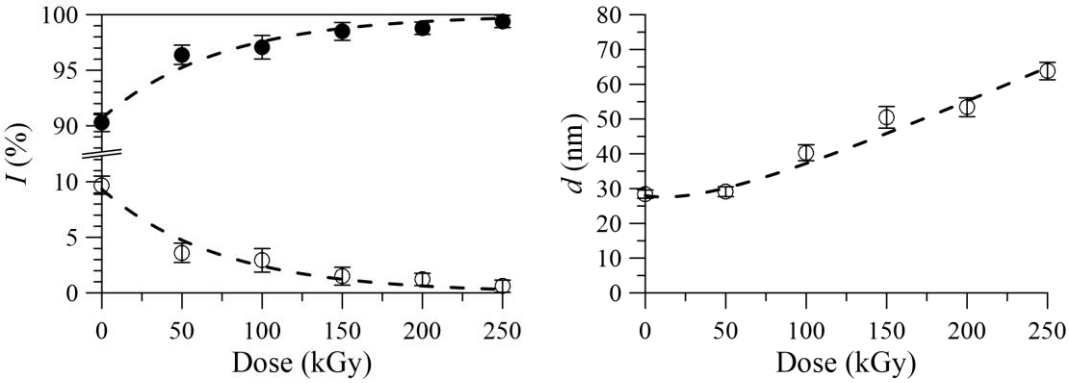


Fig. 1. Changes in the relative intensities *I* of the subspectra of locally inhomogeneous (open circles) and locally homogeneous (filled circles) regions of nanoparticles, as well as the average crystallite size *d* as a result of electron irradiation.

The report also presents the results of charge/discharge resource tests, which demonstrate that irradiation with a dose of 150 kGy and above leads not only to a decrease in the value of the specific capacity during the casting process, but also to less capacity losses in the case of an

increase in the charge/discharge rate, which indicates an increase in the resistance of nanoparticles to degradation that occurs in the process of resource testing, as well as an increase in their conductive characteristics [1].

[1] M.V. Zdorovets, A.L. Kozlovskiy, M.S. Fadeev, K.B. Egizbek, V.S. Rusakov, T.V. Gubaidulina, K.K. Kadyrzhanov // Ceramics International vol. 46, Issue 9, Pages 13580-13587 (2020).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА НАНОЧАСТИЦЫ α-Fe_2O_3

М.С. Фадеев[1*], А.Л. Козловский[2], В.С. Русаков[1], К.К. Кадыржанов[2]

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*
[2]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан (Казахстан)*
[*]*e-mail: superxerox@yandex.ru*

При химическом синтезе железосодержащих оксидных наночастиц и последующем термическом отжиге в большинстве случаев возникает большое количество вакансионных и дислокационных дефектов, негативно влияющих на степень совершенства кристаллической структуры. Дополнительный тепловой нагрев приводит к значительному увеличению размеров наночастиц за счет их спекания и агломерации. Поэтому для уменьшения деформаций в структуре необходимо использовать другие методы отжига дефектов, такие как ионизирующее излучение. В свою очередь, интерес к наночастицам гематита α-Fe_2O_3 обусловлен их потенциалом применимости в качестве катализаторов, а также катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов, для которых уменьшение концентрации дефектов в исходном материале и увеличение степени кристалличности могут значительно увеличить время эксплуатации.

В докладе представлены результаты исследования методами мессбауэровской спектроскопии с привлечением данных порошковой рентгеновской дифрактометрии и сканирующей электронной микроскопии влияния электронного облучения (с энергией 5 МэВ и дозами до 250 кГр) на свойства наночастиц α-Fe_2O_3, полученных в результате химического синтеза (соосаждения смеси хлорида железа (II) $FeCl_2$ и хлорида железа (III) $FeCl_3$ с добавлением гидроксида аммония $NH_3 \cdot H_2O$) и последующего термического отжига (в воздушной атмосфере при температуре 600°C в течение 1 часа). С помощью метода мессбауэровской спектроскопии установлено, что при увеличении дозы облучения относительная доля локально неоднородных областей уменьшается (относительная интенсивность I соответствующего парциального спектра уменьшается с 9.7 ± 0.8 % до 0.6 ± 0.6 %) (Рис. 1), при этом локально однородные области исследуемых наночастиц α-Fe_2O_3 улучшают свою кристаллическую и магнитную структуру – снимаются напряжения, а значит и деформации решетки, усиливаются обменные взаимодействия (сверхтонкое магнитное поле спектра гематита увеличивается с 514 кЭ до 516 кЭ, а ширины внешних резонансных линий уменьшается на ~0.02 мм/с). Методами рентгеноструктурного анализа установлено, что увеличение дозы облучения приводит к уменьшению плотности кислородных вакансий и упорядочению кристаллической структуры, которое сопровождается уменьшением параметров (a и c) и соответственно объема элементарной ячейки, а также величины отношения параметров c/a и увеличением среднего размера кристаллитов d (Рис. 1).

В докладе приводятся также результаты заряд/разрядных ресурсных испытаний, которые демонстрируют, что облучение дозой от 150 кГр и выше приводит не только к сохранению величины удельной емкости в процессе литирования, но и к меньшим потерям емкости в случае увеличения скорости заряда/разряда, что свидетельствует о повышении устойчивости наночастиц к деградации, возникающей в процессе ресурсных испытаний, а также об увеличении их проводящих характеристик [1].

STUDY OF THE EFFECT OF DOPING Au, Gd, Nd ON THE MAGNETIC AND HYPERTHERMAL PROPERTIES OF Fe_3O_4 NANOCOMPOSITES

A.L. Kozlovskiy[1*], K. Egizbek[1], M.S. Fadeev[2], V.S. Rusakov[2], K.K. Kadyrzhanov[1]

[1] *LN Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan (Kazakhstan)*
[2] *Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)*
[*]*e-mail: artem88sddt@mail.ru*

One of the important areas of research in the field of application of magnetic nanoparticles in modern materials science is hyperthermal research, the main purpose of which is to create unique materials with a high heating rate and release of a large amount of heat. In this case, one of the ways to increase the heating rate is the doping of magnetic oxide nanoparticles with elements such as gold, gadolinium, and neodymium.

The samples under study were synthesized by chemical precipitation from a mixture of iron chlorides $FeCl_2$ and $FeCl_3$, followed by mechanical mixing of the obtained Fe_3O_4 nanoparticles with AuCl, $Gd(NO_3)_3$ or Nd_2O_3 and thermal annealing in a muffle furnace at a temperature of 600°C for 5 hours. Five types of nanoparticles were chosen as objects of study: 1) initial Fe_3O_4 nanoparticles; 2) Fe_3O_4 nanoparticles annealed at 600°C; 3) Fe_3O_4 nanoparticles coated with gold and annealed at a temperature of 600°C; 4) Fe_3O_4 nanoparticles coated with Gd and annealed at a temperature of 600°C; 5) Fe3O4 nanoparticles coated with Nd and annealed at a temperature of 600°C.

The following research methods were used: scanning electron microscopy for characterization and visualization of the obtained samples of nanocomposites; energy-dispersive and X-ray phase analysis to determine the elemental and phase composition; Mössbauer spectroscopy for determining magnetic properties. The study of the effectiveness of the effect of modification of Fe_3O_4 nanoparticles by various methods on the heating rate and the change in the specific absorption rate was carried out using a variable frequency induction heating unit.

In the course of the study, it was found that the doping of Fe_3O_4 nanoparticles with gold, gadolinium, and neodymium, followed by thermal annealing at a temperature of 600°C, leads to the formation of composite structures of various phase compositions. Moreover, in the case of Fe3O4 doped with Au, structures of the α-Fe_2O_3 type are formed, covered with a shell of gold; in the case of Gd doping, a two-phase structure γ-Fe_2O_3@$GdFeO_3$ is formed; in the case of doping Fe_3O_4 nanoparticles with neodymium, the α-Fe_2O_3@$NdFeO_3$ structure is formed.

As a result of measuring the hyperthermal properties of the studied nanocomposites, the following was established: in the case of the initial Fe3O4 nanoparticles, the threshold value of the heating temperature of 42°C is reached in 200 s, which is a rather low indicator and indicates a low heat release. In the case of Fe_3O_4 nanoparticles annealed at a temperature of 600°C, which are characterized by a highly ordered hematite phase, the heating time is more than 155 s, which is somewhat better than the analogous indicators for the initial Fe3O4 nanoparticles. This behavior of decreasing the heating time to a temperature of 42°C may be due to a change in the phase composition and magnetic properties of the nanoparticles. In the case of nanocomposites, the heating time compared to the initial nanoparticles changes significantly. For α-Fe_2O_3@Au nanocomposites, the heating time was 100 sec, for γ-Fe_2O_3@Gd_2O_3 nanocomposites it was 60 sec, for α-Fe_2O_3@Nd_2O_3 nanocomposites it was 80 sec.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОПИРОВАНИЯ Au, Gd, Nd НА МАГНИТНЫЕ И ГИПЕРТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe_3O_4 НАНОКОМПОЗИТОВ

А.Л. Козловский[1*], К. Егизбек[1], М.С. Фадеев[2], В.С. Русаков[2], К.К. Кадыржанов[1]

[1]*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан (Казахстан)*
[2]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)*
[*]*e-mail: artem88sddt@mail.ru*

Одним из важных направлений исследований в области применения магнитных наночастиц в современном материаловедении является гипертермические исследования, основной целью которых является создание уникальных материалов, обладающих высокой скоростью нагрева и выделением большого количества тепла. При этом одним из способов увеличения скорости нагрева является допирование магнитных оксидных наночастиц такими элементами как золото, гадолиний и неодим.

Синтез исследуемых образцов проводился методом химического осаждения из смеси хлоридов железа $FeCl_2$ и $FeCl_3$ с последующим механическим перемешиванием полученных наночастиц Fe_3O_4 с AuCl, $Gd(NO_3)_3$ или Nd_2O_3 и термическим отжигом в муфельной печи при температуре 600°C в течение 5 часов. В качестве объектов исследования были выбраны пять типов наночастиц: 1) исходные наночастицы Fe_3O_4; 2) наночастицы Fe_3O_4, отожженные при температуре 600°C; 3) наночастицы Fe_3O_4, покрытые золотом и отожженные при температуре 600°C; 4) наночастицы Fe_3O_4, покрытые Gd и отожженные при температуре 600°C; 5) наночастицы Fe_3O_4, покрытые Nd и отожженные при температуре 600°C.

Были использованы следующие методы исследования: растровая электронная микроскопия для характеризации и визуализации полученных образцов нанокомпозитов; энергодисперсионный и рентгенофазовый анализ для определения элементного и фазового состава; мессбауэровская спектроскопия для определения магнитных свойств. Изучение эффективности влияния модификации наночастиц Fe_3O_4 различными способами на скорость нагрева и изменение величины удельной скорости поглощения проводилось с использованием установки индукционного нагрева переменной частоты.

В ходе исследования было установлено, что допирование наночастиц Fe_3O_4 золотом, гадолинием и неодимом с последующим термическим отжигом при температуре 600°C, приводит к формированию композитных структур различного фазового состава. Причем в случае Fe_3O_4, допированных Au, формируется структуры типа α-Fe_2O_3, покрытых оболочкой из золота; в случае допирования Gd формируется двухфазная структура γ-Fe_2O_3@$GdFeO_3$; в случае допирования наночастиц Fe_3O_4 неодимом формируется структура α-Fe_2O_3@$NdFeO_3$.

В результате измерения гипертермических свойств исследуемых нанокомпозитов было установлено следующее: в случае исходных наночастиц Fe_3O_4 достижение порогового значения температуры нагрева в 42°C происходит за время 200 сек, что является достаточно низким показателем и свидетельствует о малой величине тепловыделения. В случае отожженных при температуре 600°C наночастиц Fe_3O_4, для которых характерна фаза высокоупорядоченного гематита, время нагрева составляет более 155 сек, что несколько лучше аналогичных показателей для исходных наночастиц Fe_3O_4. Такое поведение снижения времени нагрева до температуры 42°C может быть обусловлено изменением фазового состава и магнитных свойств наночастиц. В случае нанокомпозитов время нагрева по сравнению с исходными наночастицами существенно изменяется. Для нанокомпозитов α-Fe_2O_3@Au время нагрева составило 100 сек, для нанокомпозитов γ-Fe_2O_3@Gd_2O_3 – 60 сек, для нанокомпозитов α-Fe_2O_3@Nd_2O_3 – 80 сек.

THICKNESS DEPENDENCE OF NEEL TEMPERATURE FOR ULTRATHIN $YFeO_3$ FILMS

V.V. Izyurov[1*], M.A. Andreeva[2], R.A. Baulin[2], A.P. Nosov[1], I.V. Gribov[1], O.A. Kondratev[3], I.A. Subbotin[3], E.M. Pashaev[3]

[1]*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics RAS, Ekaterinburg, Russia*
[2]*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, Russia*
[3]*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*
**e-mail: iziurov.1994@imp.uran.ru*

Rare-earth orthoferrites of general formula $RFeO_3$ where R = Y, Sm, Tb, were the first transparent antiferromagnets in which dynamics of domain walls was studied in details [1]. The $RFeO_3$ compounds are noncollinear antiferromagnets with weak ferromagnetism. The yttrium orthoferrite $YFeO_3$ is of particular interest since exceptionally high velocities of domain walls, reaching ≈ 20 km/s [1], were recorded for this bulk single crystal.

Ultrathin $Y^{57}FeO_3$ films were deposited on the *r*-Al_2O_3 (01-12) substrates by *rf* magnetron sputtering. The films were postannealed in air at 800°C for 2 h. The thickness and roughness of the films were recorded using the ZYGO optical profilometer. A set of samples with the thicknesses in the range from 4 to 40 nm was obtained. Typical values of the surface roughness were below 0.5 nm. Mössbauer spectra were obtained by Mössbauer reflectivity method using Synchrotron Mössbauer Source (SMS) at the ESRF ID18 beamline in the temperatures range from 3.5 K to 700 K. Mössbauer spectra were treated using the sort [2].

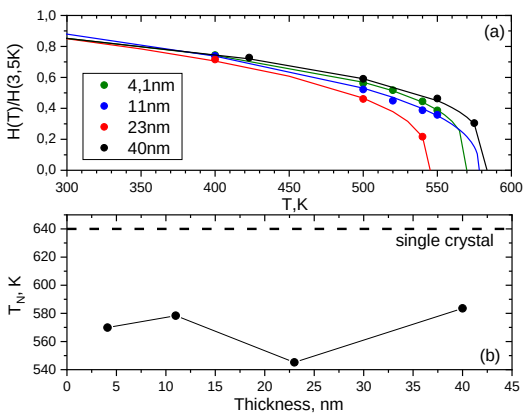


Fig. 1. (a) Temperature dependences of normalized valued of hyperfine field near the Neel temperature. Points – experimental data, lines – calculations according to formula (1). (b) Thickness dependence of Neel temperature. Dotted line - T_N value for bulk single crystal.

Figure 1 shows the temperature dependences of hyperfine fields *H(T)* normalized to the corresponding values at the temperature of *T*=3.5 K. The data are shown for the temperature range 300-600 K. These dependences can be modeled using the formula (1)

$$H(T)/H(3.5K) = D\times(1-T/T_N)^{\beta} \quad (1)$$

the validity of which was confirmed in [3] for bulk single crystals. For $YFeO_3$ bulk single crystal D = 1,16, T_N = 640 K, and β = 0,354.

From Fig.1(b) one can see that the values of T_N for thin films are substantially lower than for single crystal. These discrepancies decrease with increasing film thickness. The thickness ranges below and above 15 nm can be separated. According to the results of structural investigations growth of thin films occurs in different ways in these thickness ranges. Below 15 nm the mechanism of layer-by-layer plus island Stransky-Krastanov mode dominates, while above 15 nm growth occurs according to the layer-by-layer Frank-van der Merve mode.

The authors are grateful to the ESRF administration and personally A.I. Chumakov for performing the firsthand measurements at ID18 (HC4300 proposal) during COVID restrictions. The research was supported in part by the Ministry of Science and Higher Education of RF (No. 075-15-2021-1350 and No. 075-15-2021-1353). The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme "Function" No. 122021000035-6).

[1] V. G. Baryakhtar, B. A. Ivanov, and M. V. Chetkin, UFN 1985. V.146. P.417.
[2] http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/OurSoftware/REFTIM-1.
[3] M. Eibschutz, S. Shtrikman, and D. Treves, Phys.Rev. 1967. V.156. P.562.

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЕЛЯ ОТ ТОЛЩИНЫ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$

В.В. Изюров[1*], М.А. Андреева[2], Р.А. Баулин[2], А.П. Носов[1], И.В. Грибов[1], О.А. Кондратьев[3], И.А. Субботин[3], Э.М. Пашаев[3]

[1]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2]*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[3] *Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский Институт", Москва, Россия*
**e-mail: iziurov.1994@imp.uran.ru*

Редкоземельные ортоферриты $RFeO_3$ где R = Y, Sm, Tb, были первыми прозрачными антиферромагнетиками, в которых достаточно подробно исследовали динамику доменных границ [1]. Соединений $RFeO_3$ являются неколлинеарными антиферромагнетиками со слабым ферромагнетизмом. Особый интерес представляет ортоферрит иттрия $YFeO_3$, в объемных монокристаллах которого зафиксированы рекордно большие скорости движения доменных границ [1], достигающие ≈ 20 км/с.

Сверхтонкие пленки $YFeO_3$ на подложках *r*-Al_2O_3 (01-12) были получены методом магнетронного распыления на переменном токе. Послеростовую термообработку выполняли на воздухе при 800°C в течении 2 часов. Толщину пленок и шероховатость поверхности определяли с помощью оптического профилометра ZYGO. Была получена серия образцов с толщинами в диапазоне от 4 до 40 нм. Типичная величина шероховатости поверхности составляла 0,5 нм. Мессбауэровские спектры измерялись методом рефлектометрии с использованием синхротронного возбуждения на станции ID18 ESRF (г. Гренобль, Франция) при температурах от 3.5 K до 650 K. Обработку мессбауэровских спектров проводили с использованием программного пакета [2]

На Рис.1(а) представлены температурные зависимости значений сверхтонкого поля *H(T)*, нормированных на соответствующую величину при *T*=3.5 К, в диапазоне 300-600 К. Ход этих зависимостей может быть описан формулой

$$H(T)/H(3.5K) = D\times(1-T/T_N)^{\beta} \quad (1)$$

справедливость которой для монокристаллов иттриевого ортоферрита была подтверждена в [3]. Для монокристаллов $YFeO_3$ D = 1,16, T_N = 640 К, β = 0,354.

Из полученных данных Рис.1(в) видно, что значения T_N для пленок существенно ниже, чем для монокристалла. Эти отличия уменьшаются по мере роста толщины. Можно выделить области толщин менее и более 15 нм. Согласно результатам структурных исследований, рост пленок в этих диапазонах толщин происходит по разным механизмам: до 15 нм – по механизму послойного-плюс-островкового роста Странского–Крастанова и более 15 нм – по механизму послойного роста Франка–ван дер Мерве.

Авторы признательны администрации ESRF и персонально А.И. Чумакову за непосредственное проведение эксперимента на станции ID18 в период COVID ограничений.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (тема «Функция», №122021000035-6) и частично поддержана грантами Минобрнауки РФ (№ 075-15-2021-1350 и № 075-15-2021-1353).

Секция 3

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ИХ ПОЛУЧЕНИЯ

Section 3

PROMISING MATERIALS AND MODERN TECHNOLOGIES FOR THEIR PRODUCTION

ACTUAL PROBLEMS OF HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTIVITY AND THE ROLE OF MÖSSBAUER SPECTROSCOPY IN ITS STUDY

I.S. Lyubutin[1*], I.A. Troyan[1], A.G. Gavrilyuk[1,2]

[1]*Shubnikov Institute of Crystallography, FSRC "Crystallography and Photonics", Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*
[2]*Institute of nuclear physics, Russian Academy of Sciences, Russia*
**e-mail: lyubutinig@mail.ru*

The discovery of liquid helium by Kamerling-Onnes in 1908 marked the beginning of the history of superconductivity. In 1911, he discovered that the resistance of a mercury wire immersed in liquid helium completely disappeared at 4.2 K. This is how the phenomenon of superconductivity was discovered, and in 1913 the Nobel Prize in Physics was awarded for this. It was later found that many metals can have superconducting (SC) properties, but the transition temperatures to the SC state are very low, requiring expensive liquid helium to cool the metals.

Therefore, the long-standing dream of physicists and technologists is the creation of materials with a critical superconducting transition temperature *Tc* near room temperature. Now high-temperature superconductivity (HTSC) is one of the main challenges to the physics and chemistry of the condensed state in modern science and technology.

After the discovery of HTSC materials, such as cuprate-based oxides and later iron-based compounds, Mössbauer spectroscopy has been actively used to investigate correlations between magnetism and superconductivity in these compounds. Recently, great interest has been generated by the discovery of superconductivity in hydrogen sulfide H_2S, compressed to high pressures of ≈ 150 GPa, which has a record transition temperature of about 203 K. Initially, this was established from the results of measurements of electrical resistance [1], and then confirmed by Mössbauer measurements in a magnetic field with the isotope Sn-119 [2]. Then, at a pressure of 175 GPa, polyhydride LaH_{10} was synthesized [3], in which superconductivity with a record *Tc* = 250 K was found [4]. This greatly increased interest in metal polyhydrides.

In the works of our group, for the first time superconductors of hydrides ThH_{10} (*Tc* = 159-161 K) and ThH_9 (*Tc* = 146 K) [5], YH_6 (*Tc* = 224 K) [6], $LaYH_{10}$ (*Tc* = 253 K) [7] were synthesized and researched. We were the first to propose the use of the Mössbauer isotope Sn-119 as a magnetic field sensor in the H_3S superconductor [2]. We then found that metallic iron becomes diamagnetic at high pressures, and the Fe-57 Mössbauer isotope can be used to test the effects of the interaction of a superconductor with a magnetic field.

The report will present several examples of the use of Mössbauer spectroscopy for the study of superconductivity under conditions of high and ultrahigh pressures.

The work is carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (grant no. 22-12-00163).

[1] A.P. Drozdov *et al.* Nature **525**, 73–76 (2015).
[2] I.A. Troyan, *et al.* Science **351,** 1303 (2016).
[3] Z.M. Geballe *et al*. Angew. Chem. Int. Ed. **57**, 688 –692 (2018).
[4] A.P. Drozdov *et al*. Nature **569,** 528-531 (2019).
[5] D.V. Semenok *et al.* Materials Today **33**, 36-43 (2020).
[6] I.A. Troyan, *et al.* Advanced Materials, 2006832 (1-10) (2021).
[7] D.V. Semenok, *et al.* Materials Today **48**, 18-28 (2021).

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И РОЛЬ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ЕЁ ИССЛЕДОВАНИИ

И.С. Любутин[1*], И.А. Троян[1], А.Г. Гаврилюк [1,2]

[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова*
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
[2] *Институт ядерной физики РАН*
**e-mail: lyubutinig@mail.ru*

История сверхпроводимости началась с открытия в 1908 году Камерлингом-Оннесом жидкого гелия. В 1911 году он обнаружил, что сопротивление в ртутной проволоке, погруженной в жидкий гелий, полностью исчезло при температуре 4.2 К. Так было открыто явление сверхпроводимости, за что в 1913 году была присуждена Нобелевская премия по физике**.** Позднее было установлено, что многие металлы могут обладать сверхпроводящими (СП) свойствами, однако температуры перехода в СП состояние очень низки, что требует дорогостоящего жидкого гелия для охлаждения металлов.

Поэтому давней мечтой физиков и технологов является создание материалов с критической температурой сверхповодящего перехода *Tc* вблизи комнатной. Сейчас высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП) является одним из главных вызовов физики и химии конденсированного состояния в современной науке и технике.

После открытия ВТСП материалов оксидов на основе купратов, а затем и соединений на основе железа, мессбауэровская спектроскопия стала активно использоваться для исследования корреляций между магнетизмом и сверхпроводимостью в этих соединениях. Недавно громадный интерес вызвало открытие сверхпроводимости в сероводороде H_2S, сжатом до высоких давлений ≈ 150 ГПа, с рекордной температурой перехода около 203 К. В начале, это было установлено по результатам измерений электро-сопротивления [1], а затем подтверждено с помощью мессбауэровских измерений в магнитном поле на изотопе Sn-119 [2]. Затем, удалось синтезировать полиргидрид LaH_{10} при давлении 175 ГПа [3], в котором была обнаружена сверхпроводимость с рекордным значением *Tc* = 250 К [4], и интерес к полигидридам металлов резко возрос.

В работах нашей группы впервые синтезированы и исследованы сверхпроводники гидридов ThH_{10} (*Tc* = 159-161 К) и ThH_9 (*Tc* = 146 К) [5], YH_6 (*Tc* = 224 К [6]), $LaYH_{10}$ (*Tc* = 253 К [7]). Нами впервые было предложено использовать мессбауэровский изотоп Sn-119 в качестве сенсора магнитного поля в сверхпроводнике H_3S [2]. Затем мы обнаружили, что металлическое железо при высоких давлениях переходит в диамагнитное состояние, и мессбауэровский изотоп Fe-57 может быть использован для тестирования эффектов взаимодействия сверхпроводника с магнитным полем.

В докладе будет представлено несколько примеров использования мессбауэровской спектроскопии для исследования сверхпроводимости в условиях высоких и сверхвысоких давлений.

Работа проводится при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-12-00163).

[1] A.P. Drozdov *et al.* Nature **525**, 73–76 (2015).
[2] I.A. Troyan, *et al.* Science **351,** 1303 (2016).
[3] Z.M. Geballe *et al*. Angew. Chem. Int. Ed. **57**, 688 –692 (2018).
[4] A.P. Drozdov *et al*. Nature **569,** 528-531 (2019).
[5] D.V. Semenok *et al.* Materials Today **33**, 36-43 (2020).
[6] I.A. Troyan, *et al.* Advanced Materials, 2006832 (1-10) (2021).
[7] D.V. Semenok, *et al.* Materials Today **48**, 18-28 (2021).

THE NEURAL NETWORK IN SOLVING PROBLEMS OF CONDENSED MATTER PHYSICS

A.K. Arzhnikov *

Institute Physical-Technical Institute, UdmFRC UB RAS, Izhevsk, Russia
**e-mail: Arzhnikof@bk.ru*

The intention that machine to make an independent decision, or to solve the simplest tasks, arose a long time ago, perhaps with the advent of mechanical machines. The beginning of the intensive development of this direction should be attributed to 1956, when several people gathered at Dartmouth College to discuss the possibility and ways of creating artificial intelligence. Subsequently, the field of science associated with machine learning (ML) has undergone several ups and downs. To date, we are witnessing a rise, which is characterized by an exponential growth in the use of ML in various fields of human activity, including in solving physical problems. So, in 2019, a review [1] appeared, in which a simple listing of works and areas of application of MO in physics contains 39 pages of formal text and more than 500 references to articles. This report discusses the principles of operation of neural networks and methods for their use in solving problems of condensed matter physics. Some examples show how to use artificial neural networks (ANN) in quantum mechanics, in correlated systems, in systems with phase transitions. Difficulties in solving quantum many-particle problems are associated with the exponentially large dimension of the Hilbert space of representation of wave functions. In numerical methods, two methods are usually used - reducing the number of wave function configurations to the most significant ones or reducing space due to the procedure for compressing the number of degrees of freedom. The first includes quantum Monte Carlo methods, the second is the representation of the wave function in the form of a matrix product or a tensor product. The failures of these approaches are due to the lack of understanding of the strategy of ways to reduce the "complexity" of systems and highlight their features. Just in these areas, ANN have significant advantages and successes. So in 2017, using ANN, a many-particle problem of quantum mechanics was solved for the first time with an accuracy that significantly exceeded the accuracy of the previously obtained solutions [2]. No less impressive examples can be given in other areas of physics (in correlated systems, in systems with phase transitions, in the search for new materials). In our work, we investigated the opportunity of ANN prediction of the behavior of short-range ordering in binary alloys and phase transition in magnetic systems depending on concentration and temperature [3–4]. At the end of the report, the fundamental properties of the ANN will be illustrated, with the help of which it is possible to obtain analogues of the Schrödinger wave equation and the equation of general relativity without resorting to quantum mechanics and the theory of gravitation [5-6].

Acknowledges support from Russian Science Foundation Project No. 22-22-00674.

[1] G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045002 (2019).
[2] Giuseppe Carleo and Matthias Troyer, *Science* **355**, 602–606 (2017).
[3] M. A. Timirgazin and A. K. Arzhnikov, *AIP Advances* **11**, 015027 (2021).
[4] M. A. Timirgazin and A. K. Arzhnikov, *Xiv.org _cond-mat _arXiv:2101.08089* (2021).
[5] V. Vanchurin, *Xiv.org _cond-mat _arXiv:2004.09280v4* (2021).
[6] V. Vanchurin, *Entropy* **22**, 1210 (2020).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

А.К. Аржников*

Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
**e-mail: Arzhnikof@bk.ru*

Идея обучения машины для самостоятельного принятия решения, либо для решения простейших задач возникла достаточно давно, возможно, с возникновением механических машин. Начало интенсивного развития этого направления следует отнести к 1956 году, когда в Дартмутском колледже собрались несколько человек, чтобы обсудить возможность и пути создания искусственного интеллекта. Впоследствии область науки, связанная с машинным обучением (МО), претерпела несколько спадов и подъёмов. К настоящему времени, мы наблюдаем подъем, который характеризуется экспоненциальным ростом использования МО в самых различных областях деятельности человека, в том числе, и в решении физических задач. Так, в 2019 году появился обзор [1], в котором простое перечисление работ и направлений использования МО в физике содержит 39 страниц формального текста и более 500 ссылок на статьи. В данном докладе рассматриваются принципы работы нейронных сетей и методы их использования в решении задач физики конденсированного состояния. На конкретных примерах демонстрируются способы применения искусственных нейронных сетей (ИНС) в квантовой механике, в коррелированных системах, в системах с фазовыми переходами. Трудности решение квантовых многочастичных задач связаны с экспоненциально большой размерностью гильбертова пространства представления волновых функций. В численных методах обычно используют два приема - сокращения числа конфигураций волновой функции до наиболее значимых или сокращение пространства за счет процедуры сжатия числа степеней свободы. К первому относятся методы квантового Монте-Карло, ко второму представление волновой функции в виде матричного произведения либо тензорного произведения. Неудачи этих подходов связаны с отсутствием понимания стратегии путей уменьшения «сложности» систем и выделения их особенностей. Как раз в этих направления ИНС имеют серьезные преимущества и успехи. Так в 2017 году с помощью ИНС была впервые решена многочастичная задача квантовой механики с точностью, которая существенно превышала точность полученных ранее решений [2]. Не менее впечатляющие примеры можно привести и в других областях физики (в коррелированных системах, в системах с фазовыми переходами, в поиске новых материалов). В наших работах мы исследовали возможности предсказания ИНС поведения ближнего упорядочения в бинарных сплавах и фазового перехода в магнитных системах в зависимости от концентрации и температуры [3-4]. В конце доклада будут проиллюстрированы фундаментальные свойства ИНС, с помощью которых можно получить аналоги волнового уравнения Шредингера и уравнения общей теории относительности, не прибегая к квантовой механике и теории гравитации [5-6].

Работа поддержана грантом РНФ № 22-22-00674.

CRITICAL REDISTRIBUTION OF ATOMS IN THE IRON ALLOYS UNDER SEVERE PLASTIC DEFORMATION

V.A. Shabashov*

M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

A narrow temperature range of changes in the direction of atomic redistribution in the form of a change in the sign of short-range ordering, dissolution and precipitation of the second phases in steels and iron alloys under conditions of severe plastic deformation (SPD) was found, Fig 1. The critical range in the mechanism and kinetics of phase transitions is also manifested in the abnormal behavior of mechanical properties [1–4].

A high pressure torsion in Bridgman anvils was used as the main method of SPD, along with practically important grinding in ball mills and friction action. High pressure torsion allows controlling the degree, speed and temperature of the deformation effect. At the local level of the nearest atomic neighbors (one or two coordination shells of ^{57}Fe atoms), atomic mass transfer caused by the generation of a large number of point defects of deformation origin was investigated and compared with irradiation with high-energy particles. The change in the direction of phase transformations and the anomalous acceleration of the ordering and precipitation of dispersed phases with a change in temperature (T < 0.3 Tmelt) and the deformation rate (from $2\cdot10^{-2}$ to $8\cdot10^{-2}$ s^{-1}) are established. The possibility of an ultrafine structure regulating with solid-solution hardening and dispersion hardening is shown.

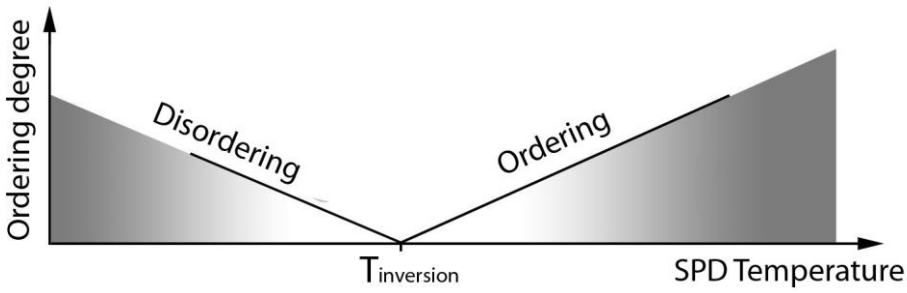


Fig. 1. The scheme of changing in the type of atomic ordering depending on SPD temperature.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Structure” No. 122021000033-2).

[1] V.A. Shabashov, V.V. Sagaradze, K.A. Kozlov and Yu. Ustyugov, *Metals* **8**, 995 (2018).
[2] K.A. Kozlov, V.A. Shabashov, A.E. Zamatovskii, E.G. Novikov and Yu. Ustyugov, *Metals* **10**, 659 (2020).
[3] V.A. Shabashov, K.A. Kozlov, Yu. Ustyugov, A.E. Zamatovskii, T.P Tolmachev and E.G. Novikov, *Metals* **10**, 725 (2020).
[4] V.A. Shabashov, K.A. Lyashkov, K.A. Kozlov, V.A. Zavalishin, A.E. Zamatovskii, N.V. Kataeva, V.V. Sagaradze and Yu. Ustyugov, *Materials* **14**, 7116 (2021).

КРИТИЧЕСКОЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ СВЕРХВЫСОКОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В.А. Шабашов*

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

В сталях и сплавах железа в условиях сверхвысокой пластической деформации (СВПД) обнаружена узкая температурная область смены направления атомного перераспределения в виде смены знака ближнего упорядочения, растворения и выделения вторых фаз, рис. 1. Критическая область в механизме и кинетике фазовых переходов проявляется также в аномальном поведении механических свойств [1–4].

В качестве основного метода большой пластической деформации наряду с практически важными помолом в шаровых мельницах и фрикционным воздействием использован сдвиг под давлением в наковальнях Бриджмена, позволяющий контролировать степень, скорость и температуру деформационного воздействия. На локальном уровне ближайших атомных соседств (одной – двух координационных сфер относительно железа) исследован атомный массоперенос, обусловленный генерацией большого количества точечных дефектов деформационного происхождения и проведено сопоставление с облучением высокоэнергетическими частицами. Установлено изменение направления фазовых переходов и аномальное ускорение упорядочения и выделения дисперсных фаз при изменении температуры (T < 0.3 $T_{пл}$) и скорости деформации (от $2\cdot10^{-2}$ до $8\cdot10^{-2}$ $с^{-1}$) и показана возможность регулирования ультрамелкозеренной структуры с твердорастворным упрочнением и дисперсионным твердением.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Структура» № 122021000033-2).

MÖSSBAUER STUDY OF PHASE TRANSFORMATIONS IN THE IRON-BASED Fe–Mn ALLOYS UNDER SIMILAR CONDITIONS OF HEATING WITH A 15-keV ACCELERATED Ar^+ ION BEAM AND AN IR HEATER

V.V. Ovchinnikov[1*], E.V. Makarov[1], V.A. Semionkin[1], N.V. Gushchina[1]

[1]*Institute of Electrophysics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia*
**e-mail: viae05@rambler.ru*

The aim of the work is to study the effect of ion bombardment on the structure and phase state of metastable binary iron-based alloys. The objects of the investigation were a Fe–6.35 at % Mn alloy deformed by cold working and a Fe–7.25 at % Mn alloy deformed by severe plastic deformation (SPD), namely, high pressure torsion (at P = 8 GPa, 3 revolutions).

Ar^+ ion irradiation at ion energies of 15 keV was performed using an ILM-1 ion beam implanter equipped with a PULSAR-1M ion source based on a low-pressure glow discharge with a hollow cold cathode [1]. The Mössbauer study of the initial, irradiated, and IR-heated samples was performed using an SM-2201 automated Mössbauer spectrometer under constant acceleration conditions. Isotope ^{57}Co in Ro served as the source of γ quanta.

Analysis of the Mössbauer spectrum of the initial cold-worked-disordered Fe–6.35 at % Mn sample indicates that the alloy is single-phase and contains 100% α ferrite. Mössbauer spectra taken for the samples irradiated with argon ions at E = 15 keV and fluences of $2.5\cdot10^{15}$ cm^{-2}, $3.1\cdot10^{15}$ cm^{-2}, and $4.4\cdot10^{15}$ cm^{-2} (irradiation time of 4, 5, 7 s, and heating temperature of 311, 379, 449°C, respectively) show a singlet with a small area in their central part. Its isomeric shift with respect to pure iron for all tree spectra is about –0.08 mm/s, which is in a good agreement with austenitic shift. Evaluation of the Mn concentration values in α-solid solution and in the γ-phase showed that during irradiation, the formation of a manganese-depleted α-phase and a repeatedly manganese-enriched γ-phase occurs (from 23.8 to 38.0 at. %). Heating of samples using models that accurately reproduce the temperature change of samples during their ion irradiation, does not lead to the formation of austenite.

Similar results were obtained in a Mössbauer study of the effect of accelerated Ar^+ ion beams (E = 15 keV, F = of $3.75\cdot10^{15}$ cm^{-2}, $T \leq 280$°C) on a Fe–7.25 at % Mn alloy after SPD. Data obtained show that irradiation of the above alloy at an abnormally low temperature of 280°C results in the transformation of a supersaturated α solid solution into a two-phase α + γ state and the precipitation of highly-enriched γ phase (austenite) with 38.4 at % Mn) and the formation of depleted α solid solution with 5.73 at % Mn.

The Mn concentrations obtained in the α and γ phases for the Fe–6.35 at % Mn and Fe–7.25 at % Mn alloys are in good agreement with the extrapolation of the limit solubility lines of the equilibrium phase diagram [2] of this alloy in the low temperature region (below 400°C). This indicates a complete "instantaneous" radiation annealing of the alloys. As an explanation for the multiple increase in the low-temperature mobility of atoms, we put forward the phenomenon of cascade radiative shaking of the medium by post-cascade waves [3, 4].

The research was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (project No. 19-79-20173). The authors express their deep gratitude to V.A. Shabashov for measuring the Mössbauer spectra and calculating the distributions of hyperfine magnetic fields of the materials under study, as well as V.P. Pilyugin for ensuring the processing of samples by SPD.

[1] N.V. Gavrilov, G.A. Mesyats, S.P. Nikulin, G.V. Radkovskii, A. Elkind, A.J. Perry, J.R. Treglio, J. Vac. Sci. Technol., A **14** 1050–1055 (1996).
[2] O.A. Bannykh, P.B. Budberg, S.P. Alisova, Phase diagrams of the state of binary and multicomponent systems based on iron, Metallurgy, Moscow (1986) [in Russian].
[3] V.V. Ovchinnikov, Surface and Coating Technology, **355**, 65–83 (2018).
[4] V.V. Ovchinnikov, Journal of Physics: Conference Series, **1115**, 032046 (2018).

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БОГАТЫХ ЖЕЛЕЗОМ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Fe-Mn В АНАЛОГИЧНЫХ УСЛОВИЯХ НАГРЕВА ПУЧКОМ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ Ar^+ ЭНЕРГИЕЙ 15 кэВ И БЕСКОНТАКТНЫМ НАГРЕВАТЕЛЕМ

В.В. Овчинников[1*], Е.В. Макаров[1], В.А. Семенкин[1], Н.В. Гущина[1]

[1]*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: viae05@rambler.ru*

Целью настоящей работы являлось изучение влияния ионной бомбардировки на структурно-фазовое состояние метастабильных бинарных сплавов на основе железа. Объектами исследования являлись два сплава: Fe–6,35 ат. % Mn после холодной пластической деформации и сплав Fe–7,25 ат. % Mn после интенсивной пластической деформации (ИПД) кручением под давлением (P = 8 ГПа, 3 оборота).

Облучение образцов ионами Ar^+ с энергией 15 кэВ осуществлялось на ионном имплантере ИЛМ-1, оснащенном ионным источником «ПУЛЬСАР-1М» на основе тлеющего разряда низкого давления с холодным полым катодом [1]. Съемка мессбауэровских спектров была проведена на автоматическом ЯГР спектрометре СМ-2201 в режиме постоянного ускорения. Источником γ-квантов служил изотоп ^{57}Co в Ro.

Анализ мессбауэровского спектра исходного разупорядоченного холодной прокаткой образца сплава Fe–6,35 ат. % Mn свидетельствует о том, что сплав является однофазным и содержит 100 % α-феррита. Мессбауэровские спектры, снятые с образцов после облучения ионами аргона с энергией E = 15 кэВ флюенсами $2{,}5\cdot10^{15}$ см$^{-2}$, $3{,}1\cdot10^{15}$ см$^{-2}$ и $4{,}4\cdot10^{15}$ см$^{-2}$ (соответствующее время облучения 4, 5 и 7 с) при нагреве образцов ионным пучком до температур 311, 379 и 449°С, демонстрируют наличие в их центральной части синглета малой площади. Его изомерный сдвиг по отношению к чистому железу для всех трех спектров составляет порядка –0,08 мм/с, что хорошо соответствует сдвигу аустенита. Оценка значений концентрации Mn в α-твердом растворе и в γ-фазе показала, что при облучении происходит образование обедненной марганцем α-фазы и многократно обогащенной марганцем γ-фазы (от 23,8 до 38,0 ат. %). Нагрев образцов с использованием режимов, точно воспроизводящих изменение температуры образцов в ходе их ионного облучения, не приводит к образованию аустенита.

Аналогичные результаты получены при мессбауэровском исследовании воздействия ионов Ar^+ (E=15 кэВ, F = $3{,}75\cdot10^{15}$ см$^{-2}$, T ≤ 280°С) на сплав Fe–7,25 ат. % Mn после ИПД. Облучение указанного сплава приводит при аномально низкой температуре 280°С к преобразованию пересыщенного α-твердого раствора в двухфазное α + γ-состояние с выделением высокообогащенной γ-фазой с 38,4 ат. % Mn и формированием обедненного α-твердого раствора с 5,73 ат. % Mn.

Полученные значения концентраций Mn в α- и γ-фазах для сплавов Fe–6,35 ат. % Mn и Fe–7,25 ат. % Mn находятся в хорошем согласии с экстраполяцией линий предельной растворимости равновесной фазовой диаграммы [2] этого сплава в область низких температур (ниже 400°С). Это говорит о полноценном «мгновенном» радиационном отжиге рассматриваемых сплавов. В качестве причины многократного увеличения низкотемпературной подвижности атомов мы выдвигаем явление каскадной радиационной тряски среды посткаскадными волнами [3, 4].

Исследование проведено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-20173). Авторы выражают глубокую благодарность В.А. Шабашову за измерение мессбауэровских спектров и расчет распределений сверхтонких магнитных полей исследуемых материалов, а также Пилюгину В.П. за обеспечение обработки образцов интенсивной пластической деформацией.

SOME ASPECTS OF THE SYNTHESIS OF THE Fe-Al-Sn INTERMETALLIC COMPOUND FROM MATERIALS PRODUCED BY MECHANICAL ALLOYING

E.V. Voronina[1*], A.G. Ivanova[1], A.F.Abdullin[1], A.E. Denisov[2], A.K. Arzhnikov[3]

[1]*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan, Russia*
[2]*Kazan National Research Technological University, Kazan, Russia*
[3]*UdmFRC UrB RAS, Izhevsk, Russia*
**e-mail: Elena.Voronina@kpfu.ru*

Fe-Al – based alloys fall into the category of technically important materials due to a set of good operational characteristics. Fe-Al–based intermetallics are promising as engineered materials to be used in high-temperature and hostile environments [1,2]. Improvement in mechanical properties can be achieved by controlling the composition and formed microstructure. Many experiments show that the introduction of some additives into these alloys improves their physical properties [4,5]. Although Sn belongs to nonstandard alloying elements, additional alloying with tin noticeably improves machining when cutting with a steel tool [6], and the strength and ductility of a certain compounds [7]. It is important to understand the effect of the admixtures on structure formation and functional properties of these materials.

The $Fe_{65}Al_{30}Sn_5$ composition sample was synthesized from elemental constituents using mechanical alloying and then annealed at 400 °C, 500 °C, and 800 °C. The structure and phase composition of the as-milled sample and the samples after heat treatment were investigated using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), Auger spectroscopy (AES), ^{57}Fe and ^{119m}Sn Mössbauer spectroscopy.

X-ray diffraction showed that the mechanically alloyed sample is nanocrystalline A2 Fe(Al,Sn) solid solution. SEM and AES research indicated uniform constituent distribution throughout the powder particles. ^{57}Fe Mössbauer measurements determined the chemical composition of the dominant phase of a mechanically alloyed sample. ^{119m}Sn Mössbauer study and differential scanning calorimetry measurements confirmed that a ternary *bcc* solid solution was formed by mechanical alloying.

XRD, SEM, ^{57}Fe and ^{119m}Sn Mössbauer studies of the annealed samples revealed the heterogeneous structure and chemical composition of the materials. The predominant phase (up to 80 pct) in all samples was the B2 ordered $Fe_{65}Al_{30}Sn_x$ phase, in which x_{Sn} content was no higher 0.6-0.7 at. pct. The annealed samples contained the binary phases $FeSn_2$ and FeSn as well.

We calculated the formation energy to evaluate the phase stability for ternary Fe-Al-Sn system of a certain composition. Calculations were performed using the full-potential linearized augmented plane wave (FP LAPW) technique contained in the WIEN2k software package [8]. Compared to other Fe-Al based compounds, the Fe-Al-Sn are the least stable and their formation is energetically unfavorable. The mixture of Fe-Al and $FeSn_2$ phases reduces the total energy of the Fe-Al-Sn system. The results of theoretical study describe adequately the main experimental features of the synthesis of ternary compound from solid solution preliminary prepared by mechanical alloying.

[1] D.G. Morris (ed.), Intermetallics, Special Iss. **13**, 1255-1342 (2005).
[2]. M. Krasnowski, A. Grabias, and T. Kulik, J. Alloys Compd. **424,** 119–127 (2006).
[3] M.M. Rico, J.M. Greneche, and G.A. Perrez Alcarzar, J. Alloys Compd. **398**, 26–32 (2005).
[4] C. Bormio-Nunes and O. Hubert, JMMM **393**, 404–418 (2015).
[5] J.B. Restorff, M. Wun-Fogle, A.E. Clark et al, J. Appl. Phys. **91**, 8225–8227 (2002).
[6] L. Liu, L.J. He, J.G. Qi et al, J. Alloys Compd. **654**, 327–332 (2016).
[7] M.S. Nikitin and A.V. Ryabov, Bull. South Ural State Univ. **15**, 102–104 (2012).
[8] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran and L. D. Marks, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, (2018).

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ Fe-Al-Sn ИЗ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МЕХАНИЧЕСКОГО СПЛАВЛЕНИЯ

Е.В. Воронина[1*], А.Г. Иванова[1], А.Ф.Абдуллин[1], А.Е. Денисов[2], А.К. Аржников[3]

[1]*Институт физики, КФУ, Казань, Россия*
[2]*КНИТУ-КХТИ, Казань, Россия*
[3] *ФГБУН УдмФИЦ УрО РАН*
**e-mail: Elena.Voronina@kpfu.ru*

Сплавы на основе Fe-Al относятся к категории технически важных материалов благодаря комплексу высоких эксплуатационных характеристик. Интерметаллиды на основе Fe-Al перспективны как конструкционные материалы для использования в высокотемпературных и агрессивных средах [1,2]. Улучшение механических свойств может быть достигнуто путем регулирования состава и формируемой микроструктуры. Многие эксперименты показывают, что введение в эти сплавы некоторых добавок улучшает их физические свойства [4,5]. Хотя олово относится к нестандартным легирующим элементам, дополнительное легирование оловом заметно улучшает механическую обработку при резании стальным инструментом [6], а также прочность и пластичность некоторых соединений [7]. Весьма важно понимать влияние добавок на структурообразование и функциональные свойства этих материалов.

Образец состава $Fe_{65}Al_{30}Sn_5$ был синтезирован из элементарных компонентов методом механического сплавления и отожжен при 400, 500 и 800 °С. Структуру и фазовый состав исходного образца и образцов после термообработки исследовали методами рентгеновской дифракции (РФА), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), оже-спектроскопии (ОЭС), мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe и ^{119m}Sn.

Рентгеноструктурный анализ показал, что механосплавленный образец представляет собой нанокристаллический A2 Fe(Al,Sn) твердый раствор. СЭМ и ОЭС исследования свидетельствовали о равномерном распределении компонентов по частицам порошка. Из мессбауэровских спектров на ядре ^{57}Fe был определен химический состав преобладающей фазы механосинтезированного образца. Мессбауэровские исследования на ядре ^{119m}Sn и измерения методом дифференциальной сканирующей калориметрии подтвердили образование тройного ОЦК твердого раствора в результате механического сплавления.

Рентгеноструктурные, СЭМ и мессбауэровские исследования на ядрах ^{57}Fe и ^{119m}Sn отожженных образцов выявили гетерогенную структуру и химический состав материалов. Преобладающей фазой (до 80%) во всех образцах была упорядоченная B2 фаза $Fe_{65}Al_{30}Sn_x$, в которой содержание x_{Sn} не превышало 0.6–0.7 ат. %. Образцы после отжигов содержали также двойные фазы $FeSn_2$, FeSn.

Для оценки фазовой устойчивости тройной системы Fe-Al-Sn определенного состава была рассчитана энергия образования. Расчеты проводились с использованием полнопотенциального метода линеаризованных присоединенных плоских волн (FP LAPW), реализованного в пакете программ WIEN2k [8]. По сравнению с другими соединениями на основе Fe-Al соединения Fe-Al-Sn наименее стабильны, и их образование энергетически невыгодно. Смесь фаз Fe-Al и $FeSn_2$ снижает общую энергию системы Fe-Al-Sn. Результаты теоретического исследования адекватно описывают основные экспериментальные особенности синтеза тройного соединения из предварительно приготовленного механическим сплавлением твердого раствора.

MOSSBAUER STUDY OF MAGNETIC STRUCTURE FORMATION IN YTTRIUM FERRITE GARNET PARTICLES IN DIFFERENT REGIMES OF COMBUSTION SYNTHESIS

T.Yu. Kiseleva[1*], V.S. Rusakov[1], R. Abbas[2], E.V. Lazareva[1], P. Yu. Tyapkin[3], K. Martinson[4], D. Sangaa[5], V.I. Popkov[5]

[1]*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[2]*Saint Petersburg State Institute of Technology, St. Petersburg, Russia*
[3]*Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Novosibirsk, Russia*
[4]*Ioffe Physical Technical Institute, St. Petersburg, Russia*
[5]*Institute of Physics and Technology, Ulaanbaatar, Mongolia*
**e-mail: Kiseleva.tyu@physics.msu.ru*

The currently increased interest in the study of submicron and nanosized ferrite particles is associated with their applications in the field of biotechnology, both independently and as components of composite functional systems. In [1-2], submicron particles of yttrium iron ferrite were analyzed as a material for magnetothermy and ablation of pathogenic cells. Despite controversal data on toxicity and biocompatibility, the particles showed a high potential for heat generation ability in an alternating magnetic field of clinically available parameters. The mechanisms of heating of submicron particles of the $Y_3Fe_5O_{12}$ composition can be caused by various factors, among which are the features of the crystal and magnetic structures, size effects, and the purity of the phase composition. To reveal the factors influencing the functional properties of the particles, the synthesis of ferrite particles with a garnet structure of different sizes, pure in composition, was carried out in combustion modes on organic fuel according to the procedure [3].

In this work, the formation of the crystal and magnetic structure of $Y_3Fe_5O_{12}$ particles was studied by Mössbauer spectroscopy. The analysis of hyperfine interactions in the synthesized particles was carried out within the framework of the full Hamiltonian model in the presence of large quadrupole interaction constants for all crystallographically and magnetically nonequivalent positions of Fe atoms both in the volume and on the surface of the particles (Fig. 1). The model interpretation of the spectra made it possible to reveal that the nonequilibrium conditions for the synthesis of particles lead to features in the formation of their structure. It has been established that, in the synthesis regimes used, the structure of garnet particles is improved through the predominant ordering of the sublattice with an octahedral environment, culminating in the structural ordering of the tetrahedral sublattice. The growth of particles with an increase in the combustion temperature is accompanied by a decrease in structurally and magnetically disordered surface regions, as well as a decrease in the lattice distortions of the volume of the particle. An analysis of changes in the hyperfine interaction parameters made it possible to reveal the effects of the formation of structural defects, the concentration and type of which, according to the calculations performed by the electron density functional theory (DFT) methods, affects the total magnetic moment of particles.

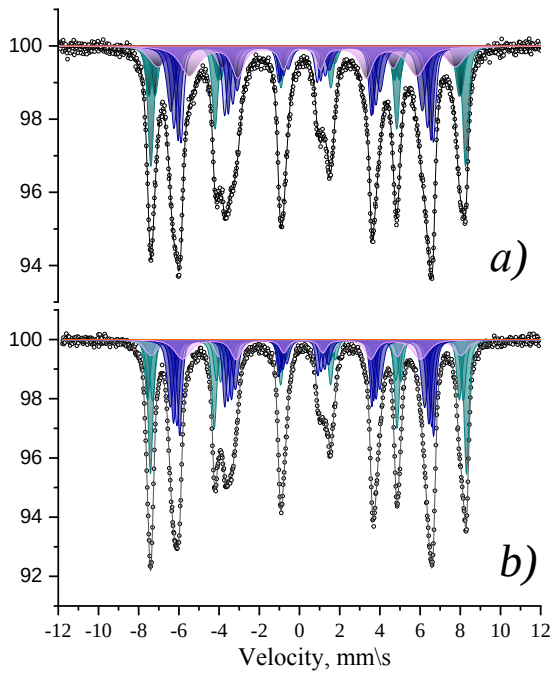


Fig. 1 Mossbauer spectra of YIG particles synthesized at different temperature of combustion

Authors greatly acknowledge RFBR 19-52-44003 Joint project for Mossbauer measurements supporting and Moscow University Program of development for equipment support.

[1] Hirazawa H. et al J. Ceram. Soc. Jpn. 129, (2021).
[2] Kiseleva T.Yu., Kostenko O.V. et al. J. Struct. Chem. 63, (2022)
[3] Martinson K.D., Popkov V.I. et al. J. Rare Earth 40(2), (2022)

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЧАСТИЦ ИТТРИЕВОГО ФЕРРИТА ГРАНАТА В РЕЖИМАХ ГОРЕНИЯ

Т.Ю. Киселева[1*] В.С. Русаков[1], Р. Аббас[2], Е.В. Лазарева[1], П.Ю. Тяпкин[4], К.Д. Мартинсон[3], Д. Санга[5], В.И. Попков[3]

[1] *Московский государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский технологический институт, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Физико-технический институт имени Иоффе, Санкт-Петербург, Россия*
[4]*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия*
[5]*Институт физики и технологии Монгольской академии наук, Улан-Батор, Монголия*
**e-mail: Kiseleva.tyu@physics.msu.ru*

Возросший в настоящее время интерес к исследованию субмикронных и наноразмерных частиц ферритов связан с их применениями в сфере биотехнологий как самостоятельно, так и в качестве компонентов композитных функциональных систем. В работах [1-2] проведен анализ субмикронных частиц железо-иттриевого феррита в качестве материала для магнитотермии и абляции патогенных клеток. Несмотря на противоречивые сведения о токсичности и биосовместимости, частицы показали высокий потенциал разогрева в переменном магнитном поле клинически доступных параметров. Механизмы разогрева субмикронных частиц состава $Y_3Fe_5O_{12}$ могут быть обусловлены разными факторами, среди которых особенности кристаллической и магнитной структуры, размерные эффекты, чистота фазового состава. Для выявления факторов, влияющих на функциональные свойства частиц был проведен синтез чистых по составу частиц ферритов со структурой граната разного размера в режимах горения на органическом топливе по методике [3].

В настоящей работе методом мессбауэровской спектроскопии проведено исследование формирования кристаллической и магнитной структуры $Y_3Fe_5O_{12}$ частиц. Анализ сверхтонких взаимодействий в синтезированных частицах был проведен в рамках модели полного гамильтониана при наличии больших констант квадрупольного взаимодействия для всех кристаллографически и магнитно-неэквивалентных позиций атомов Fe как в объеме, так и на поверхности частиц (Рис. 1). Модельная расшифровка спектров позволила выявить, что неравновесные условия синтеза частиц приводят к особенностям формирования их структуры. Установлено, что в используемых режимах синтеза совершенствование структуры частиц граната происходит через преимущественное упорядочение подрешетки с октаэдрическим окружением, завершающееся структурным упорядочением тетраэдрической подрешетки. Рост частиц с увеличением температуры горения сопровождается уменьшением структурно и магнитно- неупорядоченных поверхностных областей, а также уменьшением искажений решетки объема частицы. Анализ изменения параметров сверхтонкого взаимодействия позволил выявить эффекты образования дефектов структуры, концентрация и тип которых, согласно проведенным расчетам методами функционала электронной плотности (DFT), влияет на общий магнитный момент частиц.

THE EFFECT OF A HIGH-DOSE NEUTRON IRRADIATION ON THE STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN THE INDUSTRIAL STEEL EP823

K.A. Kozlov[1*], V.A. Shabashov[1], V.V. Sagaradze[1], A.E. Zamatovsky[1], V.A. Semenkin[2], A.V. Kozlov[3], V.L. Panchenko[3],

[1]*M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia*

[2]*Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N.Yeltsin», Ekaterinbur, Russia*

[3]*Research Institute of Nuclear Materials, Joint-Stock Company, Sverdlovsk region, Zarechny, Russia*

**e-mail: kozlov@imp.uran.ru*

Currently, stainless ferritic-martensitic steels are considered promising structural materials for the fast neutron nuclear reactors. This is due to the fact that steels of this class are resistant to radiation swelling. However, in the course of high-dose irradiation, steels of this composition tend to become brittle due to grain growth and precipitation of intermetallic phases as well as α′ phase precipitates.

The study of radiation-induced structural-phase transformation in industrial ferritic-martensitic steel EP823 under high-dose irradiation in the BN-600 fast neutron reactor was carried out using the methods of transmission Mossbauer spectroscopy with resonance detection and electron microscopy. Fig. 1 shows the Mossbauer spectra of EP823 steel after irradiation. It has been observed that in ferritic-martensitic steel, under the neutron irradiation with doses above 50 dpa at temperatures of 570–660 °C, the decomposition of a BCC solid solution together with the release of the alloying elements chromium, molybdenum, and carbon from the metal matrix occurs. This leads to a decrease in the effective chromium concentration in the ferritic matrix and the formation of an intermetallic χ-phase and carbides of the $Me_{23}C_6$ type, see Fig. 1 and Table 1. The formation of the χ -phase is confirmed by electron microscopy data.

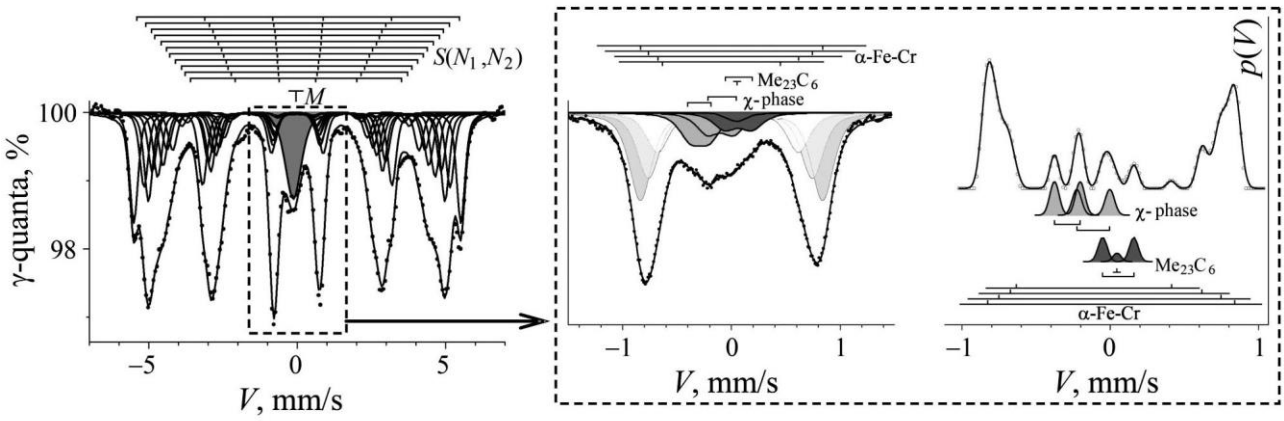


Fig. 1. The Mössbauer spectra and $p(V)$ distribution of the central singlet, for the steel EP823 after neutron irradiation to a dose of D ~ 75 dpa at $T_{irr.}$ ~ 600 °C. Individual sextets $S(N_1,N_2)$ and the central singlet M as well as simulation and calculation of the central part of the Mössbauer spectrum and $p(V)$ distribution for the steel are indicated.

It is shown that the degree of chromium escape from steel metal matrix and the volume (fraction) of formed intermetallic χ phase are determined by the dose of irradiation. A comparison of results of an irradiation in a fast-neutron reactor and those of long-term thermal annealing of the EP823 steel testifies to the realization of considerably more intense radiation-induced processes of solid solution decomposition.

Table 1. Effective chromium concentration in the α-phase and the number of χ and $M_{23}C_6$ phases in EP823 steel.

Treatment	Chromium concentration in the α-phase, at.%	Fraction of phases χ and $M_{23}C_6$, vol.%
As-received	14.3	0.9
Dose of D ~ 75 dpa, T_{irr} = 600 °C	11.8	6.7

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Structure” No. 122021000033-2).

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОДОЗНОГО НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНО ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ИНДУСТРИАЛЬНОЙ СТАЛИ ЭП823

К.А. Козлов[1*], В.А. Шабашов[1], В.В. Сагарадзе[1], А.Е. Заматовский[1], В.А. Семенкин[2], А.В. Козлов[3], В.Л. Панченко[3]

[1]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2]*Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
[3]*АО Институт реакторных материалов, Свердловская обл., Заречный, Россия*
**e-mail: kozlov@imp.uran.ru*

В настоящее время нержавеющие ферритно-мартенситные стали рассматриваются в качестве перспективных конструкционных материалов ядерных реакторов на быстрых нейтронах. Это связано с тем, что стали этого класса устойчивы к радиационному распуханию. Однако в процессе облучения стали этого состава подвержены охрупчиванию вследствие роста зерен, выделения интреметаллидных фаз и α′ выделений.

В работе методами трансмиссионной мессбауэровской спектроскопии с резонансным детектированием и электронной микроскопии выполнено исследование радиационно-индуцированных структурно-фазовых переходов в индустриальной стали ЭП823 при высокодозном облучении в реакторе на быстрых нейтронах БН-600. На рис. 1 приведены мессбауэровские спектры стали ЭП823 после облучения. Показано, что в ферритно-мартенситной стали после облучения с дозами выше 50 сна при температурах 570–660 °C происходит распад твердого раствора с ОЦК структурой и выходом элементов легирования – хрома, молибдена и углерода из металлической матрицы. Это приводит к уменьшению эффективной концентрации хрома в ферритной матрице и образованию интерметаллидной χ-фазы и карбидов типа $Me_{23}C_6$, см. рис. 1 и табл. 1. Формирование χ-фазы подтверждается данными электронной микроскопии.

Установлено, что степень выхода элементов легирования хрома из металлической матрицы стали и объем формирующейся интерметаллидной χ-фазы определяются величиной дозовой нагрузки при облучении. Сопоставление результатов облучения в реакторе на быстрых нейтронах и длительного термического отжига стали ЭП823 свидетельствует о существенно более интенсивных радиационно-индуцированных процессах распада твердого раствора.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Структура» № 122021000033-2).

MÖSSBAUER STUDIES OF PHASE AND MAGNETIC STATE OF $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ NANOCOMPOSITE AFTER MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS AND SUBSEQUENT ANNEALING

A.A. Chulkina, A.I. Ulyanov, A.L. Ulyanov, V.E. Porsev*

Udmurt Federal Research Center UrB RAS, Izhevsk, Russia
**e-mail: porsev@udman.ru*

The Fe-C system based alloys are widely used in various industries. The traditional possibilities for creating new, stronger materials based on such alloys have already been largely exhausted. At present, the interest of researchers is mainly directed to the study of nanoscale structural-phase states of steels and alloys, which, according to modern concepts, determine the increase in their strength characteristics [1]. The nanostructural state of iron-based alloys can be easily achieved by mechanical alloying (MA) of initial powders in a planetary ball mill [2]. For research purposes, this method is attractive in that nanocomposites with a given phase composition can be obtained on the basis of MA-alloys by doping and subsequent heat treatment of the samples. In this work, for structural and magnetic studies, a mechanically synthesized $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ model alloy with a composition of carbide steel was chosen. The choice of manganese as a carbide-forming element is due to the fact that, firstly, it contributes to the hardening of the hard phase - cementite. Secondly, Mn is an element that expands the γ-region of carbon alloys and, therefore, along with Ni, will contribute to the formation of a stronger binder phase of the composite - austenite. In addition, doping with Mn effectively lowers the Curie temperature of cementite [3]. In this regard, it becomes possible to study the regularities of the redistribution of Mn atoms between cementite and austenite during annealing of the nanocomposite under study.

In this work, the structural-phase and magnetic state of $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ nanocomposites, obtained by mechanosynthesis (mechanical alloying) and subsequent annealing, have been studied by Mössbauer spectroscopy using magnetic measurements data and X-ray diffraction. Mathematical processing of the spectra, measured at room temperature and liquid nitrogen temperature in order to determine the parameters of hyperfine interactions, as well as the Mössbauer phase analysis, was carried out using both discrete decomposition and reconstruction the distribution functions of hyperfine magnetic fields P(H) from the spectra. It has been established that after MA the alloy consists of an amorphous phase, cementite, an insignificant amount of χ-carbide, and ferrite. Annealing at T=500ºC leads to the transformation of the amorphous phase and χ-carbide into paramagnetic cementite and ferrite, with the weakly magnetic austenite being formed. At $T_{ann} \geq 500$ºC, Mn atoms released from paramagnetic cementite start to participate in the formation of paramagnetic austenite. It is concluded that, after $T_{ann} \geq 700$°C, cementite is observed in composites with variuos values of the Curie temperature and, consequently, with various Mn content (paramagnetic and ferromagnetic cementite). After annealing at $T_{ann} \geq 800$ºC, the nanocomposite contains paramagnetic austenite, which is a binding phase of nanosized cementite precipitates.

[1] A.I. Gusev Nanomaterials, Nanostructures, and Nanotechnologies, Fizmatlit, Moscow. (2007)
[2] E.P. Elsukov, G.A. Dorofeev, V.M. Fomin [et al.] // Phys. Met. Metallogr. 94, No 4, 356-366 (2002).
[3] E. Brueck, in K.H.J. Buschow (ed.), Handbook of Magnetic Materials, vol. 17, Elsevier Science B.V., Amsterdam, p. 235-293, (2007).

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО И МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ НАНОКОМПОЗИТА СОСТАВА $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ ПОСЛЕ МЕХАНОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ПОСЛЕДУЮЩИХ ОТЖИГОВ

А.А. Чулкина, А.И. Улянов, А.Л. Ульянов, В.Е. Порсев*

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
**e-mail: porsev@udman.ru*

Сплавы на основе системы Fe-C широко используются в различных отраслях промышленности. Традиционные возможности создания новых более прочных материалов на их основе уже в значительной степени исчерпаны. В настоящее время интерес исследователей в значительной мере направлен на изучение наноразмерных структурно-фазовых состояний сталей и сплавов, лежащих, по современным представлениям, в основе повышения их прочностных характеристик [1]. Наноструктурное состояние сплавов на основе железа легко достигается методом механического сплавления (МС) исходных порошков в шаровой планетарной мельнице [2]. Для исследовательских целей этот метод привлекателен тем, что путем легирования и последующей термической обработкой на базе МС-сплавов можно получить нанокомпозиты с заданным фазовым составом. В работе для структурных и магнитных исследований был выбран механосинтезированный модельный сплав состава карбидостали $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$. Выбор марганца в качестве карбидообразующего элемента обусловлен тем обстоятельством, что, во-первых, он способствует упрочнению твердой фазы – цементита. Во-вторых, Mn является элементом, который расширяет γ-область углеродистых сплавов и, следовательно, наряду с Ni будет способствовать формированию более прочной связующей фазы композита – аустенита. Кроме того, легирование Mn эффективно понижает температуру Кюри цементита [3]. В связи с этим появляется возможность исследования закономерностей перераспределения атомов Mn между цементитом и аустенитом в процессе отжигов исследуемого нанокомпозита.

В настоящей работе методом мёссбауэровской спектроскопии с привлечением данных магнитных измерений и рентгеновской дифракции изучено структурно-фазовое и магнитное состояние нанокомпозитов состава $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$, полученных методом механосинтеза (МС) и последующих отжигов. Математическая обработка спектров, измеренных при комнатной температуре и температуре жидкого азота с целью определения параметров сверхтонких взаимодействий, а также мёссбауэровского фазового анализа, проводилась как методом дискретного разложения, так и восстановления из спектров функций распределения сверхтонких магнитных полей P(H). Установлено, что после МС сплав состоит из аморфной фазы, цементита, незначительного количества χ-карбида и феррита. Отжиг при T=500ºC приводит к трансформации аморфной фазы и χ-карбида в парамагнитный цементит и феррит, начинает формироваться слабомагнитный аустенит. При $T_{отж} \geq 500$ºC атомы Mn, выделившиеся из парамагнитного цементита, участвуют в образовании парамагнитного аустенита. Сделан вывод, что после $T_{отж} \geq 700$ºC в композитах наблюдается цементит с различными значениями температуры Кюри и, следовательно, с различным содержанием Mn (парамагнитный и ферромагнитный цементит). После отжига при $T_{отж} \geq 800$ºC в составе нанокомпозита присутствует парамагнитный аустенит, который является связующей фазой наноразмерных выделений цементита.

[1] А.И. Гусев, Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии, М.: Физматлит (2007).
[2] Е.П. Елсуков, Г.А. Дорофеев, В.М. Фомин, Г.Н. Коныгин, А.В. Загайнов, А.Н. Маратканова, ФММ. **94**, No.4, 43-54 (2002).
[3] E. Brueck, in K.H.J. Buschow (ed.), Handbook of Magnetic Materials, vol. 17, Elsevier Science B.V., Amsterdam, p. 235-293, (2007).

MÖSSBAUER STUDY OF LONG-RANGE ATOMIC ORDER IN Fe–6.25 AT. % Si ALLOY

E.V. Makarov[1*], V.V. Ovchinnikov[1], V.A. Semionkin[1]

[1]*Institute of Electrophysics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia*
**e-mail: efre-m@yandex.ru*

The processes of long-range atomic order formation in samples of alloy Fe-6,25 at. % Si have been studied using the Mossbauer effect (in initially cold-deformed (1) and subjected to severe plastic deformation (SPD) (2) states) during short-term t = 4-12 s irradiation (with concomitant heating) by continuous beams of Ar^+ ions with energy E = 15-20 keV and during similar modes of rapid heating $T(t)$ using a non-contact heater.

The samples were irradiated on an ILM-1 ion implanter [1]. The Mössbauer spectra were recorded on an SM-2201 spectrometer. The source of γ-quanta is the ^{57}Co isotope in Rh.

It is known [2] that in alloys of the Fe-Si system in purely thermal processes in the concentration range c ≤ 25 at. %, the formation of superstructures of the 2nd and 3rd ranks of the A_3B, $A_{13}B_3$, A_7B ($A_{14}B_2$) and $A_{15}B$ ($A_{15}B_1$) types is possible. [2], described by the generalized formula $Fe_{16-k}Si_k$, k=1, 2, 3 and 4.

Processing of the Mössbauer spectra of the alloy under study showed that alloy has a strong tendency to atomic ordering of the $Fe_{15}Si$ type (k = 1). In samples disordered by torsion SPD, i.e. pressure shift (SD), the Gorsky-Bragg-Williams long-range atomic order parameter η differs significantly from zero (η = 0.21). After ordinary cold rolling, its value is even higher (η = 0.42).

Analysis of the Mössbauer spectra of the alloy Fe-6.25 at. % Si, regardless of the types of processing used by us (including in the initial state), showed that of all admissible types of superstructures of the 2nd and 3rd ranks ($Fe_{16-k}Si_k$, k = 1, 2, 3, and 4), they are adequately described only by the model corresponding to k = 1 (3rd rank $Fe_{15}Si$ superstructure [3]) with different degrees of order. As a result of rapid heating both by a non-contact heater and by an ion beam to temperatures of the order of 300–500 °C, the order parameter η increases (to slightly higher values: η = 0.5 and higher during heating with an ion beam).

In the case of irradiation of the alloy in the state after SPD at T = 200°C using a rotating diaphragm with a sector cut out in it (2π/16 radians) to avoid heating to higher temperatures by the ion beam (total irradiation time ~6 s, $F = 9\cdot10^{15}$ cm^{-2}) the long-range order parameter of the $Fe_{15}Si$ type reaches a very high value (η = 0.70). The value of the long-range order parameter after a much longer holding of a similar sample in an oven (at T = 200 °C, for 100 s) is significantly lower (η = 0.54).

This result means that, under irradiation conditions, a state close to equilibrium is reached in a very short time. The observed effect is due to the fact that due to the “cascade radiation shaking” by post-cascade powerful elastic and shock waves, the low-temperature mobility of atoms increases sharply [4].

Note that the state of thermodynamic equilibrium at T = 0 K corresponds to the value η = 1.

The decrease in the value of the long-range order parameter η as a result of the thermal motion of atoms with increasing temperature agrees with the conclusions of thermodynamics.

In the case of a thermal process, atomic ordering takes much longer due to the extremely slow diffusion rate.

The study was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (project No. 19-79-20173).

[1] N.V. Gavrilov, G.A. Mesyats, S.P. Nikulin, G.V. Radkovskii, A. Elkind, A.J. Perry, J.R. Treglio, J. Vac. Sci. Technol., A **14**, 1050–1055 (1996).
[2] V.V. Ovchinnikov, V.S. Litvinov, N.V. Sviginzev, Izv. Vuzov. Phys., **12**, 29–33 (1981).
[3] Ovchinnikov V.V., Mössbauer Analysis of the Atomic and Magnetic Structure of Alloys, Cambridge International Science Publishing, Cambridge UK (2006).
[4] V.V. Ovchinnikov, E.V. Makarov, N.V. Gushchina, Metals, **11**, 1667 (2021).

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДАЛЬНЕГО АТОМНОГО ПОРЯДКА В СПЛАВЕ Fe-6,25 АТ.% Si

Е.В. Макаров[1*], В.В. Овчинников[1], В.А. Семенкин[1]

[1]*Институт элефтрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: efre-m@yandex.ru*

С помощью эффекта Мессбауэра изучены процессы формирования дальнего атомного порядка в образцах сплава Fe-6,25 ат. % Si (исходно холоднодеформированных (1) и подвергнутых интенсивной пластической деформации (ИПД) (2)) в ходе кратковременного t = 4–12 с облучения (с сопутствующим нагревом) непрерывными пучками ионов Ar^+ с энергией E = 15-20 кэВ и в процессе аналогичных режимов быстрого нагрева $T(t)$ с помощью бесконтактного нагревателя.

Облучение образцов осуществлялось на ионном имплантере ИЛМ-1 [1]. Мессбауэровские спектры снимались на спектрометре СМ-2201. Источник γ-квантов – изотоп ^{57}Co в Rh.

Известно [2], что в сплавах системы Fe-Si в чисто термических процессах в интервале концентраций с ≤ 25 ат. % возможно образование сверхструктур 2-го и 3-го ранга типа A_3B, $A_{13}B_3$, A_7B ($A_{14}B_2$) и $A_{15}B$ ($A_{15}B_1$) [2], описываемых обобщенной формулой $Fe_{16-k}Si_k$, k=1, 2, 3 и 4.

Обработка мессбауэровских спектров исследуемого сплава показала, что сплав имеет сильную тенденцию к атомному упорядочению по типу $Fe_{15}Si$ ($k = 1$). В образцах, разупорядоченных с помощью ИПД кручением, т.е. сдвигом под давлением (СД), параметр дальнего атомного порядка Горского-Брегга-Вильямса η существенно отличается от нуля (η = 0,21). После обычной холодной прокатки его значение ещё выше (η = 0,42).

Анализ мёссбауэровских спектров сплава Fe-6,25 ат. % Si, вне зависимости от использованных нами видов обработки (в том числе в исходном состоянии) показал, что из всех допустимых типов сверхструктур 2-го и 3-го рангов ($Fe_{16-k}Si_k$, k = 1, 2, 3 и 4) они адекватно описывается лишь моделью, отвечающей k = 1 (сверхструктура 3-го ранга $Fe_{15}Si$ [3]) с разной степенью порядка. В результате быстрого нагрева как бесконтактным нагревателем, так и пучком ионов до температур порядка 300-500 °С параметр порядка η возрастает (до несколько более высоких значений: η = 0,5 и выше, в ходе нагрева ионным пучком).

В случае облучения сплава в состоянии после ИПД при T = 200 °С с использованием вращающейся диафрагмы с вырезанным в ней сектором (2π/16 радиан) во избежание разогрева до более высоких температур пучком ионов (суммарное время облучения ~6 с, $F = 9\cdot10^{15}$ см$^{-2}$) параметр дальнего порядка по типу $Fe_{15}Si$ достигает очень высокого значения (η = 0,70). Значение параметра дальнего порядка после значительно более длительной выдержки аналогичного образца в печи (при T = 200 °С, в течение 100 с) существенно ниже (η = 0,54).

Этот результат означает, что в условиях облучения за очень короткое время достигается состояние, близкое равновесному. Наблюдаемый эффект связан с тем, что по причине «каскадной радиационной тряски» посткаскадными мощными упругими и ударными волнами резко возрастает низкотемпературная мобильность атомов [4].

Состоянию термодинамического равновесия при T = 0 K отвечает значение η = 1.

Снижение параметра дальнего порядка η в результате теплового движения атомов с увеличением температуры согласуется с выводами термодинамики.

В случае термического процесса для этого требуется гораздо больше времени, вследствие крайне низкой скорости диффузии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-20173).

CONCENTRATION HETEROGENEITY AND THERMAL EXPANSION COEFFICIENT IN THE METASTABLE Fe–Ni INVARS

V.A. Shabashov*, V.V. Sagaradze, A.E. Zamatovsky, K.A. Kozlov, N.V. Kataeva, S.E. Danilov

M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

The atomic distribution variation with a further formation of long- and short-range ordering in FCC structure of Fe–Ni alloys from the Invar range results in the Invar relevant properties distortion. Atomic distribution in alloys can be controlled in terms of deformation, thermal, and radiation induced structure-phase transformations. The slow heating (0.2 – 0.4 grad/min) of α-martensite in the $FeNi_{32}$ alloy leads to the transformation in terms of disperse (nanosized) austenite formation with multiple orientations of γ-crystals. The formation of dispersed crystals with extended surface of interface α/γ borders is a condition for a noticeable redistribution of nickel. During the final stage of the α→γ transformation in the temperature range from 490 to 520 °C a partial leveling of alloy concentration heterogeneity occurs due to the mechanism of formation and growth of globules. To reduce the time needed for the mechanism of globular borders' moving the fast heating up to 600 °C was performed in the range of α→γ transformation for samples with the concentration heterogeneity.

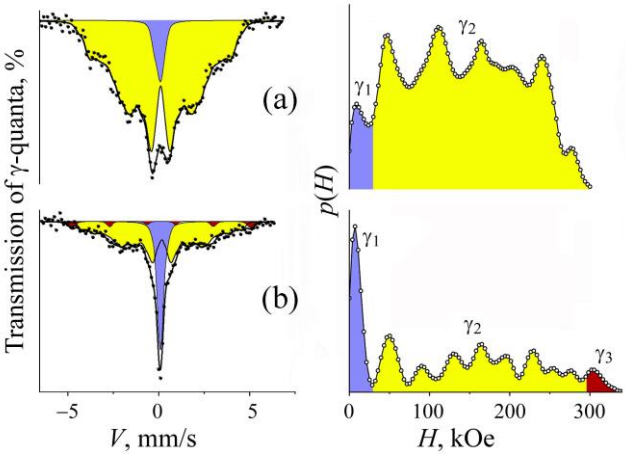


Fig. 1 Mössbauer spectra and reconstituted using $p(H)$ spectral components γ_1, γ_2, γ_3. Treatment:
(a) – quenched martensite after the fast heating up to 600 °C in the salt bath;
(b) – quenched martensite after the slow heating (0.2 grad/min) up to 430 °C, and further fast heating up to 600 °C in the salt bath.

It is shown that the slow heating of quenched martensite with the following completion of α→γ transformation under the fast heating provides the development of up to 40 % of austenite with the non-Invar composition (13 % with Ni content ~ 48 at.% and 27 % with Ni content ≤ 29 at.%). Nanoscale inhomogeneity regions are formed in place of the plates of the dispersed nickel-enriched γ-phase and the adjacent structure of nickel-depleted α-martensite. Volume variation of the non-Invar austenite part provides the ability to regulate the value of the coefficient of thermal expansion for the austenite with the concentration heterogeneity from $2.5 \cdot 10^{-6}$ to $10.5 \cdot 10^{-6}$ $grad^{-1}$ in the temperature range from –50 to 50 °C. The Mössbauer spectra shape and the degree of concentration heterogeneity for the Fe–Ni austenite as well as change in the coefficient of thermal expansion value were found to be similar to that of the $FeNi_{35}$ Invar after the high-energy electron irradiation.

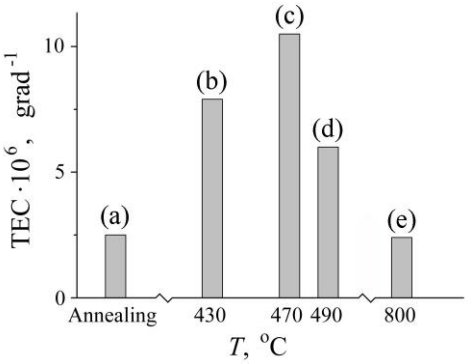


Fig. 2. The thermal expansion coefficient values for the $FeNi_{31.5}$ austenite with the concentration heterogeneity. Treatment:
(a) – tempering from 1050 °C in water;
(b), (c), (d) – quenched martensite after the slow heating (0.2 grad/min) up to 430, 470 and 490 °C, respectively, and further fast heating up to 600 °C during 10 min;
(e) – quenched martensite after the slow heating (0.2 grad/min) up to 800.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Structure” No. 122021000033-2).

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ В МЕТАСТАБИЛЬНЫХ Fe–Ni ИНВАРАХ

В.А. Шабашов*, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, С.Е. Данилов

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

Изменение атомного распределения с образованием ближнего и дальнего порядка в структуре ГЦК Fe–Ni сплавов инварного диапазона приводит к нарушению инварных свойств. Атомное распределение в сплавах может регулироваться в условиях структурно-фазовых превращений при деформационных, термических и радиационных воздействиях. При медленном нагреве со скоростью 0.2–0.4 град./мин. $\alpha\rightarrow\gamma$ превращение осуществляется в условиях дисперсного (наноразмерного) аустенита с различной ориентацией кристаллов по бейнитному механизму превращения. Образование дисперсных α/γ кристаллов с большой поверхностью межфазных границ являются условием заметного перераспределения никеля. На завершающей стадии $\alpha\rightarrow\gamma$ превращения в интервале температур 490–520 °C происходит частичное выравнивание концентрационной неоднородности структуры за счет механизма образования и роста γ глобулей. Для целей снижения времени действия механизма роста γ глобулей был осуществлен быстрый нагрев до 600 °C концентрационно неоднородных образцов из интервала $\alpha\rightarrow\gamma$ перехода.

Показано, что медленный нагрев мартенсита охлаждения в интервал перехода с последующим завершением превращения быстрым нагревом позволяет сформировать до 40 % структуры аустенита неинварного состава (13 % с содержанием Ni ~ 48 ат.% и 27 % с содержанием Ni ~ 29 ат.%). Области неоднородности наномасштабного размера образуются на месте пластин дисперсной обогащенной никелем γ-фазы и примыкающим к ним структуре обедненного никелем α-мартенсита. Изменение объема неинварной составляющей аустенита дает возможность регулировать коэффициент термического расширения концентрационно неоднородного аустенита в пределах от $2.5\cdot10^{-6}$ до $10.5\cdot10^{-6}$ град$^{-1}$ в интервале температур от –50 до 50 °C. Вид спектров и степень концентрационной неоднородности Fe–Ni аустенита, а также изменение коэффициента термического расширения сопоставимо с аналогичными параметрами инвара $FeNi_{35}$ после облучения высокоэнергетическими электронами.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Структура» № 122021000033-2).

HEAT OF NITRIDE FORMATION AND MECHANICAL SYNTHESIS OF STEELS STRENGTHENED BY DISPERSED TITANIUM NITRIDES

V.A. Shabashov*, K.A. Lyashkov, A.E. Zamatovsky, K.A. Kozlov, N.V. Kataeva, E.G. Novikov

M.N. Mikheev lnstitute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

In connection with the development of technologies using mechanical alloying, a more economical method of solid-phase mechanical nitrogen alloying of iron alloys was proposed. The peculiarity of the proposed method of solid-phase mechanical nitriding is the use of nitrides unstable during plastic deformation for their mechanical introduction into a metal matrix – i.e., the process of mechanical alloying (MA) of the latter by nitrogen.

A special task of solid-phase mechanical synthesis was the creation of high-nitrogen austenite. The goal was to replace expensive nickel with nitrogen, which stabilizes the high-temperature γ-phase.

Powders of the Fe-*y*Ti binary alloys (*y*, wt.% = 2; 5) with a BCC crystal lattice were employed in the capacity of metal matrices for the MS high-nitrogen steels. The nitrogen donor was CrN (Cr_2N) together with Mn_2N, which were nitrides both poorly resistant to deformation; they were taken in the proportion of 20 wt.% of the mixture. The mixtures Fe–*x*Ni (*x*, wt.% = 0; 6) + CrN (Cr_2N) were used in the capacity of model systems.

The following mixtures were analyzed: Fe-2Ti + CrN; Fe + CrN; Fe-6Ni + CrN; Fe-5Ti + Mn_2N, fig. 1, 2. The heat of formation of transition element nitrides characterizes the stability of the position of nitrogen atoms in nitrides. Moreover, this characteristic decreases sequentially from titanium to chromium, iron, and nickel.

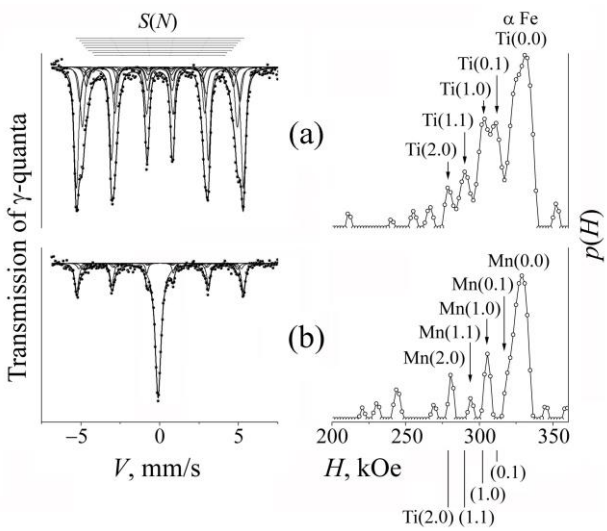


Fig. 1. Mössbauer spectra of the mixture (Fe-5Ti + MnN) and the distributions *p*(*H*) for the α-phase. Treatment: (**a**) – initial mixture; (**b**) – PBM, 10 h + anneal 650°C, 4 h. The arrows at the distribution *p*(*H*) mark the peaks corresponding to occupations by the impurity atoms Ti and Mn in the first two CSs of iron.further fast heating up to 600 °C in the salt bath.

It is established that the use of titanium, which has the greatest heat of nitride formation, as an alloying additive of the metal component of the mixture accelerates the processes of dissolution of primary nitrides and stabilization of chromium and manganese in the state of solid solution of substitution of MS samples. Titanium alloying of iron in a mixture with CrN (Cr_2N) nitrides makes it possible to obtain a high-nitrogen ferrite-martensitic composite, and in a mixture with Mn_2N – a high-nitrogen austenitic composite stable during thermal annealing.

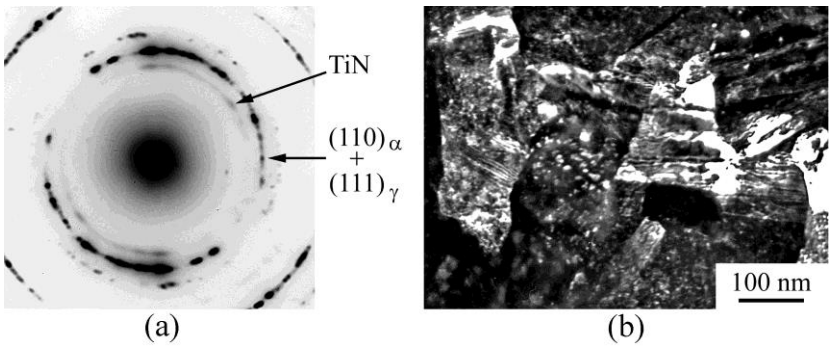


Fig. 2. TEM data for the mixture (Fe-5Ti + MnN) after PBM for 10 h and annealing at 650°C, 4 h.
(**a**) – SAED pattern; (**b**) – dark-field image taken in the combined reflection $(111)_{TiN} + (110)_{\alpha} + (111)_{\gamma}$.

According to thetransmission electron microscopy data, as a result of the MS and subsequent annealing of the composition (Fe–5Ti) + Mn_2N, the particles of low-stability manganese nitride dissolved and secondary nanoparticles of more stable titanium nitride formed. The size of these particles amounted to ~ 2 nm, fig. 2.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Structure” No. 122021000033-2) with the support of Russian Foundation for Basic Research (project No. 19-33-60006).

ТЕПЛОТА ОБРАЗОВАНИЯ НИТРИДОВ И МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ СТАЛЕЙ, УПРОЧНЯЕМЫХ ДИСПЕРСНЫМИ НИТРИДАМИ ТИТАНА

В.А. Шабашов*, К.А. Ляшков, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, Е.Г. Новиков

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия
**e-mail: shabashov@imp.uran.ru*

В связи с развитием технологий, использующих механическое сплавление, был предложен экономичный метод твердофазного механического легирования азотом сплавов железа. Особенность предложенного метода твердофазного механического азотирования заключается в использовании неустойчивых при пластической деформации нитридов для механического сплавления (МС) с металлической матрицей.

Специальной задачей твердофазного механического синтеза было создание высокоазотистого аустенита. Цель заключалась в замене дорогостоящего никеля на азот, стабилизирующий высокотемпературную γ-фазу.

В качестве металлической матрицы для МС высокоазотистых сталей использовали порошки бинарных сплавов Fe-*y*Ti (*y*, масс. % = 2, 5) с ОЦК кристаллической решеткой. Донором азота были малоустойчивые при деформации нитриды CrN (Cr_2N) и Mn_2N в пропорции 20 массовых % смеси. В качестве модельных систем использовали смеси Fe-*x*Ni (*x*, масс. % = 0, 6) + CrN (Cr_2N).

Анализировали смеси: Fe-2Ti + CrN; Fe + CrN; Fe-6Ni + CrN; Fe-5Ti + Mn2N, рис. 1, 2. Теплота образования нитридов переходных элементов характеризует устойчивость положения атомов азота в нитридах. Причем эта характеристика снижается последовательно от титана к хрому, железу и никелю.

Установлено, что использование титана, обладающего наибольшей теплотой образования нитридов, в качестве легирующей добавки металлической компоненты смеси, ускоряет процессы растворения первичных нитридов и стабилизации хрома и марганца в состоянии твердого раствора замещения МС образцов. Легирование титаном железа в смеси с нитридами CrN (Cr_2N) позволяет получать высокоазотистый феррито-мартенситный композит, а в смеси с Mn_2N – стабильный при термических отжигах высокоазотистый аустенитный композитю

По данным электронной микроскопии в сплаве состава ((Fe–5Ti) + Mn_2N) в результате МС и последующего отжига происходит растворение частиц малоустойчивого нитрида марганца и образование вторичных наночастиц более устойчивого нитрида титана. Размер этих частиц составляет ~ 2 нм, рис. 2.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60006. Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Структура» № 122021000033-2).

THE EFFECT OF MECHANICAL STRESSES ON THE STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN THE INDUSTRIAL EP823 AND EP823-ODS STEELS UNDER HIGH-DOSE NEUTRON IRRADIATION

K.A. Kozlov[1*], V.A. Shabashov[1], V.V. Sagaradze[1], A.E. Zamatovsky[1], A.V. Kozlov[2], V.L. Panchenko[2]

[1] *M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia*

[2] *Research Institute of Nuclear Materials, Joint-Stock Company, Sverdlovsk region, Zarechny, Russia*

**e-mail: kozlov@imp.uran.ru*

The effect of mechanical stresses on the structure of EP823 and EP823-ODS steels under high-dose irradiation in the fast neutron reactor BN-600 has been studied by the methods of Mössbauer spectroscopy with resonance detection and electron microscopy. To create mechanical stresses in the samples of fuel element cladding, special fillers were used that lead to mechanical stresses and plastic deformation of the studied samples under irradiation conditions, table 1. Austenitic steels with varying degrees of radiation-induced swelling were used as fillers. To carry out the Mössbauer measurements, a sample manufacturing procedure was developed, see Fig. 1.

Table 1. Designation of processing modes depending on the type of filler under irradiation

Processing №	Type of filler
1	Before irradiation
2	Irradiation without filler
3	Little swelling filler
4	Medium swelling filler
5	Highly swelling filler

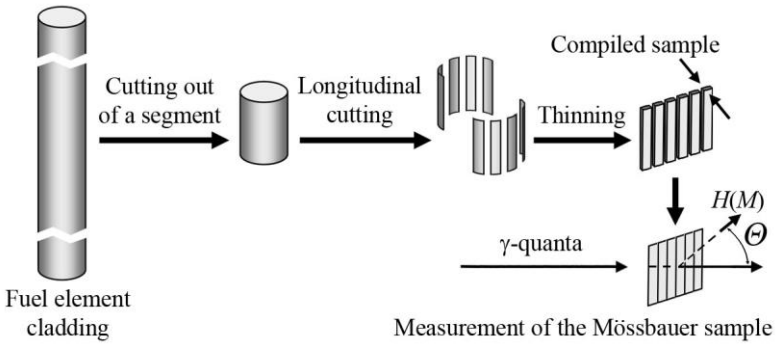


Fig. 1. The scheme of preparation of Mössbauer samples.

In [1], it was shown by the methods of Mossbauer spectroscopy and electron microscopy that neutron irradiation of EP823 steel with a dose of ~50-80 dpa at temperatures of 570-660 C causes the decay of the α-phase structure and the formation of up to 7% paramagnetic mixture of phases: (i) χ-phase and (ii) carbides of $Me_{23}C_6$ type. It is established that the creation of quasi-hydrostatic stresses at irradiation temperature of 505 C with a dose of ~ 80 dpa of EP823 and EP823-ODS steels leads to an increase in the decay processes of alpha solid solution with an escape of about 3 at. % of chromium from the ferritic matrix accompanied with the formation of χ-phase and carbides. It is shown that under neutron irradiation, the growth of the vertical component of the magnetic texture of the α-phase correlates with an increase in the amount of χ-phase, Fig 2. It is assumed that the χ-phase creates mechanical stresses perpendicular to the surface of the fuel element cladding. The greatest acceleration of the decay processes and the

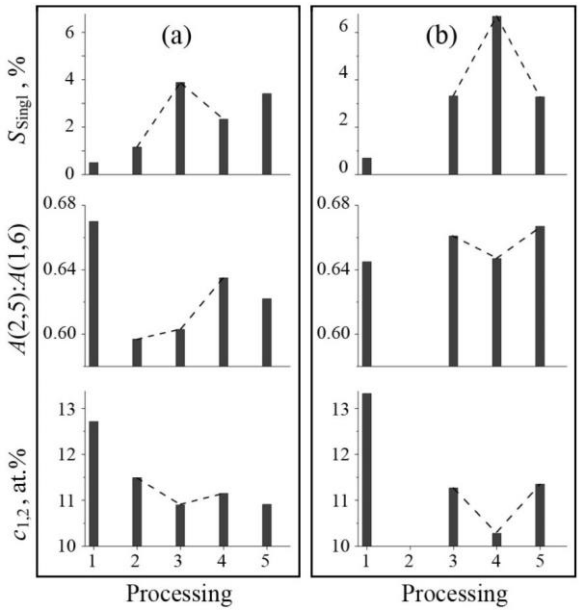


Fig. 2. The effect of processing mode on EP823 (a) and EP823-ODS (b) steels:
– the singlet area of the paramagnetic phase S_{singl};
– indicator of magnetic texture $A(2,5):A(1,6)$;
– the effective chromium concentration $c_{1,2}$.

amount of χ-phase in both EP823 and EP823-ODS steels are observed with an increase in the anisotropy of relative deformation along and across the fuel element cladding.

The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Structure” No. 122021000033-2).

[1] Kozlov K., Shabashov V., Kozlov A., Sagaradze V., Semyonkin V., Panchenko V., Zamatovsky A., Kataeva N., and Nikitina A., *JNM* **558**, 153384 (2022).

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ИНДУСТРИАЛЬНЫХ СТАЛЯХ ЭП823 И ЭП823-ДУО ПРИ ВЫСОКОДОЗНОМ НЕЙТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

К.А. Козлов[1*], В.А. Шабашов[1], В.В. Сагарадзе[1], А.Е. Заматовский[1], А.В. Козлов[2], В.Л. Панченко[2]

[1] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2] *АО Институт реакторных материалов, Свердловская обл., Заречный, Россия*
**e-mail: kozlov@imp.uran.ru*

Методами мессбауэровской спектроскопии с резонансным детектированием [1] и электронной микроскопии исследовано влияние механических напряжений на структуру сталей ЭП823 и ЭП823-ДУО при высокодозном облучении в реакторе на быстрых нейтронах БН-600. Для создания механических напряжений в образцах твельных трубок использовали наполнители, приводящие к механическим напряжениям и пластической деформации исследуемых образцов в условиях облучения, табл. 1. В качестве наполнителей использовали аустенитые стали с различной степенью радиационно-индуцированного распухания. Для проведения мессбауэровских измерений была разработана процедура изготовления образцов, приведенная на рис. 1.

В работе [1] методами мессбауэровской спектроскопии и электронной микроскопии было показано, что облучение нейтронами стали ЭП823 с дозовой нагрузкой ~50–80 сна при температурах 570–660 С вызывает распад структуры α-фазы и образованием до 7 % парамагнитной смеси фаз: χ-фазы и карбидов типа $Me_{23}C_6$. Установлено, что создание квазигидростатических напряжений при температуре облучения 505 С с дозовой нагрузкой ~80 сна сталей ЭП823 и ЭП823-ДУО приводят к усилению процессов распада альфа твердого раствора с выходом порядка 3 ат. % хрома из ферритной матрицы с образованием χ-фазы и карбидов.

Показано, что в условиях облучения нейтронами рост вертикальной составляющей магнитной текстуры α-фазы скоррелирован с увеличением количества χ-фазы, рис. 2. Предполагается, что χ-фаза создает механических напряжения, перпендикулярные к поверхности твельной трубки. Наибольшее ускорение процессов распада и количества χ-фазы как в стали ЭП823, так и ЭП823-ДУО наблюдается при увеличении анизотропии относительной деформации вдоль и поперек твельной трубки.

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Структура» № 122021000033-2).

MÖSSBAUER STUDY OF $PbSnO_3$

S.P. Kubrin[1*], I.P. Raevskii[2], D.A. Sarychev[1], N.M. Olekhnovich[3], A.V. Pushkarev[3], Yu.V. Radyush[3]

[1]*Research Institute of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia.*
[2]*Faculty of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia.*
[3]*Scientific and Practical Materials Research Centre, National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.*
**stasskp@gmail.com*

The $PbSnO_3$ ceramic samples were prepared by high-pressure (5GPa) solid-phase synthesis. At room temperature the sample possesses monoclinic perovskite structure.

Figure1 shows the temperature dependencies of dielectric permittivity ε(*T*) for $PbSnO_3$ sample in the range of 15 – 450K. The ε(*T*) dependencies have two anomalies near 200K and 370K. The anomaly of ε(*T*) at 370K corresponds to cubic into monoclinic phase transition. This transition result in appearing of ferroelectric ordering. Near 200K the ε(*T*) have frequency dependent maxima.

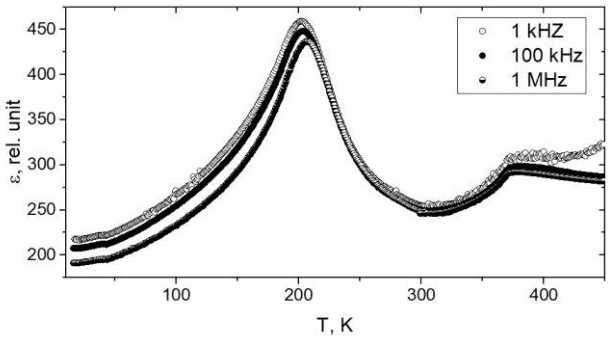


Fig. 1. Temperature dependencies of real part dielectric permittivity of $PbSnO_3$ ceramic sample.

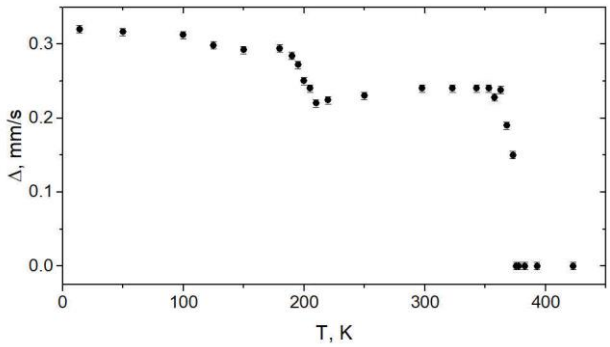


Fig. 2. Temperature dependence of quadrupole splitting values for Mössbauer spectra of $PbSnO_3$.

^{119}Sn Mössbauer spectra taken in cubic phase (T> 370) are single line with isomer shift value corresponds to Sn^{4+}. Below 370K the quadrupole splitting appears on Mössbauer spectra (Fig. 2). The quadrupole splitting value does not change significantly in the temperature range of 300 – 350K. Near 200 K the quadrupole splitting increases abruptly and slowly increases with a further decrease in temperature. The appearing of quadrupole splitting at 370K associated with lowering of Sn^{4+} local symmetry due to the offsets of oxygen ions. The increase in quadrupole splitting value at 200K indicates additional lowering of Sn^{4+} local environment symmetry. These changes are caused by structural order-disorder phase transition due to displacements of oxygen and lead ions.

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ $PbSnO_3$

С.П. Кубрин[1*], И.П. Раевский[2], Д.А. Сарычев[1], Н.М. Олехнович[3], А.В. Пушкарев[3], Ю.В. Рядуш[3]

[1] *НИИ физики, ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия.*
[2] *Физический факультет, ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия.*
[3] *НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Белоруссия.*
**stasskp@gmail.com*

Образец керамики $PbSnO_3$ получен твердофазным синтезом под давлением 5 Гпа. При комнатной температуре образец обладает структурой перовскита моноклинной сингонии.

На рис.1 представлены измерения диэлектрической восприимчивости образца PbSnO3 в температурном диапазоне 15K – 450K. Представленные зависимости обладают двумя аномалии в окрестностях температур 200K и 370K. Аномалия ε(T) при 370K обусловлена фазовым переходом из кубической в моноклинную фазу, при этом возникает сегнетоэлектрическое упорядочение. При 200K на зависимости ε(T) наблюдается частотозависимый максимум.

^{119}Sn Мессбауэровские спектры, измеренные в кубической фазе (T>370K) представляют собой синглет с изомерным сдвигом соответствующим ионам Sn^{4+}. При понижении температуры в окрестности 370K, на спектрах возникает квадрупольное расщепление. В диапазоне температур 200 – 350K величина квадрупольного расщепление изменяется слабо. В окрестности 200K квадрупольного расщепление увеличивается и медленно возрастает при дальнейшем понижении температуры. Возникновение квадрупольного расщепления в окрестности 370K обусловлено понижением локальной симметрии ближайшего окружения ионов Sn^{4+}, в результате смещений ионов кислородов. При 200K увеличение квадрупольного расщепления указывает на еще большее понижение симметрии локального окружения Sn^{4+}. Указанное изменение вероятно вызвано структурным фазовым переходом типа порядок-беспорядок в результате смещений кислородов и ионов Pb^{2+}.

SOLID-PHASE MECHANICAL SYNTHESIS OF HIGH-NITROGEN CHROMIUM-MANGANESE AUSTENITE

K.A. Lyashkov[1*], V.A. Shabashov[2], A.E. Zamatovsky[2], K.A. Kozlov[2], N.V. Kataeva[2], E.G. Novikov[2]

[1]*Institute of Engineering Science, UB RAS, Ekaterinburg, Russia*
[2]*Mikheev Institute of Metal Physics, UB RAS, Ekaterinburg, Russia*
**e-mail: lyashkov@imp.uran.ru*

For the purpose of nitriding iron-based alloys, solid-phase mechanical synthesis (MS) was used instead of the costly technology of nitrogen saturation of melts. The approach [1-4] was based on cyclic deformation-induced phase transitions "dissolution – separation" of dispersed particles of primary low-stability nitrides (such as CrN and Mn_2N) in metal matrices.

The objective of this work was to investigate the possibility of solid-phase MS of nitrogenous austenite using as a material initial mixtures of binary alloys and nitrides with alloying elements included in stainless steels of the austenitic class Fe-Cr-Mn-N.

We analyzed the mixtures in the series *A* and *B*, each of which had several compositions of constituents with the varying contents of the metallic matrix and 10 or 20 wt. % proportion of the nitrogen-containing addition:

$$\begin{aligned} &A\text{: Fe-}X\text{Mn + 20CrN (Cr}_2\text{N);} \\ &B\text{: Fe-}Y\text{Cr + 10…20Mn}_2\text{N.} \end{aligned} \qquad (1)$$

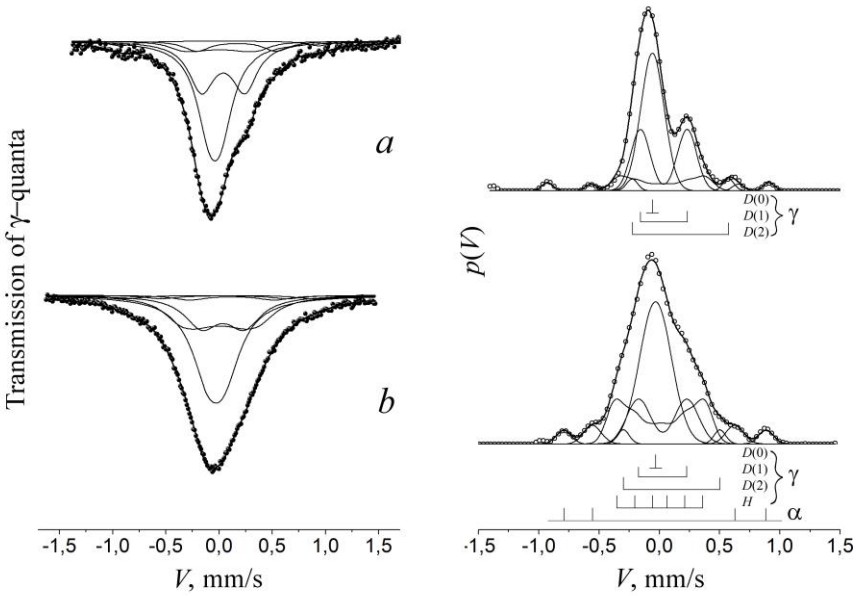


Fig. 1. Mössbauer spectra and the distribution *p*(*V*) for MS samples of Series *B*. Treatment, composition: (a) ball milling (BM), composition 2 (Fe–14.2Cr + 20% Mn_2N); (b) BM, composition 1 (Fe + 20% Mn_2N). In the distributions *p*(*V*) a "deciphering" of the model of nitrogen-containing austenite is given.

It is shown that the ball milling (BM) of mixtures of series *A* and *B* leads to the fusion of the components of the mixtures and the formation of solid solutions of Fe-Cr-Mn-N with HCC and BCC crystal lattices. An increase in the concentration of Cr and Mn elements in the initial BCC alloys, as well as the proportion of nitrides in the compositions under BM and subsequent annealing conditions is accompanied by an increase in the volume of the resulting austenite with a nitrogen concentration of up to 3.7 wt. (13.1 at.) %. The result of mechanical fusion in the *B* series is the formation of a HCC phase, part of which has an AFM ordering with manganese content ≥ 20 wt. %.

The higher stability of MS austenite in the *B* series is explained by the formation of concentration inhomogeneous, austenite-forming manganese-rich matrix regions, the low thermal

stability of Mn_2N nitrides compared to CrN (Cr_2N), and the low diffusion mobility of manganese during BM and subsequent annealing.

The reported study was funded by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 19-33-60006). The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “structure” no. AAAA-A18-118020190116-6).

[1] V.A. Shabashov, S.V. Borisov, A.E. Zamatovsky, N.F. Vildanova, A.G. Mukoseev, A.V. Litvinov, O.P. Shepatkovsky, Mater. Sci. Eng. **A 452-453**, 575–583 (2007).
[2] V.A. Shabashov, L.G. Korshunov, V.V. Sagaradze, N.V. Kataeva, A.E. Zamatovsky, A.V. Litvinov, K.A. Lyashkov, Phil. Mag. **94**, 668–682 (2014).
[3] V.A. Shabashov, K.A. Kozlov, K.A. Lyashkov, A.V. Litvinov, G.A. Dorofeev, S.G. Titova, Defect Diff. Forum. **330**, 25–37 (2012).
[4] V.A. Shabashov, K.A. Kozlov, K.A. Lyashkov, N.V. Kataeva, A.V. Litvinov, V.V. Sagaradze, A.E. Zamatovskii, The Physics of Metals and Metallography. **115**, 392–402 (2014).

ТВЕРДОФАЗНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ВЫСОКОАЗОТИСТОГО ХРОМОМАРГАНЦЕВОГО АУСТЕНИТА

К.А. Ляшков[1*], В.А. Шабашов[2], А.Е. Заматовский[2], К.А. Козлов[2], Н.В. Катаева[2], Е.Г. Новиков[2]

[1]*ИМАШ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[2]*ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
**e-mail: lyashkov@imp.uran.ru*

С целью азотирования сплавов на основе железа вместо затратной технологии насыщения азотом расплавов был использован твердофазный механический синтез (МС). В основу подхода [1-4] были положены циклические деформационно-индуцированные фазовые переходы «растворение – выделение» дисперсных частиц первичных малоустойчивых нитридов (типа CrN и Mn_2N) в металлических матрицах. Задачей настоящей работы было исследование возможности твердофазного МС азотистого аустенита с использованием в качестве материала исходных смесей бинарных сплавов и нитридов с элементами легирования, входящими в состав нержавеющих сталей аустенитного класса Fe-Cr-Mn-N.

Анализировали смеси в сериях *A* и *B*, каждая из которых имела несколько композиций с варьируемым составом металлической матрицы и пропорцией 10…20 масс. % азотсодержащей добавки:

$$A\text{: Fe-}X\text{Mn} + 20\text{CrN } (\text{Cr}_2\text{N});$$
$$B\text{: Fe-}Y\text{Cr} + 10\ldots20\text{Mn}_2\text{N}. \qquad (1)$$

Показано, что помол смесей серий *A* и *B* приводит к сплавлению компонент смесей и формированию твердых растворов Fe-Cr-Mn-N с ГЦК и ОЦК кристаллическими решетками. Увеличение концентрации элементов Cr и Mn в исходных ОЦК сплавах, а так же пропорции нитридов в композициях в условиях помола и последующего отжига сопровождается увеличением объема образующегося аустенита с концентрацией азота до 3.7 масс. (13.1 ат.) %. Результатом механического сплавления в серии *B* становится формирование ГЦК фазы, часть которой имеет АФМ упорядочение с содержанием марганца ≥ 20 масс. %. Более высокая стабильность МС аустенита в серии *B* объясняется образованием концентрационно неоднородных, богатых аустенитообразующим марганцем областей матрицы, малой по сравнению с CrN (Cr_2N) термической стабильностью нитридов Mn_2N и низкой диффузионной подвижностью марганца в процессе помола и последующего отжига.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60006. Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Структура» №АААА-А18-118020190116-6

MOSSBAUER AND RAMAN SPECTROSCOPY STUDY OF ALUMINIUM INFLUENCE ON THE MAGNETOCALORICS OF SUBMICRON $MgFe_{2-X}Al_XO_4$ PARTICLES

K.E. Khudyakov[1*], E.V. Lazareva[1], I. Khishigdemberel[2], P.Yu. Tyapkin[3], T.F. Grigoreva[3], I.P. Ivanenko[1], T.Yu. Kiseleva[1], E. Uyanga[2], D. Sangaa[2]

[1] *Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[2]*Institute of Physics and Technology, Ulaanbaatar, Mongolia*
[3]*Institute of Solid-State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Novosibirsk*
**e-mail: Khudyakov@yandex.ru*

The magnesium ferrite ($MgFe_2O_4$) is one of the most important ferrites, which finds several applications in heterogeneous catalysis, ecology, sensors, and in magnetic technologies. A modern attractive application of Mg-ferrites is their use in nanosized forms in biomedical fields as components of systems for magnetically mediated hyperthermia or ablation [1]. Specific important magnetic properties of ferrites particles before surface functionalization for magneto-thermia applications may be modulated by different ways including particles shape, size distributions and directed substitution [2-3].

In our work, we investigate the influence of the crystal and magnetic structure of ferrite particles with composition of $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ (where x = 0.0, 0.2, 0.3, 0.7, 2) on the heat generation ability in AC magnetic field. Submicron ferrite particles were obtained by sol-gel synthesis and showed clear influence of Al-substitution on their heat generation allowing to suppress too much heating. We performed Mossbauer and Raman spectroscopy supported by X-ray diffractometry and microscopy to find cation distribution effect and magnetic structure on the modulation of exchange interaction resulting in suppressing the particle's magnetic and magnetocaloric behavior.

Supporting of Joint RFBR project 19-52-44003 and MSU Program of Development project are acknowledged.

[1] T.Maehara, E.Konishi et al. J. of Material science 40 (2005)
[2] I. Khishigdemberel, E. Uyanga et al. Solid State Sciences, 109 (2020)
[3] H. Hirazawa, Y.Ito , D.Sangaa et.al AIP Conference Proceed. 1763, (2016).

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЛИЯНИЯ АЛЮМИНИЯ НА МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ $MgFe_{2-X}Al_XO_4$

К.Е. Худяков[1], Е.В. Лазарева[1], И. Кишигдемберел[2], П.Ю. Тяпкин[3], Т.Ф. Григорьева, И.П. Иваненко[1], Т.Ю. Киселева[1], Е. Уянга[2], Д. Сангаа[2]

[1] *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[2] *Институт Физики и технологии, Улан-Батор, Монголия,*
[3]*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия*
**e-mail: Khudyakov@yandex.ru*

Феррит магния уже давно является одним из весьма востребованных составов, который нашел применения в гетерогенном катализе, экологии, сенсорике, магнитных технологиях. В настоящее время интерес к этому составу появился в связи с перспективами применения его в форме наночастиц в качестве основы материалов для биомедицинских применений, например для магнитной гипертермии и абляции. Специфические магнитные свойства частиц феррита до функционализации его поверхности для магнитотермии могут быть оптимизированы различными способами, включая форму, размерное распределение и направленное легирование.

В нашей работе мы исследовали влияние кристаллической и магнитной структуры частиц феррита состава $MgAl_xFe_{2-x}O_4$ (x = 0.0, 0.2, 0.3, 0.7, 2) на их способность к разогреву в переменном магнитном поле. Субмикронные частицы были получены методом золь-гель и продемонстрировали явное влияние алюминия на уменьшение их разогрева. Мы провели исследование методами Мессбауэровской и Рамановской спектроскопии, а также рентгеновской дифрактометрии и электронной микроскопии для выявления влияния катионного распределения и формирования магнитной структуры на модуляцию обменных взаимодействий, приводящих к подавлению магнитокалорического эффекта.

Секция 4

БИОЛОГИЧЕСКИЕ И МЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Section 4

BIOLOGICAL AND MEDICAL APPLICATIONS

MOLECULAR SPECTROSCOPIC MONITORING OF STRUCTURAL AND REDOX TRANSFORMATIONS IN BACTERIAL CELLS UPON DRYING

A.A. Kamnev[1*], A.V. Tugarova[1], K. Kovács[2], E. Kuzmann[2]

[1]*Institute of Biochemistry and Physiology of Plants and Microorganisms, Saratov Federal Scientific Centre of the Russian Academy of Sciences, Saratov, Russia*
[2]*Laboratory of Nuclear Chemistry, Institute of Chemistry, Eötvös University, Budapest, Hungary*
**e-mail: aakamnev@ibppm.ru; a.a.kamnev@mail.ru*

In microbial biotechnology, preparations of dried living bacteria (most often, lyophilised biomass) are widely applicable in a range of industrial fields. As has been documented using Mössbauer spectroscopy, in many bacteria assimilation of Fe^{III} from the medium proceeds via its reduction to Fe^{II} which is accumulated in metabolically active cells (in coordinated forms) reaching a noticeable percentage of the total cellular Fe pool. In our work, for agriculturally important soil bacteria of the genus *Azospirillum*, Mössbauer measurements showed that already by the end of the logarithmic growth phase (~18 h), cells of different *Azospirillum* strains (grown with $^{57}Fe^{III}$–nitrilotriacetate complex as a sole source of Fe) accumulated 22% Fe^{II} (Fig. 1, spectrum A, where (A) and (B) represent two forms of Fe^{II}) to 33% Fe^{II} of the whole cellular iron (for reviews, see [1,2] and references therein). However, upon desiccation, it was found that in both strains the relative content of Fe^{II} diminished to ca. 3% (see, e.g. Fig. 1, spectrum B).

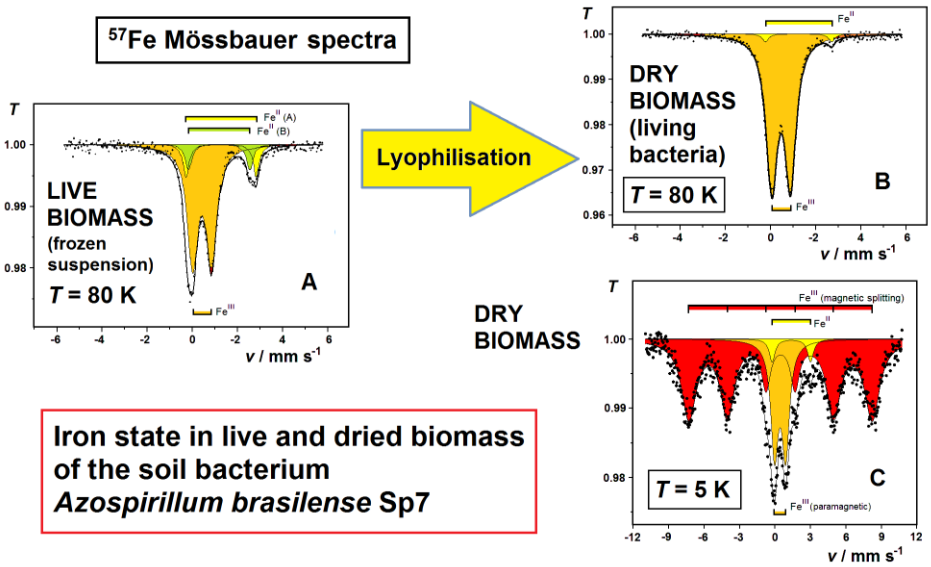


Fig. 1. ^{57}Fe Mössbauer spectra of live biomass of *Azospirillum brasilense* Sp7 (**A**: rapidly frozen aqueous suspension; **B**, **C**: lyophilised biomass) measured at T = 80 K (**A**, **B**) and at T = 5 K (**C**).

Low-temparature Mössbauer measurements showed that the major part of Fe^{II}, that had been oxidised to Fe^{III} upon drying, remained paramagnetic at T = 5 K (Fig. 1, spectrum C) and thus was easily distinguishable from the Fe^{III} in ferritin-like proteins (which gave the magnetically split subspectrum in Fig. 1, C). In metabolically active cells, any potential damage resulting from reactive oxygen species (due to Fenton-like reactions of H_2O_2 with Fe^{II}) is controlled and can be prevented, while in dormant cells (dry living bacteria), the presence of high Fe^{II} concentrations can be harmful [3]. Thus, the observed possibility for cellular Fe^{II} to get largely oxidised to Fe^{III} upon drying, as has for the first time been observed in our work [3], may represent a natural strategy to avoid oxidative damage for desiccated cells. This novel finding can have important implications for understanding Fe speciation and redox transformations in widely used dried bacterial preparations.

Concomitant structural transformations in dried bacterial cells, including the accumulation of reserve biopolyester (poly-3-hydroxybutyrate), under various conditions (biofilms, planktonic cells)

in wild-type and genetically modified strains of azospirilla were controlled using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy (for methodological details of FTIR spectroscopic analyses, see [4,5]).

This study was supported in part by the Russian Science Foundation (grant 22-26-00142).

[1] A.A. Kamnev and A.V. Tugarova, *Talanta* **174**, 819–837 (2017).
[2] A.A. Kamnev and A.V. Tugarova, *Russ. Chem. Rev.* **90** (11), 1415–1453 (2021).
[3] A.A. Kamnev, A.V. Tugarova, A.G. Shchelochkov, K. Kovács and E. Kuzmann, *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.* **229**, 117970 (2020).
[4] A.A. Kamnev, Yu.A. Dyatlova, O.A. Kenzhegulov, A.A. Vladimirova, P.V. Mamchenkova and A.V. Tugarova, *Molecules* **26**, 1146 (2021).
[5] A.V. Tugarova, Yu.A. Dyatlova, O.A. Kenzhegulov and A.A. Kamnev, *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.* **252**, 119458 (2021).

МОЛЕКУЛЯРНО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ И ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КЛЕТКАХ БАКТЕРИЙ ПРИ ВЫСУШИВАНИИ

А.А. Камнев[1*], А.В. Тугарова[1], К. Ковач[2], Э. Кузманн[2]

[1] *Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов – обособленное структурное подразделение ФГБУН ФИЦ СНЦ РАН, Саратов, Россия*
[2] *Институт химии, Университет им. Л. Этвеша, Будапешт, Венгрия*
**e-mail: aakamnev@ibppm.ru; a.a.kamnev@mail.ru*

Получаемые методами микробной биотехнологии препараты, содержащие высушенные живые культуры бактерий широко применяются во многих отраслях промышленности. Методом мёссбауэровской спектроскопии (**МС**) было показано, что у многих бактерий ассимиляция Fe^{III} из среды происходит за счет его восстановления до Fe^{II}, накапливающегося в метаболически активных клетках (в виде различных комплексов), достигая заметной доли от общего клеточного Fe. В наших иследованиях агробиотехнологически важных бактерий рода *Azospirillum* методом МС показано, что клетки различных штаммов азоспирилл (выращенные с нитрилотриацетатным комплексом $^{57}Fe^{III}$ в качестве единственного источника Fe) к концу логарифмической фазы роста (~18 ч) накапливали от 22% $^{57}Fe^{II}$ (рис.1, спектр А) до 33% Fe^{II} от всего клеточного железа (см. обзоры [1,2] и цитируемые в них работы). Однако для высушенной биомассы было обнаружено, что содержание Fe^{II} в клетках для обоих штаммов уменьшилось до ~3% (см. рис. 1, спектр В).

Мёссбауэровские измерения при $T = 5$ K показали, что часть Fe^{II}, окислившаяся до Fe^{III} в процессе высушивания, оставалась парамагнитной (см. рис. 1, спектр С) и, таким образом, отличалась от Fe^{III} в ферритиноподобных белках (см. магнитно расщепленную компоненту на рис. 1, спектр С). В метаболически активных клетках возможные повреждения, вызываемые активными формами кислорода, образующимися в процессах типа реакции Фентона (взаимодействие H_2O_2 с Fe^{II}), контролируются и могут быть предотвращены; однако в покоящихся клетках (сухой биомассе живых бактерий) присутствие высоких концентраций Fe^{II} может быть опасным [3]. Таким образом, возможность для клеточного железа(II) в значительной степени окисляться до Fe^{III} при высушивании, впервые отмеченная в нашей работе [3], может представлять собой естественную стратегию предотвращения подобного окислительного повреждения для клеток, которые подвергаются обезвоживанию. Этот новый эффект важен для понимания состояния соединений железа и их редокс-превращений при получении широко используемых препаратов сухих бактерий.

Соответствующие структурные превращения в сухих клетках, включая накопление поли-3-гидроксибутирата (резервного биополимера) в различных условиях (биопленки, планктонные культуры) контролировали методом инфракрасной (ИК) фурье-спектроскопии (методологические детали ИК-фурье-спектроскопических анализов обсуждались ранее [4,5]).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-26-00142).

BIOMEDICAL APPLICATIONS OF GrO-FERRITE NANOCOMPOSITES AND CORE/SHELL NANOSTRUCTURES: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATIONS

A.S. Kamzin*

Ioffe institute RAS, 194021, 26 Politekhnicheskaya, St-Petersburg 194021, Russian Federation
**e-mail: ASKam@mail.ioffe.ru*

All The work is devoted to the study of the magnetic structure, phase composition of Graphene-Ferrite (G-F) nanocomposites (NC) and the Core/Shell (C/S) type nanostructures (NS). Interest in these materials is determined by the prospects of their use in biomedicine (see [1-4] and references therein). The main method used for research was Mössbauer spectroscopy (MS), because MS is a highly sensitive and effective means of studying the phase states and magnetic structure of both complex composites and individual components that make up complex magnetic structures as C/S. MS gives possibility to obtain information that is inaccessible to other methods.

The C/S type NS consist of a core, which can have high magnetic moment (for example, iron or others). The core is covered with a magnetic sheath with good biocompatibility. G-F NC consist of graphene and spinel ferrites (for ex. Fe_3O_4, $CoFe_2O_4$). Main advantage of such materials is their versatility, as well as the ability to optimize the physical and chemical properties of the material. Advances in nanotechnology make it possible to manufacture these multifunctional nanomaterials.

In this report describes the results of studies of graphene - various ferrites NC synthesized by the method of ball milling. As shown by Mössbauer studies the magnetic G-F NC synthesized by the ball milled method contain phases identified as spinels and as iron carbides and iron-depleted carbon clusters that were not detected by X-ray diffraction. Those G-F NC were able to retain the functional groups of graphene oxide. The efficacy of the magnetic nanocomposites for killing of cancerous cells is studied in vitro using HeLa cells in the presence of an Alternating Current magnetic field.

In the case of Fe_3O_4 / α-Fe_2O_3 NS of the C/S type, it was established that they consist of a magnetite (Fe_3O_4) core and a maghemite (γ-Fe_2O_3) shell. On the surface of the shell is formed a layer, in which the spin magnetic moments are canted relative to the moments in-side the shell. Between the core and the shell is formed an intermediate layer in the spin-glass state.

As a result of this research, the dependence of the properties of G-F NC and C/S NS on the synthesis technology and particle size was shown, the interaction of the components and their influence on each other, as well as the phase state and magnetic structure, which significantly affect the properties of G-F NC and C/S NS.

[1] A. S. Kamzin a.o., Phys. Sol. State 62, 2167 (2020)
[2] A. S. Kamzin a.o., Phys. Sol. State 63, 807 (2021)

БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ GrO-ФЕРРИТ И НАНОСТРУКТУР ТИПА ЯДРО/ОБОЛОЧКА: СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКИ

А.С. Камзин*

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
**e-mail: ASKam@mail.ioffe.ru*

Работа посвящена изучению магнитной структуры, фазового состава нанокомпозитов (НК) типа графен-феррит (Г-Ф) и наноструктур (НС) типа ядро/оболочка (C/S). Интерес к этим материалам определяется перспективами их использования в биомедицине (см. [1-4] и ссылки в них). Основным методом исследований была мессбауэровская спектроскопия (МС), поскольку МС является высокочувствительным и эффективным средством изучения фазовых состояний и магнитной структуры как сложных композитов, так и отдельных компонентов, составляющих сложные магнитные структуры типа C/S. МС дает возможность получить информацию, недоступную другим методам.

НС типа C/S состоящие из ядра, которое может иметь большой магнитный момент (например, железо или др.). Ядро покрыто магнитной оболочкой обладающей хорошей биосовместимостью. Г-Ф НК состоят из графена и ферритов-шпинелей (например, Fe_3O_4, $CoFe_2O_4$). Основным преимуществом таких материалов является их универсальность, а также возможность оптимизировать физические и химические свойства материала. Достижения в области нанотехнологий позволяют создавать такие многофункциональные наноматериалы для различных применений в области биомедицины.

В данном сообщении описаны результаты исследований НК графен-различных ферриты (Г-Ф), синтезированных методом перемола в шаровой мельнице. Как показали мессбауэровские исследования, магнитные НК Г-Ф, синтезированные перемолом в шаровой мельнице, содержат фазы, идентифицированные как шпинели, а также фазы, которые не были обнаружены рентгенографической дифракцией, это карбиды железа и обедненные железом углеродные кластеры. Полученные Г-Ф НК смогли сохранить функциональные группы оксида графена. Эффективность магнитных нанокомпозитов для уничтожения раковых клеток изучается in vitro с использованием клеток HeLa в присутствии переменного магнитного поля.

В случае НС $Fe_3O_4/\alpha\text{-}Fe_2O_3$ типа C/S установлено, что они состоят из ядра, являющегося магнетитом (Fe_3O_4) и оболочки из маггемита ($\gamma\text{-}Fe_2O_3$). На поверхности оболочки образуется слой, в котором спиновые магнитные моменты наклонены относительно моментов внутри оболочки (скошенная спиновая структура). Между ядром и оболочкой образуется промежуточный слой в состоянии спинового стекла.

В результате проведенных исследований была показана зависимость свойств Г-Ф НК и C/S НС от технологии синтеза и размера частиц, взаимодействия компонентов и их влияния друг на друга, а также фазового состояния. структуры, которые существенно влияют на свойства Г-Ф НК и C/S НС.

[1] А. С. Камзин и др., ФТТ 62, 1715 (2020)
[2] А. С. Камзин и др., ФТТ 63, 900 (2021)

NANOSIZED IRON CORES IN FERRITIN AND ITS PHARMACEUTICAL ANALOGUES: OBSERVATION OF THE UNUSUAL TEMPERATURE DEPENDENCIES OF MÖSSBAUER PARAMETERS

I.V. Alenkina[1*], E. Kuzmann[2], I. Felner[3], V.K. Kis[4], D.V. Belyaev[1], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation*
[2]*Laboratory of Nuclear Chemistry, Institute of Chemistry, Eötvös University, Budapest, Hungary*
[3]*Racah Institute of Physics, The Hebrew University, Jerusalem, Israel*
[4]*Centre for Energy Research, Budapest, Hungary*
**e-mail: alenkina-ira@mail.ru*

Ferritin, an iron-storage protein, consists of a hollow spherical multi-subunit protein shell with an internal cavity of ~8 nm which contains a nanosized ferrihydrite core (approximate formulae are $5Fe_2O_3 \times 9H_2O$ or $(FeOOH)_8(FeO{:}OPO_3H_2)$) (see, e.g., [1] and references therein). Iron in ferritin is accumulated in non-toxic bioavailable form and its deficiency requires a treatment with iron-containing pharmaceuticals. Some of them can be considered as ferritin analogues. Studied materials have similar macromolecular structure with nanosized akaganéite (β-FeOOH) or ferrihydrite-like cores with the size of up to 10 nm coated with polymaltose. However, no exact information exists about the iron core structure in both ferritin and its analogues.

Therefore, the study of lyophilized human liver ferritin and its pharmaceutical iron-polymaltose analogues, namely, Ferrum Lek, Maltofer® and Ferrifol® were performed using: (i) Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution (4096 channels) at 295–90 K, (ii) Mössbauer spectroscopy with a low velocity resolution (256 channels after folding) at 83–20 K, (iii) magnetization M(T) measurements and (iv) HRTEM analysis. All Mössbauer spectra at 295–90 K were similar and better fitted within the heterogeneous iron core model [2, 3], using 5 quadrupole doublets with equal line widths (Fig. 1 *a*) with a good consistency for all temperatures in the range. At low temperature range, the Mössbauer spectra of these samples were different: the spectrum of ferritin remained almost paramagnetic down to 20 K, whereas in the spectra of ferritin analogues magnetic hyperfine splittings appeared around 60–40 K, as shown in Fig. 1 *b, c*.

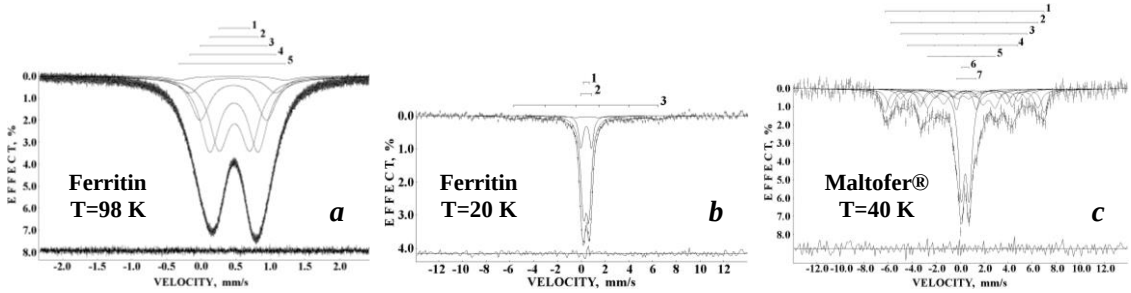


Fig. 1. Selected Mössbauer spectra of ferritin and Maltofer®. Indicated components are the results of the best fits. The differential spectra are shown on the bottom

Obtained components (1–5) in the Mössbauer spectra measured at 295–90 K were associated with ^{57}Fe in various layers/regions in the nanosized iron cores, which have different sizes and FeOOH packing, in both ferritin and its analogues. This was confirmed by HRTEM images which indicate variations of the lattice periodicity.

The unusual temperature dependencies of some Mössbauer parameters were revealed and analyzed within the fitting model. Both the low temperature Mössbauer spectra and magnetization (ZFC/FC) measurements indicated that relaxation effects cannot be the main reason of observed anomalies. Therefore, these anomalous temperature dependences were related to the low temperature structural rearrangements in different layers/regions of the iron cores in ferritin and its analogues. Variations in the ^{57}Fe hyperfine parameters of spectral components were attributed to different ^{57}Fe microenvironments in various layers/regions of the iron cores in each sample.

Moreover, small differences in the ^{57}Fe hyperfine parameters were observed between the same components in the Mössbauer spectra of ferritin and its analogues showing small variations in the iron local microenvironments among the iron cores in the studied samples.

Acknowledgement. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project № FEUZ-2020-0060).

[1] E.C. Theil, R.K. Behera and T. Tosha, *Coord. Chem. Rev.*, **257**, 579–586 (2013).
[2] M.I. Oshtrakh, I.V. Alenkina, Z. Klencsár, E. Kuzmann and V.A. Semionkin, *Spectrochim. Acta, Part A: Molec. and Biomolec. Spectroscopy*, **172**, 14–24 (2017).
[3] I.V. Alenkina, V. Kovacs Kis, I. Felner, E. Kuzmann, Z. Klencsár and M.I. Oshtrakh, *J. Inorg. Biochem.* **213**, 1112020 (2020).

НАНОРАЗМЕРНЫЕ «ЖЕЛЕЗНЫЕ ЯДРА» ФЕРРИТИНА И ЕГО ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ: ВЫЯВЛЕНИЕ АНОМАЛЬНЫХ ТЕМПЕАРТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ ПАРАМЕТРОВ

И.В. Аленькина[1*], Э. Кузманн[2], И. Фелнер[3], В.К. Киш[4], Д.В. Беляев[1], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*
[2]*Институт химии, Университет им. Л. Этвеша, Будапешт, Венгрия*
[3]*Институт физики Ракаха, Иерусалимский университет, Иерусалим, Израиль*
[4]*Центр энергетических исследований, Будапешт, Венгрия*
**e-mail: alenkina-ira@mail.ru*

Ферритин – железосодержащий белок, состоящий из белковой оболочки, внутри которой содержится наноразмерное «железное ядро» (варианты композиции $5Fe_2O_3{\times}9H_2O$ и $(FeOOH)_8(FeO{:}OPO_3H_2)$ [1]. Железо накапливается в ферритине в нетоксичной биологически доступной форме, а его дефицит требует медикаментозной коррекции с помощью фармацевтических препаратов. Некоторые из них могут рассматриваться в качестве синтетических аналогов ферритина. Исследованные в данной работе препараты имеют схожую с ферритином макроструктуру и состоят из «железных ядер» в виде акагенита или ферригидрита размером до 10 нм, покрытых оболочкой из полимальтозы. Однако, точная структура «железных ядер» до сих пор не известна.

Поэтому было проведено исследование выделенного ферритина печени человека и его аналогов – препаратов Феррум Лек, Мальтофер® и Феррифол® методами (i) Мессбауэровской спектроскопии с высоким скоростным разрешением (в 4096 каналов) при 295–90 K; (ii) Мессбауэровской спектроскопии с низким скоростным разрешением (в 256 каналов) при 83–20 K; (iii) магнитных измерений и (iv) HRTEM. Все спектры, полученные при 295–90 K, были идентичны и аппроксимированы в рамках модели гетерогенного «железного ядра» [2, 3] суперпозицией 5 квадрупольных дублетов с равной шириной линии (Рис. 1). При 83–20 K были получены отличия: спектр ферритина оставался парамагнитным до 20 K, а в спектрах препаратов были выявлены магнитные секстеты уже при 60–40 K.

Компоненты наилучшей аппроксимации были связаны с различными областями «железных ядер», отличающимися по размерам и плотности упаковки. Полученные данные хорошо согласуются с результатами HRTEM, показавшими отличия в расположении слоев «железных ядер». Выявленные аномальные температурные зависимости мессбауэровских параметров были проанализированы в рамках модели гетерогенного «железного ядра». С помощью магнитных измерений ZFC/FC было показано, что влияние магнитной релаксации не является определяющим при возникновении аномального поведения мессбауэровских параметров. Поэтому было сделано предположение о возникновении низкотемпературных структурных перестроек в областях «железных ядрах», а обнаруженные отличия параметров сверхтонкой структуры ^{57}Fe были связаны с различиями микроструктуры локального окружения ^{57}Fe.

TESTING OF THE IRON STATE IN OUTDATED PHARMACEUTICALS USING MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

D.V. Belyaev[1*], I.V. Alenkina[1], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
**e-mail: danil.belyaev08@gmail.com*

There are different types of iron-containing pharmaceutical products by now. For example, pharmaceuticals, which are used for treatment of iron deficiency anemia, vitamins and dietary supplements, which are used for supporting the iron status in the body, etc. These pharmaceuticals contain ferrous and ferric compounds such as ferrous sulfate $FeSO_4$, ferrous fumarate $FeC_4H_2O_4$, iron glycinate, iron citrate, akaganéite β-FeOOH, ferrihydrite $5Fe_2O_3 \cdot 9H_2O$ and other compounds. Different iron containing pharmaceuticals were successfully studied by ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy for analysis of the iron state (see, e.g., [1–5]). Mössbauer spectroscopy appeared to be a useful tool to study iron-containing pharmaceuticals as well as to reveal additional minor ferrous and ferric compounds in medicaments. There is a question concerning pharmaceuticals ageing: would iron compounds have any differences after expire date in comparison with the fresh samples? This information may be useful for the analysis of quality and stability of the iron-containing compounds in pharmaceutical products. It is also interesting to know the possibility of further use the iron compounds in pharmaceuticals after expire date for additional studies. Therefore, in the presenet work we compare results of some previously measured fresh and new measured outdated samples of pharmaceutical products.

The room temperature Mössbauer spectrum of outdated Ferrum Lek containing nanosized iron cores in the form of β-FeOOH is shown in Fig. 1. That spectrum was better fitted using the heterogeneous iron core model developed in [5]. Spectrum was decomposed using five quadrupole doublets with the same line widths which were varied during the fits. The ^{57}Fe hyperfine parameters for all components 1–5 correspond to ferric iron with similar isomer shifts and different quadrupole splitting. These results are almost the same as data obtained for the fresh Ferrum Lek in [5]. The room temperature Mössbauer spectrum of outdated vitamins Feosol® containing $FeSO_4$ (Fig. 1) was better fitted using 3 quadrupole doublets with different ^{57}Fe hyperfine parameters. Components revealed in the spectrum of Feosol® correspond to ferrous sulfate 1 (~65.5%) and two ferrous compounds 2 (~29.9%) and 3 (~4.6%). However Mössbauer spectrum of fresh sample was better fitted using 2 quarupole doublets [2]. One doublet associated with ferric compound and other doublet is assigned to ferrous compound. So, it is possible that longer ageing of this pharmaceutical might lead to significant modifications of $FeSO_4$. On the other hand, the spectrum of Centrum® (Fig. 1) containing ferrous fumarate appeared to be the same as the first one for the fresh sample in [2]. Thus, there are some stable and unstable ferric and ferrous compounds in iron-containing pharmaceutical products.

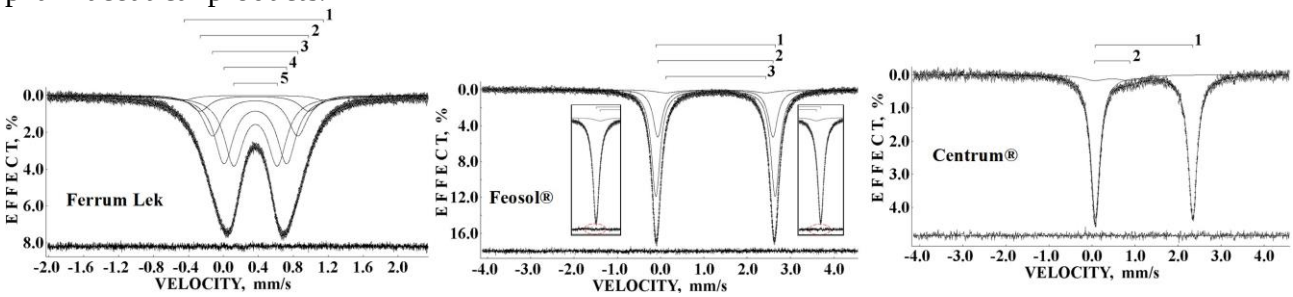


Fig. 1. Mössbauer spectrum of outdated Ferrum Lek, Feosol® and Centrum® measured in 4096 channels. Indicated components are the results of the best fits. Insets demonstrate misfits for the Feosol® spectrum decomposition with two quadrupole doublets. The differential spectra are shown on the bottom.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project # FEUZ-2020-0060.

[1] M. Sud, N. Bala, Liveleen, Vishwamittar and S.P. Puri, *Indian J. Pure Appl. Phys.*, **26**, 701–704 (1988).
[2] M.I Oshtrakh, O.B Milder, V.A Semionkin. *Anal. Chim. Acta.*, **506**, 155–160 (2004).
[3] M.I. Oshtrakh, O.B. Milder, and V.A. Semionkin, *J. Pharm. Biomed. Anal*. **40**, 1281– (2006).
[4] P.I.S. Arredondo, C.A. Barrero, K.E. Garcia and J.M. Grenèche, *Polyhedron*, **105**, 27–34 (2016).
[5] M.I. Oshtrakh, I.V. Alenkina, Z. Klencsár, E. Kuzmann, and V.A. Semionkin, *Spectrochim. Acta, Part A: Molec. and Biomolec. Spectroscopy*, **172**, 14–24 (2017).

ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ С ИСТЕКШИМ СРОКОМ ГОДНОСТИ ПО ДАННЫМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Д.В. Беляев[1*], И.В. Аленькина[2], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, 620002, Российская Федерация*
**e-mail: danil.belyaev08@gmail.com*

В настоящее время существуют различные виды железосодержащих фармацевтических препаратов. Например, лекарственные препараты, применяемые для лечения железодефицитной анемии, витамины и БАДы, применяемые для поддержания уровня железа в организме и др. Эти препараты содержат двух- и трехвалентное железо в форме сульфата железа $FeSO_4$, фумарата железа $FeC_4H_2O_4$, акаганеита β-FeOOH, ферригидрита $5Fe_2O_3{\cdot}_9H_2O$ и др. Мессбауэровская спектроскопия ^{57}Fe может быть использована для анализа состояния и структуры железосодержащих лекарственных препаратов [1–5]. Она позволяет выявлять двух- и трехвалентные примеси железа в лекарственных препаратах. Однако, возникает вопрос, связанный со старением лекарственным средств: будут ли соединения железа иметь какие-либо отличия после истечения срока годности по сравнению со свежими образцами? Данная информация может быть полезна для анализа качества и стабильности железосодержащих соединений в фармацевтических препаратах. Поэтому в настоящей работе мы сравнили результаты некоторых ранее измеренных свежих образцов и образцов фармацевтических препаратов с истекшим сроком годности, содержащих соединения двух- (сульфат железа, фумарат железа, хелаты железа) и трехвалентного железа (акаганеит).

Мессбауэровский спектр препарата Ferrum Lek с истекшим сроком годности, содержащий наноразмерные «железные ядра» в форме β-FeOOH, показан на рис. 1. Данный спектр был аппроксимирован на основании гетерогенной модели «железного ядра», разработанной в [5]. Аппроксимация осуществлялась суперпозицией 5 квадрупольных дублетов с одинаковыми ширинами линий, которые варьировались. Сверхтонкие параметры ядер ^{57}Fe для всех компонент 1–5 соответствуют Fe^{3+} с близкими величинами изомерного сдвига и разным квадрупольным расщеплением. Эти результаты практически совпадают с данными, полученными для свежего образца Ferrum Lek в [5]. Мессбауэровский спектр витаминов Feosol® с истекшим сроком годности, содержащих $FeSO_4$ (рис. 1), лучше всего был аппроксимирован с использованием 3 квадрупольных дублетов. Выявленные в спектре Feosol® компоненты соответствуют сульфату железа 1 (~65,5%) и двум соединениям двухвалентного железа 2 (~29,9%) и 3 (~4,6%). Однако мессбауэровский спектр свежего образца лучше всего был аппроксимирован с использованием 2-х квадрупольных дублетов [2]. Один из дублетов относится к Fe^{3+}, а другой дублет – к Fe^{2+}. Таким образом, возможно, что более длительное хранение этого препарата может привести к значительным модификациям в $FeSO_4$. С другой стороны, при аппроксимации мессбауэровского спектра препарата Centrum® не было выявлено новых спектральных компонент по сравнению со свежим образцом [2]. Таким образом, в железосодержащих фармацевтических продуктах присутствуют стабильные и нестабильные соединения двух- и трехвалентного железа.

A NEW METHOD OF MAGNETIC HYPERTHERMIA BASED ON FERROMAGNETIC RESONANCE

S.V. Stolyar[1,2,3], O.A. Li[1,2*], E.D. Nikolaeva[1], A.M. Vorotynov[1], D.A. Velikanov[1], Yu.V. Knyazev[1], O.A. Bayukov[1], R.S. Iskhakov[1]

[1] *FRC KSC SB RAS, Krasnoyarsk, Russia*
[2] *Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia*
[3] *Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS, Krasnoyarsk, Russia*
**e-mail: oali@sfu-kras.ru*

Currently, searches are underway for safe and effective components for hyperthermia, one of the auxiliary methods of cancer treatment due to a general or local increase in temperature to 41-45 ºC. In our work, we propose a new method for the implementation of magnetic hyperthermia: the heating of nickel ferrite particles is carried out as a result of ferromagnetic resonance - the selective absorption of the energy of an alternating electromagnetic field by ferromagnetic particles in an applied constant magnetic field.

Nickel ferrite $NiFe_2O_4$ nanoparticles 4 nm in size were synthesized by chemical deposition. After annealing, the average particle size became 63 nm. The particle magnetization curves are characterized by hysteresis with a coercivity of 140 Oe at 295 K.

The Mössbauer spectra of the studied samples were obtained by MS-1104Em spectrometer in transmission geometry with a Co^{57}(Rh) radioactive source at a temperature of 300 K. The spectra are sextets (Fig. 1, Table 1) corresponding to the structure of an inverse spinel.

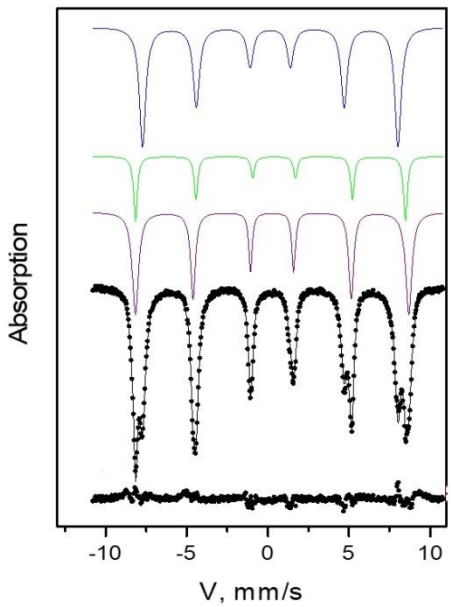


Fig. 1. Mössbauer spectrum of nickel ferrite

For practical applications, heating in a narrow temperature range is necessary. The degree of heating depends on the power absorbed and the duration of exposure. We have studied the time dependence of temperature increment ΔT of particles in an alternating magnetic field with a frequency of 8.9 GHz and amplitude h ~ 1 Oe at various values of a direct magnetic field H applied perpendicular to the alternating one. The fig. 2 shows the results of these studies. In all cases, we observe a sharp increase in temperature at the initial moment of time, followed by a decrease in the rate of temperature increment with reaching saturation ΔT_{max}. With an increase in the strength of the applied constant field, the heating of the particles increases to the maximum value ΔT_{max} = 8.2 K at a field strength H=2.29 kOe, with a further increase in the field strength, the heating of the particles decreases. In a field with a strength of 2.29 kOe, resonant absorption of the electromagnetic field is observed at a frequency of 8.9 GHz, as can be seen from the results of measuring the ferromagnetic resonance (FMR) (Fig. 3).

Thus, we have shown the possibility of a more efficient heating of nanoparticles due to the resonant absorption of the electromagnetic field energy, which may be promising for applications in magnetic hyperthermia.

Table 1. Mössbauer parameters of $NiFe_2O_4$ nanoparticles

IS, mm/s ±0.005	H_{hf}, kOe ±2	QS, mm/s ±0.02	W, mm/s ±0.02	A, ±0.03	Position
0.37	524	-0.01	0.26-0.46	0.39	Fe^{3+}(B)
0.38	518	-0.46	0.27	0.14	Fe^{3+}(B)
0.26	490	0	0.48	0.47	Fe^{3+}(A)

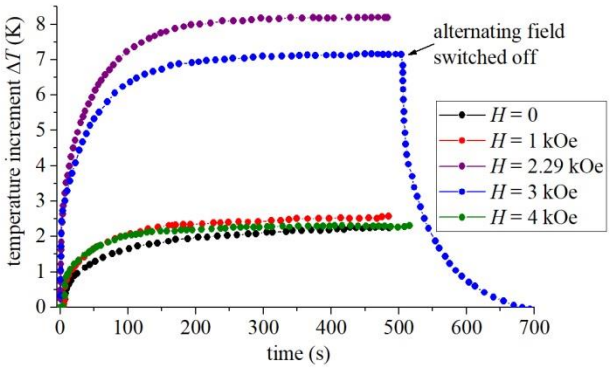


Fig. 2. Temperature increment.

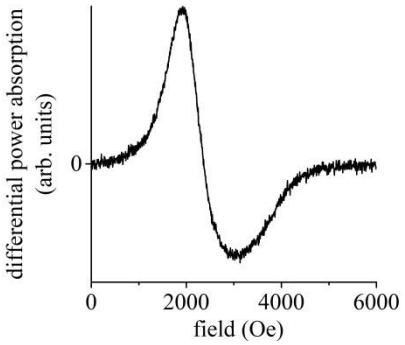


Fig. 3. FMR spectrum of $NiFe_2O_4$ nanoparticles at room temperature

НОВЫЙ МЕТОД МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

С.В. Столяр[1,2,3], О.А. Ли[1,2*], Е.Д. Николаева[1], А.М. Воротынов[1], Д.А. Великанов[1], Ю.В. Князев[1], О.А. Баюков[1], Р.С. Исхаков[1]

[1] *ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*
[2] *СФУ, Красноярск, Россия*
[3] *ИФ СО РАН, Красноярск, Россия*
**e-mail: oali@sfu-kras.ru*

В настоящее время ведутся поиски безопасных и эффективных компонентов для гипертермии - одного из вспомогательных способов лечения рака за счет общего или локального повышения температуры до 41-45 ºС. В нашей работе предлагается новый способ осуществления магнитной гипертермии: нагрев частиц никелевого феррита осуществляется в результате ферромагнитного резонанса - избирательного поглощения энергии переменного электромагнитного поля ферромагнитными частицами в приложенном постоянном магнитном поле.

Наночастицы феррита никеля $NiFe_2O_4$ размером 4 нм получены методом химического осаждения. После отжига средний размер частиц составляет 63 нм. Кривые намагничивания частиц характеризуются гистерезисом с коэрцитивной силой 140 Э при 295К.

Мёссбауэровские спектры исследуемых образцов получены на спектрометре МС-1104Ем в геометрии пропускания с радиоактивным источником Co^{57}(Rh) при температуре 300 К. Спектры представляют собой секстеты (рис. 1, табл. 1), соответствующие структуре обращенной шпинели.

Для практических приложений, необходимо осуществлять нагрев частиц в узкой области температур. Величина нагрева зависит от поглощаемой мощности и продолжительности воздействия, как это показано на рисунке. Мы исследовали зависимости изменения температуры ΔT частиц от времени в переменном магнитном поле частотой 8,9 ГГц амплитудой ~1Э при различных значениях постоянного магнитного поля, приложенного перпендикулярно переменному. На рис. 2 приведены результаты этих исследований. Во всех случаях мы наблюдаем резкий рост температуры в начальный момент времени с последующим снижением скорости роста температуры с выходом на насыщение ΔT_{max}. С ростом напряженности приложенного постоянного поля увеличивается нагрев частиц до максимального значения ΔT_{max}= 8,2 К при напряженности поля H=2,29 кЭ, при дальнейшем увеличении напряженности нагрев частиц уменьшается. В поле напряженностью 2,29 кЭ наблюдается резонансное поглощение электромагнитного поля при частоте 8,9 ГГц, как это видно из результатов измерения спектров ферромагнитного резонанса (ФМР) (рис. 3).

STATIC AND DYNAMIC MAGNETIC PROPERTIES OF $CoFe_2O_4$ NANOPARTICLES

S.V. Stolyar[1,2,3*], O.A. Li[1,2], E.D. Nikolaeva[1], A.M. Vorotynov[1], D.A. Velikanov[1], Yu.V. Knyazev[1], O.A. Bayukov[1], R.S. Iskhakov[1], V.F. Pyankov[1]

[1] *FRC KSC SB RAS, Krasnoyarsk, Russia*
[2] *Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia*
[3] *Kirensky Institute of Physics, Federal Research Center KSC SB RAS, Krasnoyarsk, Russia*
**e-mail: stol@iph.krasn.ru*

The work is devoted to the synthesis and study of the magnetic properties of cobalt ferrite $CoFe_2O_4$ nanoparticles. These particles are considered as candidates for magnetic hyperthermia based on the phenomenon of ferromagnetic resonance (FMR).

Nanoparticles ~5 nm in size were synthesized by chemical deposition; after annealing, the particle size became 25–40 nm. The magnetization curves of annealed particles are characterized by hysteresis with a coercive force of 720 Oe at 297K and 11.3 kOe at 78K (Fig. 1). Mössbauer spectra of the studied samples were recorded on an MS-1104Em spectrometer in transmission geometry with a radioactive source Co^{57}(Rh) at a temperature of 300 K. The table 1 shows the spectrum parameters that are characteristic of cobalt ferrite.

Table 1. Mössbauer parameters of cobalt ferrite

IS, mm/s ±0.005	H_{hf}, kOe ±2	QS, mm/s ±0.02	W, mm/s ±0.02	A, ±0.03	Position
0.40	505	0.12	0.29-0.50	0.12	Fe^{3+}(B)
0.37	474	0.02	0.52	0.20	Fe^{3+}(B)
0.36	450	0	0.44-0.79	0.16	Fe^{3+}(B)
0.35	420	-0.12	0.62-1.63	0.20	Fe^{3+}(B)
0.28	485	0	0.43	0.18	Fe^{3+}(A)
0.22	472	-0.10	0.27-0.52	0.14	Fe^{3+}(A)

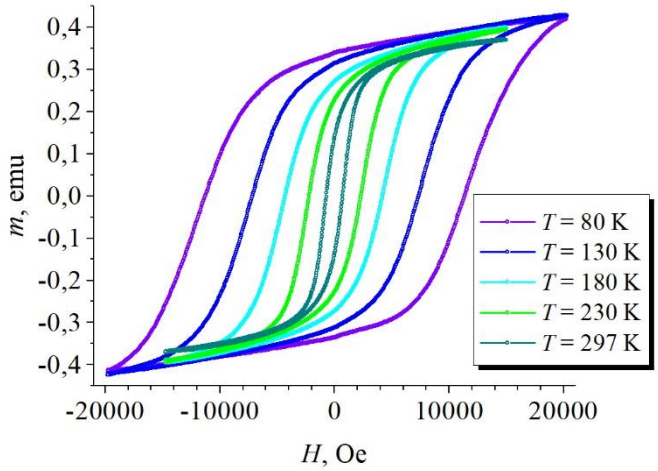


Fig.1 Hysteresis loops of $CoFe_2O_4$ powders recorded at different temperatures

Fig. 3 shows the curves of ferromagnetic resonance (SE/X-2544 spectrometer, f=8.9 GHz) of the studied $CoFe_2O_4$ powders at different temperatures. These curves indicate no absorption of microwave energy by powders in the FMR regime up to room temperature. Fig. 4 shows the dependences of particle temperature ΔT on time for various values of the constant magnetic field H in the microwave energy pumping mode on the SE/X-2544 spectrometer, f=8.9 GHz. (The temperature of the nanoparticles was measured using a T-type thermocouple: the positive electrode was made of copper (Cu), the negative electrode was made of constantan alloy (55% Cu + 45% Ni, Mn, Fe)). The highest value ΔT_{max}= 10 K was achieved in the absence of a constant magnetic field (H=0). As the field strength H increases, the heating of particles ΔT_{max} decreases. The largest increase in temperature in the absence of an external field can be explained by resonant microwave absorption in the internal field of nanoparticles due to the magnetic anisotropy field or natural ferromagnetic resonance.

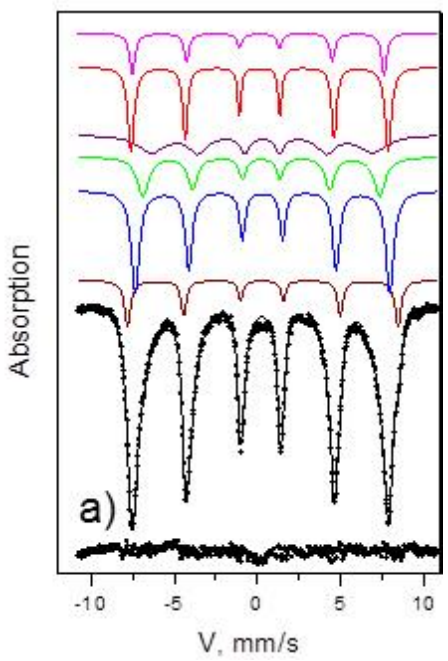


Fig. 2 Mössbauer spectrum of $CoFe_2O_4$ powder

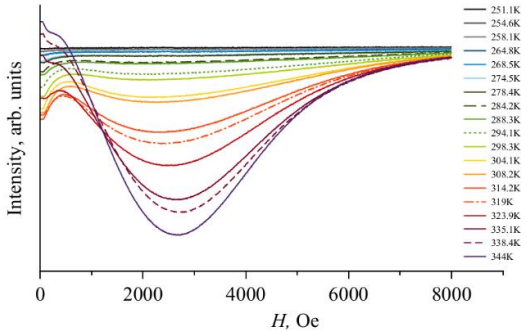


Fig. 3 FMR spectra recorded at different temperatures

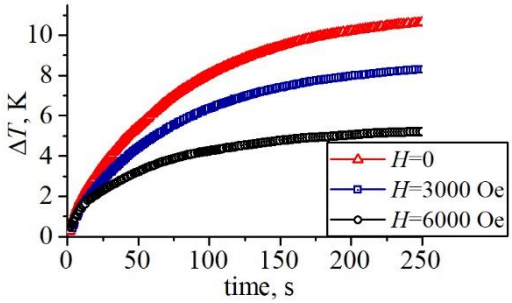


Fig. 4 Change in the temperature of $CoFe_2O_4$ powders at different magnetic fields during microwave pumping

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ $CoFe_2O_4$

С.В. Столяр[1,2,3*], О.А. Ли[1,2], Е.Д. Николаева[1], А.М. Воротынов[1], Д.А. Великанов[1], Ю.В. Князев[1], О.А. Баюков[1], Р.С. Исхаков[1], В.Ф. Пьянков[1]

[1] *ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*
[2] *СФУ, Красноярск, Россия*
[3] *ИФ СО РАН, Красноярск, Россия*
**e-mail: stol@iph.krasn.ru*

Работа посвящена изготовлению и исследованию магнитных свойств наночастиц феррита кобальта $CoFe_2O_4$. Данные частицы рассматриваются в качестве кандидатов для магнитной гипертермии, основанной на явлении ферромагнитного резонанса (ФМР).

Наночастицы размером ~5 нм получены методом химического осаждения, после отжига размер частиц составил 25-40 нм. Кривые намагничивания отожженных частиц характеризуются гистерезисом с коэрцитивной силой 720 Э при 297К и 11,3 кЭ при 78К (рис.1). Мёссбауэровские спектры исследуемых образцов получены на спектрометре МС-1104Ем в геометрии пропускания с радиоактивным источником Co^{57}(Rh) при температуре 300 К. В табл. 1 приведены параметры спектра, которые характерны для феррита кобальта.

На рис.3 приведены кривые ФМР (спектрометр SE/X-2544, f=8,9 ГГц) порошков $CoFe_2O_4$ при различных температурах. Данные кривые свидетельствуют о том, что поглощение СВЧ энергии порошков в режиме ФМР отсутствует практически до комнатных температур. На рис. 4 приведены кривые изменения температуры ΔT частиц от времени при различных значениях постоянного магнитного поля H в режиме накачки СВЧ энергии на спектрометре SE/X-2544, f=8,9 ГГц. (Измерение температуры наночастиц производилось с помощью термопары Т-типа: материал положительного электрода – медь (Cu), отрицательного электрода – сплав константан (55% Cu + 45% Ni, Mn, Fe)). Наибольшее значение ΔT_{max}= 10 К получено в отсутствие постоянного магнитного поля (H=0). При увеличении напряженности поля H нагрев частиц ΔT_{max} уменьшается. Наибольший рост температуры в отсутствие внешнего поля можно объяснить резонансным поглощением СВЧ во внутреннем поле наночастиц, обусловленном полем магнитной анизотропии или естественным ферромагнитным резонансом.

MÖSSBAUER SPECTROSCOPY STUDIES OF SOME DIETARY SUPPLEMENTS CONTAINING FERROUS BIS-GLYCINATE

A.L. Zinnatullin[1*], F.G. Vagizov[1]

[1]*Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan, Russia*
**e-mail: AlLZinnatullin@kpfu.ru*

Iron plays an important role in the human body. It is known that a significant part of the population suffers from a lack of this microelement [1]. To cover its deficiency, naturally, increasing the intake of iron-rich foods, as well as taking various drugs and dietary supplements, are needed. Generally, these drugs and dietary supplements are organic or inorganic salts. They can be divided according to the valence state of the active elements. Drugs containing ferric ions are less effective. At the same time, medicaments based on ferrous ions more often exhibit various side effects [2, 3]. An important role in biological efficiency is played not only by the valence state of iron ions, but also by their stability, binding energy with ligands, etc. [4]

Mössbauer spectroscopy is very useful in such studies. This is because this method makes it possible to determine the valence state of resonant atoms and to study their local environment. In addition, temperature-dependent studies allow to estimate the Debye temperature, which is a characteristic of the vibrational properties of resonant atoms. The resonant Mössbauer absorption is proportional to the iron content, thus the concentration of iron atoms in the materials under study may be determined also [5]. Mössbauer investigations have been carried out to study various iron-containing drugs based on ferrous sulfate, ferrous fumarate, etc. [6-10].

Here, we present the results of Mössbauer studies of some dietary supplements based on iron bisglycinate. As is known, medicaments based on this compound have a very high efficiency with low side effects [11-13]. The following commercially available dietary supplements were purchased, where, according to the manufacturers, the main active ingredient is iron bisglycinate: Iron Chelate (*Evalar*), Gentle Iron (*Solgar*), Gentle Iron (*Nature's Bounty*).

The results of Mössbauer spectroscopy show that, in addition to ferrous ions, the composition of the drugs includes various fractions of ferric ones. Moreover, the component corresponding to metallic iron is found in the spectrum of Gentle Iron (*Solgar*). The main components in the spectra of Iron Chelate (*Evalar*) and Gentle Iron (*Solgar*) have close hyperfine parameters, which suggest the similarity of these two phases. However, the components of the spectrum of Gentle Iron (*Nature's Bounty*) differ markedly from the components of the spectra of the two other dietary supplements both in terms of parameters and linewidth.

Unfortunately, there is no reliable information in the literature about Mössbauer studies of iron bisglycinate. Therefore, at the moment, it is impossible to show the correspondence of the components observed in the experimental spectra to iron bisglycinate itself, which increases interest in further studies of this compound and drugs based on it.

The work was supported by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the state assignment in the sphere of scientific activities (no. 0671-2020-0051).

[1] M.B. Zimmermann, R.F. Hurrell, Lancet **370**, 511-520 (2007).
[2] Nielsen O.H., Ainsworth M., Coskun M., Weiss G., Medicine **94**, e963-1-14 (2015).
[3] Iron. Fact Sheet for Health Professionals, The NIH Office of Dietary Supplements. https://ods.od.nih.gov/factsheets/Iron-HealthProfessional.
[4] T. Christides, D. Wray, R. McBride et al. Eur J Nutr. **54**, 1345–1352 (2015).
[5] G.K. Wertheim, Mössbauer Effect: Principles and Applications, Academic Press, (1964).
[6] M.I. Oshtrakh, O.B. Milder, V.A. Semionkin, Hyperfine Interactions. **156**, 273–277 (2004).
[7] M.I. Oshtrakh, V.A. Semionkin, O.B. Milder, E.G. Novikov, J Radioanal Nucl Chem. **281**, 63-67 (2009).
[8] M.I. Oshtrakh, O.B. Milder, V.A. Semionkin, Analytica Chimica Acta. **506**, 155-160 (2004).
[9] K.-G. Mariola, W. Marcin, Acta Physica Polonica. A. **159**, 1242-1244 (2016).
[10] P.I. Arredondo S., C.A. Barrero, K.E. Garcia, J.M.Greneche, Polyhedron. **105**, 27-34 (2016).

[11] M. Abbas, S. A. Abdelbadee, A. Alanwar, S. Mostafa, The Journal of Maternal-Fetal & Neonatal Medicine. **32**, 4139-4145 (2019).
[12] Ding, X. Zhang, K. Hayat et al., Journal of Food Engineering. **102**, 202-208 (2011).
[13] O. Pineda, H. De Wayne Ashmead, Nutrition. **17**, 381-384 (2001).

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК НА ОСНОВЕ БИСГЛИЦИНАТА ЖЕЛЕЗА

А.Л. Зиннатуллин[1*], Ф.Г. Вагизов[1]

[1]*Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия*
**e-mail: AlLZinnatullin@kpfu.ru*

Железо играет важную роль в организме человека. При этом известно, что ощутимая доля населения в той или иной мере страдает недостатком этого микроэлемента [1]. Чтобы покрыть его недостаток, естественно нужно увеличить потребление богатой железом пищи, а также принимать разные лекарственные препараты и биологически активные добавки (БАДы). Эти лекарства и БАДы, представляющие собой, как правило, соли органических или неорганических кислот, можно разделить по валентному состоянию активных элементов. Препараты, содержащие трёхвалентное железо, обладают меньшей эффективностью. В то же время препараты на основе двухвалентного железа более часто проявляют различного рода побочные эффекты [2, 3]. Важную роль в биологической эффективности играют, помимо валентного состояния ионов железа, их стабильность, энергия связи с лигандами и т.д. [4]

Мёссбауэровская спектроскопия является весьма информативна в таких исследованиях. Это связано с тем, что данный метод позволяет определять валентное состояние резонансных атомов, исследовать их локальное окружение. Помимо этого температурные исследования позволяют оценивать температуру Дебая, что является мерой колебательных свойств резонансных атомов. Резонансное мёссбауэровское поглощение пропорционально количеству железа, что позволяет определять концентрацию атомов железа в медикаментах [5]. Ранее были проведены мёссбауэровские исследования различных железосодержащих лекарственных препаратов на основе сульфата железа, фумарата железа и т.д.. [6-10].

В данной работе мы приводим результаты мёссбауэровских исследований некоторых БАД на основе бисглицината железа. Как известно, препараты на основе этого соединения обладают весьма высокой эффективностью при низкой частоте побочных эффектов [11-13]. Были приобретены следующие коммерчески доступные БАДы, где, как указывают производители, основным действующим веществом является бисглицинат железа: «Железо Хелат» (*Эвалар*), «Gentle Iron» (*Solgar*), «Gentle Iron» (*Nature's Bounty*).

Мёссбауэровские результаты показывают, что в препаратах помимо двухвалентных ионов железа содержатся в той или иной мере трехвалентные ионы этого элемента, а в спектре «Gentle Iron» (*Solgar*) обнаруживается компонента, соответствующая металлическому железу. Главные компоненты в спектрах препаратов «Железо Хелат» (*Эвалар*) и «Gentle Iron» (*Solgar*) имеют близкие сверхтонкие параметры, что позволяет предположить о схожести этих двух фаз. Однако компоненты спектра препарата «Gentle Iron» (*Nature's Bounty*) заметно отличаются от компонент спектров двух других БАДов как параметрами, так и шириной линий.

К сожалению, в литературе нет достоверной информации о мёссбауэровских исследованиях бисглицината железа. Поэтому на данный момент невозможно указать соответствие наблюдаемых в экспериментальных спектрах компонент к собственно бисглицинату железа, что повышает интерес к дальнейшим исследованиям этого соединения и препаратов на его основе.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 0671-2020-0051).

Секция 5

СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ГАММА-ОПТИКА

Section 5

SYNCHROTRON RADIATION AND GAMMA OPTICS

MÖSSBAUER REFLECTIVITY SPECTRA IN INVESTIGATION OF ULTRATHIN $YFeO_3$ FILMS AT ESRF

M.A. Andreeva[1*], R.A. Baulin[1], A.P. Nosov[2], I.V. Gribov[2], V.V. Izyurov[2], O.A. Kondratev[3], I.A. Subbotin[3], E.M. Pashaev[3]

[1]*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, Russia*
[2]*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics RAS, Ekaterinburg, Russia*
[3]*National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia*
**e-mail: Mandreeva1@yandex.ru*

Yttrium orthoferrite $YFeO_3$ possesses simultaneously weak ferromagnetic and ferroelectric properties and along other potential technological applications is considered as one of the most promising materials for antiferromagnetic (AF) spintronics. A wide variety of magnetic phenomena in $YFeO_3$ like spin reorientations provokes much interest [1]. Most of the up-to-date studies of $YFeO_3$, compounds were carried out for bulk samples, while modern technologies require thin films in which the evolution of magnetic properties with thickness may not be straightforward.

We investigated ultrathin $Y^{57}FeO_3$ films prepared by magnetron sputtering on *r*-Al_2O_3 substrates at IMP RAS (Ekaterinburg). The wedge-shaped samples had gradually varying thicknesses in the ranges of 2.5-4.1 nm, 06-11 nm, 08-23 nm and 23-40 nm. Mössbauer spectra were obtained by Mössbauer reflectivity method using Synchrotron Mossbauer Source (SMS) at the ESRF ID18 beamline in the temperatures ranges from 3.5 K to 273 K and from 273 K to 700 K.

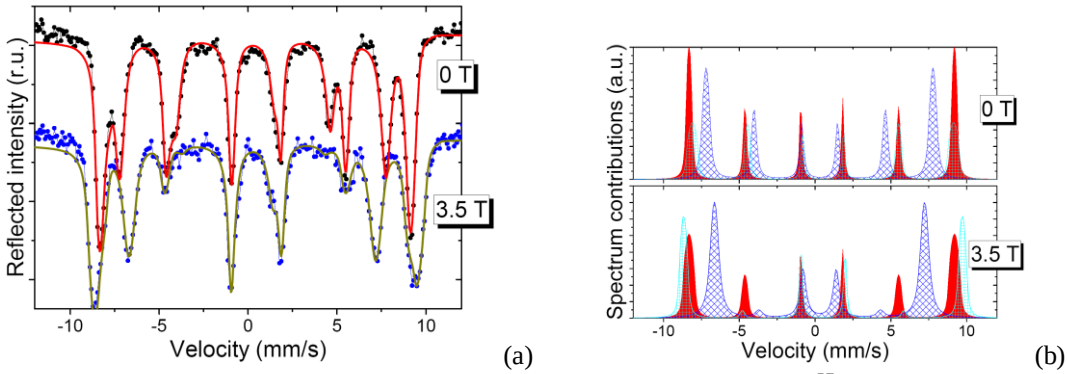


Fig. 1. (a) Reflectivity spectra measured at grazing angle θ=2.1 mrad for ~40 nm $Y^{57}FeO_3$ film at 3.6 K without an external magnetic field (top spectrum) and with the 3.5 T field applied along the synchrotron beam (bottom spectrum). The spectra are vertically shifted for clarity. Symbols are the experimental data, lines represent the fit. (b) Fit results: the multiplets contributed to the calculated reflectivity spectra. Dashed subspectra correspond to YIG. Spectra treatment was done using our REFSPC program pack [2].

In addition to the sextet belonging to $YFeO_3$ Mössbauer reflectivity spectra show some unexpected additional sextet corresponding to a smaller magnetic hyperfine field (Fig. 1). Variations of the spectra with a temperature and under the application of an external field permitted to ascertain that at least 3 sextets characterize all spectra in different proportion subject to the $YFeO_3$ film thickness. Mössbauer parameters for the two additional sextets correspond to the ferrimagnetic $Y_3Fe_5O_{12}$ garnet (YIG) [3], having two sites for Fe atoms (ortho- and tetrahedral ones) with occupation 2:3.

Under the action of the external field of 3.5 T, applied along the beam, the $YFeO_3$ sextet practically does not change the splitting. It can be concluded that the AF axis in $YFeO_3$ orients perpendicular to the external field. The two other sextets change the splitting in opposite ways: the effective fields on nuclei change from ~46.4 T to ~43 T and from ~53.4 T to ~57 T, i.e. the ferrimagnetic axis of YIG microcrystals is almost completely aligned along the external field.

Additional X-ray diffraction studies performed in the Kurchatov Institute for the $YFeO_3$ films with the similar thickness range reveal their *Pnma* crystalline structure with the largest **c**-axis (0.76032 nm) perpendicular to the film surface for the most of samples (but not for all ones). Additional reflections corresponding to $Y_3Fe_5O_{12}$ inclusions have been as well detected.

The authors are grateful to the ESRF administration and personally A.I. Chumakov for performing the firsthand measurements at ID18 (HC4300 proposal) during COVID restrictions. The research was supported in part by the Ministry of Science and Higher Education of RF (No. 075-15-2021-1350 and No. 075-15-2021-1353).

[1] G.W. Durbin, C.E. Johnson, M.F. Thomas, J. Phys. C: Solid State Phys. **8**, 3051-3057 (1975).
[2] http://www.esrf.eu/Instrumentation/software/data-analysis/OurSoftware/REFTIM-1.
[3] E. Varouti, E. Devlin, Y. Sanakis *et al.*, JMMM **495**, 165881 (2020).

МЁССБАУЭРОВСКИЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$ НА ESRF

М.А. Андреева[1*], Р.А. Баулин[1], А.П. Носов[2], В.В. Изюров[2], И.В. Грибов[2], О.А. Кондратьев[3], И.А. Субботин[3], Э.М. Пашаев[3]

[1]*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[3]*Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский Институт", Москва, Россия*
**e-mail: Mandreeva1@yandex.ru*

Ортоферрит иттрия $YFeO_3$ обладает слабо ферромагнитными и ферроэлектрическими свойствами и среди потенциальных технологических приложений важен для антиферромагнитной спинтроники Большой интерес вызывают разнообразные магнитные эффекты в $YFeO_3$, например, спин реориентационные переходы [1]. Большинство исследований выполнено для объемных образцов $YFeO_3$, в то время как современные технологии используют тонкие пленки, но в этих объектах изменение магнитных свойств с толщиной нетривиально.

Мы исследовали ультратонкие пленки $Y^{57}FeO_3$, полученные магнетронным напылением на подложке *r*-Al_2O_3 в ИФМ РАН. Клиновидные пленки имели градиентно-варьируемые толщины в пределах 2.5-4.1 нм, 06-11 нм, 08-23 нм, 23-40 нм. Мессбауэровские спектры измерялись методом рефлектометрии с использованием синхротронного мессбауэровского источника на ESRF (станция ID18) при температурах от 3.5 K до 273 K и от 273 K до 700 K.

Кроме секстета, представляющего $YFeO_3$, на спектрах отражения присутствует дополнительный секстет, соответствующий меньшему магнитному сверхтонкому полю (Рис. 1). Изменения спектров с температурой и под действием внешнего поля позволили выяснить, что по меньшей мере 3 секстета характеризуют все спектры в различной пропорции в зависимости от толщины $YFeO_3$ пленки. Мессбауэровские параметры для двух дополнительных секстетов соответствуют ферримагнетику $Y_3Fe_5O_{12}$ (YIG) [3], имеющему два положения для атомов Fe (орто- и тетраэдрический) с заселенностью 2:3.

Под действием внешнего магнитного поля 3.5 T, приложенного вдоль пучка, секстет $YFeO_3$ практически не изменяет расщепление. Можно заключить, что АФ ось в $YFeO_3$ ориентируется перпендикулярно внешнему полю. Два других секстета изменяют расщепление противоположным образом, эффективные поля на ядрах изменяются с ~46.4 T на ~43 T и с ~53.4 T на ~57 T, то есть ферримагнитная ось YIG выстраивается вдоль поля.

Дополнительные дифракционные измерения, проведенные в Курчатовском институте для $YFeO_3$ пленок аналогичных толщин, подтвердили наличие *Pnma* структуры, с наибольшей осью **c** (0.76032 nm) перпендикулярной поверхности пленки для большинства образцов (но не для всех). Были также обнаружены дополнительные рефлексы, соответствующие $Y_3Fe_5O_{12}$ включениям.

Авторы признательны администрации ESRF и персонально А.И. Чумакову за непосредственное проведение эксперимента на станции ID18 в период COVID ограничений. Работа частично поддержана грантами Министерства науки и образования Российской Федерации (№ 075-15-2021-1350 и № 075-15-2021-1353).

APPLICATION OF MÖSSBAUER SPECTROSCOPY TO STUDY ULTRASOUND VIBRATION OF WET GRANULAR MATERIALS

R.N. Shakhmuratov[1*], A.L. Zinnatullin[2], F.G. Vagizov[2]

[1]*Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, Russia*
[2]*Kazan Federal University, Kazan, Russia*
**e-mail: Shakhmuratov@mail.ru*

Wet granular materials have wide applications in geology, chemistry, pharmaceuticals, and many other industrial branches. Liquid between the grains in wet granular materials produces inter-grain cohesion, which has strong effect on the mechanical properties of these materials [1]. Rain-induced landslides, which are important in geology, mining, and construction industry, preparation of appropriate grain mixture from grains of different mechanical properties and chemical content playing role in food processing and pharmaceuticals are just a few examples where study of the mechanical response of granular matter with various degrees of wetness or liquid content on the external ecitation is very important.

We apply Mössbauer spectroscopy to study ultrasound vibration of wet granular material, whose pores are partially filled by resin. In our experiments we study small grains of the potassium ferrocyanide enriched by ^{57}Fe isotope. Mean size of the grains is 1.25 micron. We prepared a flat pile of the grains on the surface of a piezo polymer film, which is polyvinyl fluoride (PVDF, 28 μm thickness, model LDT0-28K, Measurement Specialties, Inc.). Pores between grains are partially filled by epoxy resin without hardener. The amount of resin was small enough to avoid the change of the shape of the grain pile. Thus, the sample is not overwet and voids are not completely filled in. Therefore, the epoxy resin is soaked in forming only bridges between the grains, which can be considered as a capillary bridge network. Meanwhile, the amount of resin was enough to reach the pile bed creating good mechanical contact between the grains and piezotransducer.

Mössbauer spectrum of the potassium ferrocyanide consists of a single line. Ultrasound vibration of grains transforms this line into a comb structure with frequency spacing between neighboring lines equal to the vibration frequency. We use vibration frequency of the piezotransducer equal to 12.72 MHz, which exceeds well the width of the parent line. We developed a model, which allows estimating the vibration amplitude of particles and decay of the ultrasound in the wet granular medium from Mössbauer spectrum. The proposed method is unique since it allows measuring subangstrom vibration amplitudes of particles [2,3]. The measured vibration amplitude of the powder bed changes from 17.6±0.4 pm to 293±8 pm with increase of the radiofrequency voltage applied to the piezotransducer.

It is known that the network of capillary bridges in wet granular materials has quite complicated form [4]. Therefore, ultrasound vibrations of grains connected by these bridges may have different paths. They fluctuate with elevated vibration power forming tortuous fastest acoustic paths and may cause force dependent local velocity fluctuations of grains [5]. Thus, the grains in the irregular network, linked by capillary bridges, vibrate along individual directions, which can be different from vertical axis of piezotransducer vibration. Therefore, Mössbauer spectra for gamma radiation traveling also along the vertical axis contain the information about the angle distribution between the vertical axis and individual vibration axis of the grain. Our method provides information about changes in the acoustical paths when vibration power increases showing nonmonotonous dependence of the vibration amplitude on radio- frequency voltage applied to the piezotransducer.

R.N.S. acknowledges the financial support from the government assignment for FRC Kazan Scientific Center of RAS.

[1] N. Mitarai and F. Nori, Advances in Physics **55**, 1-45 (2006).
[2] R.N. Shakhmuratov, F.G. Vagizov, Phys. Rev. B **95**, 245429 (2017).
[3] R.N. Shakhmuratov, F.G. Vagizov, JETP Letters **108**, 772-776 (2018).

[4] Z. Fournier,D. Geromichalos, S. Herminghaus, M. M. Kohonen, F. Mugele, M. Scheel, M. Schulz, B. Schulz, Ch. Schier, R. Seemann, and A. Skudelny, J. Phys.: Condens. Matter **17**, S477 (2005).
[5] C. Zhai, E. B. Herbold, and R. C. Hurley, PNAS **117**, 16234 (2020).

ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТА МЁССБАУЭРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ ВЛАЖНЫХ ГРАНУЛЯРНЫХ СРЕД

Р.Н. Шахмуратов[1*], А.Л. Зиннатуллин[2], Ф.Г. Вагизов[2]

[1] *Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, ФИЦ КазНЦ РАН*
[2] *Казанский федеральный университет*
**e-mail: Shakhmuratov@mail.ru*

Влажные гранулярные материалы имеют широкое применение в геологии, химии, фармацевтике и многих других отраслях промышленности. Жидкость между гранулами создает сцепление между ними, которое сильно влияет на механические свойства материала [1]. Оползни, вызванные дождем, которые нужно учитывать в геологии, горнодобывающей отросли и строительстве, приготовление нужных смесей из зерен с разными механическими и химическими свойствами в пищевой индустрии и фармацевтике – это далеко не полный перечень примеров, где необходимо знать влияние внешнего механического воздействия на гранулярные среды различной степени влажности.

В данной работе применяются методы мёссбауэровской спектроскопии для исследования ультразвуковых колебаний порошинок, частично смоченных смолой. Мы исследовали порошок ферроцианида калия, обогащенного ^{57}Fe. Средний размер порошинок 1,25 мкм. Порошок был насыпан тонким ровным слоем на поверхность пьзополимерной пленки поливинилфторида. Затем поры между порошинками были частично заполнены эпоксидной смолой без отвердителя. Количество смолы было подобрано так, чтобы пустоты между гранулами были заполнены не полностью, и порошок не расплывался. В этом случае эпоксидная смола создает мостики связи между зернами, которые можно рассматривать как капиллярную сеть мостиков. При этом количество смолы было достаточным, чтобы она достигала места соприкосновения порошинок с пьезопреобразователем для создания акустического контакта.

Мёссбауэровской спектр ферроционида калия имеет одиночную линию. Ультразвуковые колебания зерен трансформирует её в гребенку линий с периодом равным частоте колебаний. Мы возбуждаем пьезопреобразователь на частоте 12,72 МГц, существенно превышающую ширину исходной линии. Нами разработана модель, которая позволяет оценить амплитуду колебаний частиц и затухание ультразвука во влажной среде из анализа мёссбауэровского спектра. Предлагаемый метод уникален тем, что дает возможность измерять субангстремные амплитуды колебания частиц [2,3]. Найденная амплитуда колебаний порошинок, находящихся в контакте с пьезопреобразователем, изменяется от 17,6±0,4 пм до 293±8 пм с ростом напряжения радиочастотного генератора.

Известно, что капиллярная сеть мостиков во влажных гранулярных средах имеет достаточно сложную форму [4]. Благодаря этому ультразвуковые колебания зерен, соединенных этими мостиками, распространяются по извилистым путям, которые могут флуктуировать с увеличением интенсивности [5]. Зерна в такой сети могут колебаться вдоль различных направлений, отличающихся от вертикального направления колебаний пьезопреобразователя. Поэтому мёссбауэровские спектры гамма-излучения, распространяющегося тоже вдоль вертикального направления, содержат информацию о распределении углов между вертикальной осью и осями колебаний отдельных порошинок. Наш метод дает информацию об изменении акустических путей при увеличении амплитуды колебаний и немонотонную зависимость вертикальной компоненты колебаний с ростом напряжения РЧ генератора.

Работа Ш.Р.Н. проводилась в рамках выполнения госзадания ФИЦ КазНЦ РАН.

MÖSSBAUER REFLECTIVITY WITH POLARIZATION ANALYSIS FOR INTERPRETATION OF POORLY RESOLVED SPECTRA

R.A. Baulin[1*], M.A. Andreeva[1], M.A. Milyaev[2], D.A. Ponomarev[2], L.N. Romashev[2], V.V. Ustinov[2]

[1]*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[2]*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics UB RAS, 620990 Ekaterinburg, Russia*
**e-mail: baulin.roman@physics.msu.ru*

Polarization analysis plays dominant role in the X-ray spectroscopies intended for magnetic studies (XMCD, XMLD, XRMR etc.). In Mössbauer spectroscopy the splitting of resonant spectrum is accompanied by the polarization selection of absorbed or scattered γ –rays. That's why the ratio of line intensities in common Mössbauer spectrum characterizes the magnetization direction. However, the situation becomes more complicated when we work with nanostructures for which the broad distribution of hyperfine magnetic fields and Mössbauer spectra are poorly resolved [1].

To improve the resolution of poorly resolved Mössbauer spectra we propose to use polarization analysis of the reflected beam. The selection of π→σ` polarization component could reduce number of lines in Mössbauer reflectivity spectra [2] and allows to select the contributions from ferromagnetic phases excluding the contributions from phases with zero net magnetization (antiferromagnetic, paramagnetic, spin glass, etc...).

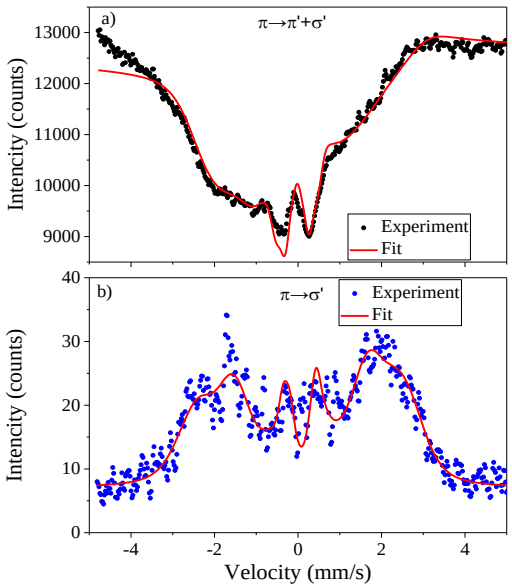


Fig. 1. Mössbauer π→π+σ` and π→σ` reflectivity spectra from [^{57}Fe(0.8 Å)/Cr(10.5 Å)]$_{30}$ cluster layered sample measured at 4K, 1 T

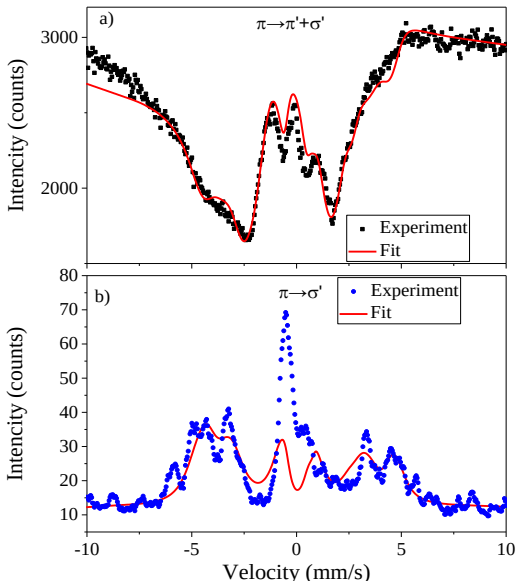


Fig. 2. Mössbauer π→π+σ` and π→σ` reflectivity spectra from [^{57}Fe(4 Å)/Cr(8.5 Å)]$_{30}$ multilayer sample measured at 4K, 1 T.

To demonstrate the advantages of polarization analysis we chose [^{57}Fe(0.8 Å)/Cr(10.5 Å)]$_{30}$ cluster layerd sample and [^{57}Fe(4 Å)/Cr(8.5 Å)]$_{30}$ multilayer sample with very smoothed Mössbauer reflectivity spectra even at 4 K (Fig 1.a and Fig 2.a). The experiment was performed at ID18 of ESRF with π-polarized incident radiation from Synchrotron Mössbauer Source (SMS). For polarization analysis of the reflected beam LiF (622) analyzer [3] was used. The samples were magnetized in the field of 1 T along the beam direction. Mössbauer spectra were measured at the angle θ=0.21˚. We observed that practically indistinguishable resonant lines at spectrum without polarization selection (Fig 1.a and Fig 2.a), are clearly seen in π→σ` spectrum (Fig 1.b and Fig 2.b). The contribution to π→σ` spectrum goes only from phases with phases with non-zero net magnetization aligned along external magnetic field.

The joint fit of two Mössbauer reflectivity spectra reveals that only 16% of iron atoms in [^{57}Fe(0.8 Å)/Cr(10.5 Å)]$_{30}$ are in ferromagnetically ordered state, the rest of the iron atoms are in the spin glass state [4].

The [^{57}Fe(4 Å)/Cr(8.5 Å)]$_{30}$ has antiferromagnetic interlayer (AF) coupling between iron (revealed by nuclear resonance reflectivity). At 1T magnetic field the 2nd and 5th lines are dominant

in π→π`+σ` Mössbauer spectrum due to spin flop effect: magnetization in AF coupled layers tends to align perpendicular to the external field. At π→ σ` spectrum contrariwise these lines are suppressed [2] and contributions to the spectrum goes only from small amount of nuclei with hyperfine fields having nonzero projection on the beam direction.

Authors are grateful to A.I. Chumakov and D. Bessas (ESRF) for helping with experiment.

[1] M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.I. Chumakov *et al*, JMMM **440**, 225 (2017).
[2] M. Andreeva, R. Baulin, A. Chumakov *et al*, Condensed Matter **4**, 8 (2019).
[3] M.A. Andreeva, R.A. Baulin, O.V. Slinko *et al*, J. Phys.: Conf. Ser. **1389**, 012016 (2019).
[4] R.A. Baulin, M.A. Andreeva, A.I. Chumakov *et al*, Moscow University Physics Bulletin **77**, 57 (2022).

МЁССБАУЭРОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ПЛОХОРАЗРЕШЕННЫХ СПЕКТРОВ

Р.А. Баулин[1], М.А. Андреева[1], М.А. Миляев[2], Д.А. Пономарев[2], Л.Н. Ромашев[2], В.В. Устинов[2]

[1]*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*
[2]*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Поляризация излучения играет доминирующую роль в рентгеновских магнитных исследованиях (XMCD, XMLD, XRMR и др.). В мёссбауэровской спектроскопии расщепление резонансного спектра сопровождается поляризационным отбором поглощаемых или рассеянных γ-квантов. Поэтому соотношение интенсивностей линий в обычном мёссбауэровском спектре характеризует направление намагниченности. Однако ситуация усложняется, когда мы работаем с наноструктурами для которых характерно широкое распределение сверхтонких магнитных полей и мёссбауэровские спектры плохо разрешены [1].

Для улучшения разрешения плохо разрешенных мёссбауэровских спектров предлагается использовать поляризационный анализ отраженного излучения. Селекция π→σ` поляризационной компоненты может уменьшить количество линий в мёссбауэровских спектрах [2] и позволяет выделить вклады ферромагнитных фаз, исключая вклады фаз с нулевой результирующей намагниченностью (антиферромагнитные, парамагнитные, спиновые стекла и т.д.)

Для демонстрации преимуществ поляризационного анализа мы выбрали кластерно-слоистый образец [^{57}Fe(0.8 Å)/Cr(10.5 Å)]$_{30}$ и многослойный образец [^{57}Fe(4 Å)/Cr(8.5 Å)]$_{30}$ с очень “смазанными” мёссбауэровскими спектрами даже при 4 К (рис. 1.a и рис. 2.a). Эксперимент проводился на ID18 ESRF с использованием π-поляризованного излучение от синхротронного мёссбауэровского источника (SMS). Для поляризационного анализа отраженного излучения использовался анализатор LiF (622) [3]. Образцы намагничивались в поле 1 Тл вдоль направления пучка. Мёссбауэровские спектры отражения измерялись при угле скольжения θ=0.21˚. Мы видим, что практически неразличимые резонансные линии на спектре без селекции по поляризации (рис. 1.a и рис. 2.a) отчетливо видны в спектре π→σ` (рис. 1.b и рис. 2.b). Вклад в π→σ` спектр вносят только фазы с ненулевой суммарной намагниченностью, ориентированные вдоль внешнего магнитного поля.

Совместная обработка мессбауэровских спектров отражения показывает, что только 16% атомов железа в образце [^{57}Fe(0.8 Å)/Cr(10.5 Å)]$_{30}$ находятся в ферромагнитно упорядоченном состоянии, остальные атомы железа находятся в спиновом состояние стекла [4].

Образец [^{57}Fe(4 Å)/Cr(8.5 Å)]$_{30}$ показывает наличие антиферромагнитного (АФ) межслойного упорядочения в слоях железа (выявлено ядерно-резонансной рефлектометрией) При магнитном поле 1 Тл в мёссбауэровском спектре π→π`+σ` доминируют 2-я и 5-я линии из-за спин-флоп эффекта: намагниченность в АФ-связанных слоях стремится ориентироваться перпендикулярно внешнему полю. В π→σ` спектре, наоборот, эти линии подавлены [2] и вклад в спектр идет только от небольшого количества ядер со сверхтонкими полями, имеющими ненулевую проекцию на направление пучка.

Авторы выражают благодарность А.И. Чумакову и Д. Бессасу (ESRF) за помощь в проведении эксперимента.

Секция 6

МИНЕРАЛОГИЯ, НАУКИ О ЗЕМЛЕ, ЭКОЛОГИЯ И КУЛЬТУРНОЕ НАСЛЕДИЕ

Section 6

MINERALOGY, EARTH SCIENCES, ECOLOGY AND CULTURAL HERITAGE

X-RAY DIFFRACTION, MAGNETIZATION MEASUREMENTS AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF IRON-BEARING PHASES IN SOME UNDIFFERENTIATED AND DIFFERENTIATED METEORITES

A.A. Maksimova[1,2], E.V. Petrova[1], M.V. Goryunov[1], I. Felner[3], A.V. Chukin[1], E. Kuzmann[4], Z. Homonnay[4], M.I. Oshtrakh[1*]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
[2]*The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620016, Russian Federation*
[3]*Racah Institute of Physics, The Hebrew University, Jerusalem, 91904 Israel*
[4]*Laboratory of Nuclear Chemistry, Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary*
**e-mail: oshtrakh@gmail.com*

Modern classification of meteorites considers undifferentiated and differentiated meteorites and three major divisions (chondrites, primitive achondrites and achondrites) [1]. Undifferentiated meteorites, named chondrites (stony meteorites), are the most primitive meteorites, which were formed with the Solar System from nebula. Chondrites are divided into three classes: carbonaceous chondrites, ordinary chondrites and enstatite chondrites. Differentiated meteorites were formed in their parent bodies, asteroids and protoplanets, resulting from the thermal metamorphism of the material with further differentiation. As the result, various groups of stony meteorites, stony-iron meteorites and iron meteorites were formed. This group includes (i) stony meteorites with the howardites-eucrites-diogenites or HED clan, the parent body of which is considered asteroid (4) Vesta, (ii) stony-iron meteorites including pallasites and (iii) thirteen groups of iron meteorites: IC, IIAB, IIC, IID, etc., as well as some ungrouped and anomalous iron meteorites, with structural classes such as octahedrites, hexahedrites and ataxites. The main iron-bearing phases/compounds in meteorites are: Fe-Ni-Co alloy, olivine $(Fe, Mg)_2SiO_4$, orthopyroxene $(Fe, Mg)SiO_3$, Ca-poor and Ca-rich clinopyroxene $(Ca, Fe, Mg)SiO_3$, stoichiometric troilite FeS and pyrrhotite $Fe_{1-x}S$, chromite $FeCr_2O_4$, hercynite $FeAl_2O_4$, ilmenite $FeTiO_3$, schreibersite $(Fe, Ni)_3P$, daubréelite $FeCr_2S_4$, etc. Therefore, selected undifferentiated and differentiated meteorites were studied by X-ray diffraction (XRD), magnetic measurements and ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution (for review see [2, 3]).

X-ray diffraction. Examples of XRD patterns of the bulk interiors from Bjurböle L/LL4 ordinary chondrite, stony part of Seymchan main group pallasite (PMG) and Sariçiçek howardite demonstrate different phase compositions in these meteorites.

Magnetization measurements. Zero-field-cooled (ZFC) and field cooled (FC) curves of the bulk interiors from Bjurböle L/LL4 ordinary chondrite, stony part of Seymchan PMG and Sariçiçek howardite demonstrate pronounced peak(s) at T ~ 40–65 K and sometimes small peak at T ~ 18–25 K in the ZFC branch. These features can be explained as a result of the ferrimagnetic-paramagnetic phase transitions in chromite in the temperature range 40–80 K and in hercynite which Curie temperature is around 15 K (see [4]). The isothermal magnetization curves measured at 5 and 295 K showed different saturation magnetization moments for different meteorites.

Mössbauer spectroscopy. The room temperature Mössbauer spectra of the bulk interiors from Bjurböle L/LL4 ordinary chondrite, stony part of Seymchan PMG and Sariçiçek howardite showed the presence of various iron-bearing minerals. The ^{57}Fe hyperfine parameters for revealed components as well as rough estimations of the iron contents in these minerals were deduced for the studied meteorites. The Fe^{2+} occupations of the M1 and M2 sites in olivine and orthopyroxene in stony and stony-iron meteorites and the temperatures of cation equilibrium distributions were deduced from both XRD and Mössbauer spectroscopy data and demonstrated a good agreement. Using the relative areas of some spectral components in the Mössbauer spectra of ordinary chondrites, an approach for classification of these group of undifferentiated meteorites was

developed.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project # FEUZ-2020-0060. The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences is supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project № AAAA-A19-119071090011-6 (A.A.M.).

[1] M.K. Weisberg, T.J. McCoy and A.N. Krot, in: Meteorites and the Early Solar System II, ed. by D.S. Lauretta, H.Y. Jr. McSween. The University of Arizona Press, Tucson, 2006, pp. 19–52.
[2] A.A. Maksimova, M.I. Oshtrakh, *Minerals*, **11**, 612 (2021).
[3] A.A. Maksimova, M.V. Goryunov, M.I. Oshtrakh, *Minerals*, **11**, 614 (2021).
[4] J. Gattacceca, P. Rochette, F. Lagroix, P.-E. Mathé and B. Zanda, *Geophys. Res. Lett.*, **38**, L10203 (2011).

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ФАЗ НЕКОТОРЫХ ДИФФЕРЕНЦИИРОВАННЫХ И НЕДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫХ МЕТЕОРИТОВ

А.А. Максимова[1,2], Е.В. Петрова[1], М.В. Горюнов[1], И. Фелнер[3], А.В. Чукин[1], Э. Кузманн[4], З. Хомоннай[4], М.И. Оштрах[1*]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*
[2]*Институт геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
[3]*Институт физики им. Ракаха, Еврейский Университет, Иерусалим, Израиль*
[4]*Лаборатория ядерной химии, Институт Химии, Университет им. Л. Ётвоша, Будапешт, Венгрия*
**e-mail: oshtrakh@gmail.com*

В данной работе рассмотрена существующая классификация метеоритов [1] и предложен подход к классификации на основе данных Мессбауэровской спектроскопии с высоким скоростным разрешением [2, 3].

Данные рентгеновской дифракции вещества обыкновенного хондрита Bjurböle L/LL4, каменной составляющей палласита Сеймчан PMG и говардита Sariçiçek показали разный фазовый состав этих метеоритов. Магнитные измерения при охлаждении в отсутствии поля (ZFC) вещества этих метеоритов показали выраженный пик (пики) при T ~ 40-65 K и в некоторых случаях маленький пик при T ~ 18-25 K. Эти особенности можно объяснить магнитным фазовым переходом в хромите, который возможен в диапазоне 40–80 K и в герцините, для которого температура Кюри составляет 15 K (см. [4]). Изотермические кривые (5 и 295 K) показали различные значения магнитного момента насыщения для разных метеоритов.

Мессбауэровские спектры хондрита Bjurböle L/LL4, каменной составляющей Сеймчан PMG и говардита Sariçiçek, измеренные при комнатной температуре, показали наличие различных железосодержащих минералов. Сверхтонкие параметры ^{57}Fe и примерные оценки содержания железа в этих компонентах были вычислены из аппроксимации спектров. Заселенности позиций M1 M2 ионами Fe^{2+} в оливине и пироксене и температуры равновесного катионного упорядочения были рассчитаны по данным Мессбауэровской спектроскопии и Рентгеновской дифракции. При этом, результаты согласуются. По соотношению относительных площадей некоторых компонент спектров обыкновенных хондритов был предложен подход к классификации этой группы метеоритов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Проект # FEUZ-2020-0060. Институт Геологии и Геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН поддержан Министерством науки и высшего образования РФ, Проект № AAAA-A19-119071090011-6 (А. А. М.).

STUDY OF FERROMANGANESE CRUSTS MORPHOLOGY AND PHASE COMPOSITION

A.A. Novakova[1*], S.I. Panfilov[1], V.V. Avdonin[1], E.A. Zhegallo[2]

[1]*Moscow M.V. Lomonosov State University, Moscow*
[2]*Borrisiak Paleontology Institute RAS , Moscow*
**e-mail: novakova.alla@gmail.com*

Deep Ocean Ferromanganese Crusts are among the most mysterious geological objects. Usually they occur on clastic volcanic rods in the depth range of 400-7000 m. Their average age reaches several tens of millions years. Thickness of the crusts can reach 26-40 sm. It was found out that ferromanganese crusts consist of up to 20%Mn, 15% Fe, 0.3-2 % Co. In addition, they can contain complexes of noble, rare and rare earth metals (up to 70 elements). A characteristic feature of ferromanganese crusts is their layered structure. It is possible to consistently trace the processes of metals accumulation and global changes in the external conditions for the formation of Fe-Mn crusts by study the composition and structure of these layers.

Our work is devoted to such layer-by-layer research. A complex morphology and phase analysis was carried out using digital optical and scanning electron microscopy, X-ray fluorescence and diffraction analysis and Mossbauer Spectroscopy. This analysis was performed on 2 crusts containing different concentrations of Fe and Mn, but collected in the same region of Pacific Ocean. Performed analysis showed that the crusts are practically composites consisting of clastic and volcanogenic micron-sized minerals and stromatolites, consisting of fossilized biophilms filled with nanoparticles of iron and manganese oxide compounds, which are bacteria wast products. The Mossbauer spectroscopy at first applied to these objects, made it possible to obtain a quantative phase analysis of iron ore components in different layers of the crusts. Based on the reviled results, it was possible to trace how the composition of iron oxides changes in different layers of the crust depending on changes in external conditions.

ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ЖЕЛЕЗОМАРГАНЦЕВЫХ КОРОК

А.А. Новакова[1*], С.И. Панфилов[1], В.В. Авдонин[1], Е.А. Жегалло[2]

[1]*Москвский Государственный университет им. М.В. Ломоносова,*
[2]*Институт палеонтологии им. А.А. Борисяка РАН, Москва*
**e-mail: novakova.alla@gmail.com*

Глубоководные железомарганцевые корки океана являются одними из самых загадочных геологических объектов. Обычно они залегают на обломочных породах подводных вулканов в диапазоне глубин 400-7000 м. Их средний возраст достигает нескольких десятков миллионов лет. Их толщина может достигать 26-40 см. Установлено, что железомарганцевые корки могут содержать до 20 % Mn, 15 % Fe, 0.3-2 % Co. Кроме того, они могут содержать комплексы благородных, редких и редкоземельных металлов (до 70 элементов). Характерной особенностью железомарганцевых корок является их слоистость. Последовательно проследить процессы накопления металлов и глобальные изменения внешних условий образования Fe-Mn корок можно, последовательно изучая состав и строение этих слоев. Именно таким послойным исследованиям и посвящена наша работа. Проведен комплексный морфологический и фазовый анализ с использованием цифровой оптической и сканирующей электронной микроскопии, рентгенофлуоресцентного и дифракционного анализа и мессбауэровской спектроскопии. Этот анализ был выполнен на двух корках, содержащих различные концентрации Fe и Mn, но собранных в одном и том же районе Тихого океана. Проведенный анализ показал, что корки практически представляют собой композиты, состоящие из обломочных и вулканогенных минералов микронного размера и строматолитов, состоящих из фоссилизированных биопленок, наполненных наночастицами оксидных соединений железа и марганца, которые являются продуктами жизнедеятельности бактерий. Впервые примененная к этим объектам мессбауэровская спектроскопия позволила получить количественный фазовый анализ железорудных компонентов в различных слоях корок. С помощью полученных результатов удалось проследить, как изменяется состав оксидов железа в разных слоях железомарганцевой корки в зависимости от изменения внешних условий.

COMPARATIVE INVESTIGATIONS OF SIDERITES ASSOCIATED WITH HYDROTHERMAL, SEDIMENTARY AND BACTERIAL PROCESSES

N.I. Chistyakova[1*], A.V. Antonova[1], D.G. Zavarzina[2], T.Yu. Kiseleva[1], M.S. Chernov[3], E.N. Lukyanova[1], V.D. Sedykh[4], V.S. Rusakov[1]

[1]*Department of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*
[2]*Winogradsky Institute of Microbiology, Federal Research Center of Biotechnology, Moscow, Russia*
[3]*Department of Geology, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*
[4]*Institute of Solid State Physics, Chernogolovka, Moscow District, Russia*
**e-mail: nchistyakovr@yandex.ru*

Siderite $FeCO_3$ is a Fe-bearing carbonate, which is widespread in the Earth [1]. It is a common component of sedimentary iron ores, metamorphic iron formations and hydrothermal metallic veins. Siderite is also a common mineral formed as the result of the microbial activity of iron-reducing bacteria [2]. However, the problem of bacterial participation in the formation of sedimentary iron deposits is still not resolved. The aim of the study was to find a characteristic feature that makes it possible to distinguish metabolically induced siderite by comparing siderites of different origins.

Mössbauer spectroscopy, XRD and scanning electron microscopy were applied to study natural siderites $FeCO_3$ (hydrothermal siderite from Bakal deposit and sedimentary siderite from Starooskolian marine deposits) and metabolically induced siderites (formed during the growth of bacteria *Thermincola ferriacetica* [3], *Fuchsiella ferrireducens* [4] and *Geoalkalibacter ferrihydriticus* in co-culture with *Anaerobacillus alkalilacustris* [5]).

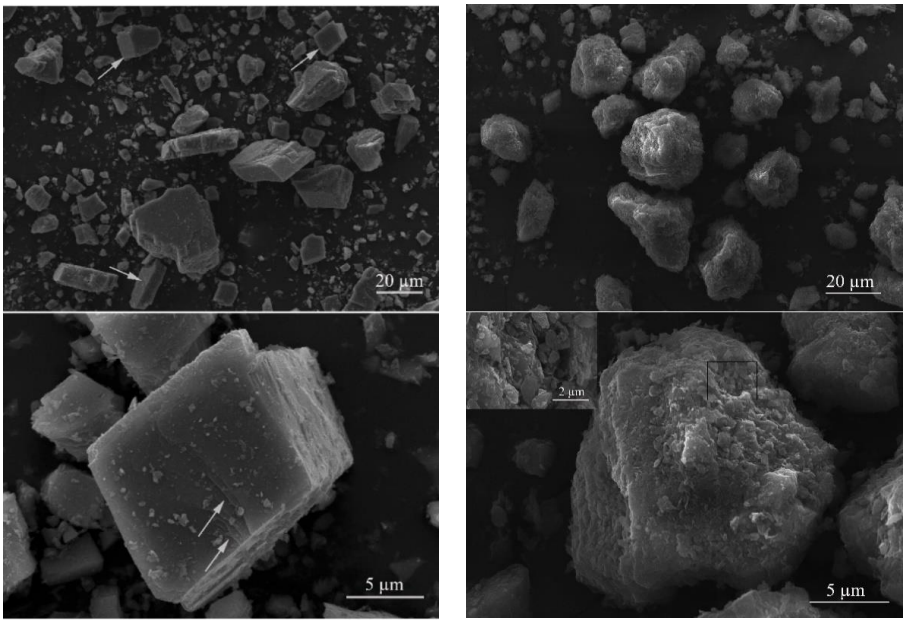


Fig. 1. SEM images of abiogenic *a-b*) hydrothermal and *c-d*) sediment siderite.

It was found that all studied siderites revealed rather differences in crystals morphology (Fig. 1). Metabolically induced siderites characterized by less crystal size in comparison with natural ones. Mossbauer spectra analysis showed that the width of the distribution of quadrupole splitting $p(\Delta)$ for the spectra of metabolically induced siderites was twice as wide broader than those for natural one. It could be explained by heterogeneity in the nearest environment of iron atoms in the structure of metabolically induced siderite and its defectivity in compare with siderite

of abiogenic origin. Such a feature proposed a possible way to distinguish the metabolically induced siderite from the natural one. It was also detected that metabolically induced siderites in contrast to natural were rather unstable and susceptible to oxidation during air storage. Based on the studied samples it is possible to propose a way to distinguish the metabolically induced siderite.

The authors would like to extend their sincere thanks to T. Kmječ, J. Kohout from Faculty of Mathematics and Physics, Charles University for Mössbauer measurements at low temperatures.

[1] V. Cerantola, C. McCammon, et.al., American Mineralogist, **100**, 2670–2681 (2015).
[2] D. Zavarzina, S. Gavrilov, N. Chistyakova, et.al, The ISME journal **14**, 425–436 (2020).
[3] N. Chistyakova, V. Rusakov, D. Zavarzina, et.al., Czech. J. Phys. **55**, 781–790 (2005).
[4] T. Zhilina, D. Zavarzina, et. al., Int. J. Syst. Evol. Microbiol. **65**, 2432–2440 (2015).
[5] D Zavarzina, G., V. Kevbrin, et.al., Microbiology **80**, 743–757 (2011).

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СИДЕРИТОВ ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО, ОСАДОЧНОГО И БАКТЕРИАЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Н.И. Чистякова[1*], А.В. Антонова[1], Д.Г. Заварзина[2], Т.Ю. Киселева[1], М.С. Чернов[3], Е.Н. Лукьянова[1], В.Д. Седых[4], В.С. Русаков[1]

[1]*Физический факультет Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[2]*Институт микробиологии им. Виноградского Федерального исследовательского центра биотехнологии, Москва, Россия*
[3]*Геологический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[4]*Институт физики твердого тела, Черноголовка, Московский район, Россия*
**e-mail: nchistyakovr@yandex.ru*

Сидерит $FeCO_3$ представляет собой железосодержащий карбонат, который широко распространен на Земле [1]. Это обычный компонент осадочных железных руд, метаморфических железных образований и гидротермальных металлических жил. Сидерит также является распространенным минералом, образующимся в результате микробной активности железовосстанавливающих бактерий [2]. Целью исследования было найти характерный признак, позволяющий отличить метаболически индуцированный сидерит путем сравнения сидеритов различного происхождения.

Мессбауэровская спектроскопия, рентгеновская и сканирующая электронная микроскопия были применены для изучения природных сидеритов $FeCO_3$ (гидротермальный сидерит из Бакальского месторождения и осадочный сидерит из старооскольских морских отложений) и биогенных сидеритов (образующихся при росте бактерий *T. ferriacetica* [3], *F. ferrireducens* [4] и *G. ferrihydriticus* в совместной культуре с *A. alkalilacustris* [5]).

Все изученные сидериты имеют значительные различия в морфологии кристаллов (Рис. 1). Биогенные сидериты характеризуются меньшим размером кристаллов по сравнению с абиогенными. Анализ мессбауэровских спектров показал, что ширина распределения квадрупольного расщепления $p(\Delta)$ для спектров биогенных сидеритов была в два раза шире, чем для абиогенных, что может быть объяснено неоднородностью ближайшего окружения атомов железа в структуре биогенного сидерита и его дефектностью по сравнению с сидеритом абиогенного происхождения. Биогенные сидериты, в отличие от природных, были довольно нестабильны и подвержены окислению при хранении на воздухе. На основе изученных образцов можно предложить способ выявления биогенных сидеритов.

X-RAY DIFFRACTION, MAGNETIZATION MEASUREMENTS AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF BULK INTERIOR AND FUSION CRUST IN KEMER L4 ORDINARY CHONDRITE

E.V. Petrova[1*], A.A. Maksimova[1,2], I. Felner[3], A.V. Chukin[1], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
[2]*The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620016, Russian Federation*
[3]*Racah Institute of Physics, The Hebrew University, Jerusalem, 91904 Israel*
**e-mail: evgeniya.petrova@urfu.ru*

The Kemer meteorite fell around noon on March 3, 2008, in Turkey, near Kemer town. This meteorite was classified as an ordinary chondrite from group L and petrological type 4, with shock stage S4/5 and weathering grade W0 (*Meteoritical Bulletin*, No 99, 2012). Ordinary chondrites contain various iron-bearing phases, namely: olivine $(Fe, Mg)_2SiO_4$, orthopyroxene $(Fe, Mg)SiO_3$, clinopyroxene $(Fe, Mg, Ca)SiO_3$, troilite FeS, chromite $FeCr_2O_4$, hercynite $FeAl_2O_4$, ilmenite $FeTiO_3$, grains of Fe-Ni-Co alloy in the form of α-Fe(Ni, Co), α_2-Fe(Ni, Co), γ-Fe(Ni, Co) and γ-FeNi phases, as well as some ferric compounds, resulting from terrestrial weathering. Average values of fayalite Fa (a molar fraction of Fe_2SiO_4 in olivine solid solution of Fe_2SiO_4 – Mg_2SiO_4) and ferrosilite Fs (a molar fraction of $FeSiO_3$ in orthopyroxene solid solution of $FeSiO_3$ – $MgSiO_3$) are 24 and 19 mol.%, respectively. One Kemer L4 fragment was used for the study of powdered (i) bulk interior and (ii) fusion crust using X-ray diffraction (XRD), magnetization measurements and room temperature ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution (see [1]).

X-ray diffraction. The XRD patterns for both: the bulk interior and the fusion crust of Kemer L4 fitted by the Rietveld analysis showed the presence of the following phases in the bulk interior and in the fusion crust: 53.2 and 59.8 wt.% of olivine, 22.6 and 13.2 wt.% of orthopyroxene, 7.3 and 4.6 wt.% of anorthite, 6.7 and 4.9 wt.% of Ca-rich clinopyroxene, 4.4 and 2.8 wt.% of α-Fe(Ni, Co) phase, 3.8 and 1.3 wt.% of troilite, 0.7 and 0 wt.% of γ-Fe(Ni, Co) phase, 0.6 and 0.4 wt.% of chromite, 0.2 and 0.2 wt.% of hercynite and 0.5 and 0.4 wt.% of ferrihydrite $5Fe_2O_3{\times}9H_2O$, respectively. Additionally, 12.3 wt.% of magnesioferrite $MgFe_2O_4$ was found in the fusion crust.

Magnetization measurements. Zero-field-cooled (ZFC) and field cooled (FC) curves of the bulk interior and the fusion crust of Kemer L4 demonstrate the following. The ZFC branch for the bulk interior shows a pronounced peak at $T \approx 62$ K and a small bulge at $T \approx 52$ K and a peculiarity at $T \approx 41$ K can be seen in the ZFC branch for the fusion crust. These features can be explained as a result of the ferrimagnetic-paramagnetic phase transition in chromite which may occur in the temperature range 40–80 K [2]. The isothermal magnetization curves measured on the bulk interior at 5 and 295 K showed similar saturation magnetization moments M_S = 33.9 and M_S = 31.1 emu/g, respectively, and lower values for the fusion crust (M_S = 21.5 and M_S = 16.2 emu/g, respectively), indicating a lower content of the magnetic phase fraction in the fusion crust.

Mössbauer spectroscopy. The best fits of the room temperature Mössbauer spectra of the bulk interior and the fusion crust of Kemer L4 show the presence of various minerals which can be found in the bulk interior and some new components which appeared in the fusion crust. The ^{57}Fe hyperfine parameters as well as rough estimations of the iron contents in these components were deduced from the fits for the bulk interior and for the fusion crust. The Fe^{2+} occupations of the M1 and M2 sites in olivine and orthopyroxene and the temperatures of cation equilibrium distributions were deduced from both: XRD and Mössbauer spectroscopy data which agree well for each other.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project # FEUZ-2020-0060.

[1] A.A. Maksimova, E.V. Petrova, A.V. Chukin, M.S. Karabanalov, B.A. Nogueira, R. Fausto, M. Yesiltas, I. Felner and M.I. Oshtrakh, *Spectrochim. Acta, Part A: Molec. and Biomolec. Spectroscopy*, **242**, 118723 (2020).

[2] J. Gattacceca, P. Rochette, F. Lagroix, P.-E. Mathé and B. Zanda, *Geophys. Res. Lett.*, **38**, L10203 (2011).

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДЛЯ ВЕЩЕСТВА ОБЫКНОВЕННОГО ХОНДРИТА KEMER L4 И КОРЫ ПЛАВЛЕНИЯ

Е.В. Петрова[1*], А.А. Максимова[1,2], И. Фелнер[3], А.В. Чукин[1], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

[2]*Институт геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

[3]*Институт физики им. Ракаха, Еврейский Университет, Иерусалим, Израиль*

**e-mail: evgeniya.petrova@urfu.ru*

Падение метеорита Kemer случилось 3 марта 2008 г. недалеко от города Кемер в Турции. Метеорит классифицирован как обыкновенный хондрит L4 S4/5 W0 (*Meteoritical Bulletin*, No 99, 2012). Обыкновенные хондриты содержат такие железосодержащие фазы как оливин $(Fe, Mg)_2SiO_4$, ортопироксен $(Fe, Mg)SiO_3$, клинопироксен $(Fe, Mg, Ca)SiO_3$, троилит FeS, хромит $FeCr_2O_4$, герцинит $FeAl_2O_4$, ильменит $FeTiO_3$, Fe-Ni-Co, сплавы α-Fe(Ni, Co), α_2-Fe(Ni, Co), γ-Fe(Ni, Co) и γ-FeNi фаз, а также соединения окисленного железа, образованные в земной атмосфере. Определены значения фаялита Fa в оливине 24 мол. %, ферросилита Fs в ортопироксене 19 мол.%. Порошки из внутренней части метеорита Kemer L4 и коры плавления изучены методами рентгеновской дифракции (XRD), магнитных измерений и Мессбауэровской спектроскопии с высоким скоростным разрешением (см. [1]).

Рентгеновские спектры внутреннего вещества и коры плавления хондрита Kemer L4, аппроксимированные по Ритвельду выявили следующие фазы: оливин 53,2 (внутр.) и 59,8 wt.% (кора), ортопироксен 22,6 и 13,2 wt.%, анортит 7,3 и 4,6 wt.%, высококальциевый клинопироксен 6,7 и 4,9 wt.%, фаза α-Fe(Ni, Co) 4,4 и 2,8 wt.%, троилит 3,8 и 1,3 wt.%, γ-Fe(Ni, Co) 0,7 и 0 wt.%, хромит 0,6 and 0,4 wt.%, герцинит 0,2 и 0,2 wt.%, а также ферригидрит $5Fe_2O_3 \times 9H_2O$ 0,5 и 0,4 wt.%, соответственно. Дополнительно, в коре плавления был выявлен магнезиоферрит $MgFe_2O_4$ 12,3 wt.%.

Магнитные измерения при охлаждении в отсутствии поля (ZFC) и в магнитном поле (FC) вещества внутренней части метеорита Kemer L4 и коры плавления показали следующее. Кривая намагничивания ZFC для внутренней части имеет выраженный пик при $T \approx 62$ K и небольшой выступ при $T \approx 52$ K. В кривой ZFC для коры плавления имеется характерный пик при $T \approx 41$ K. Эти особенности можно объяснить магнитным фазовым переходом в хромите, который возможен в диапазоне 40–80 K [2]. Изотермические кривые при 5 и 295 K для внутренней части показали близкие значения магнитного момента насыщения M_S 33,9 и 31,1 эме/г, соответственно. И более низкие значения для и коры плавления M_S 21,5 и 16,2 эме/г, соответственно, что говорит о меньшем содержании магнитных фаз в коре плавления.

Наилучшая аппроксимация мессбауэровских спектров внутренней части и коры плавления хондрита Kemer L4 показала наличие различных минералов, типичных для внутренней части, а также новые компоненты, появившиеся в коре плавления. Сверхтонкие параметры ^{57}Fe также, как и примерные оценки содержания железа в этих компонентах были вычислены из аппроксимации спектров внутренней части и коры плавления. Заселенности позиций M1 M2 ионами Fe^{2+} в оливине и пироксене и температуры равновесного катионного упорядочения были рассчитаны по данным Мессбауэровской спектроскопии и Рентгеновской дифракции. Результаты согласуются между собой.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, Проект # FEUZ-2020-0060.

X-RAY DIFFRACTION AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF IRON-BEARING MINERALS IN JÄNISJÄRVI IMPACTITE

A.A. Maksimova[1,2*], A.V. Chukin[2], M.I. Oshtrakh[2]

[1]*The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620016, Russian Federation*
[2]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
**e-mail: alia55@bk.ru*

Impact craters are formed on the surface of planets as a result of their collisions with small cosmic bodies such as large meteorites and small asteroids [1]. Impactites are the results of shock-explosive impact metamorphism of target rocks after collision of meteorites with planetary surface. In this work, we studied impactite sample that was found at the Jänisjärvi impact crater located 25 km North from Lake Ladoga (Karelia, Russian Federation). The Jänisjärvi impactite sample was excavated at the Cape Leppiniemi. The impact rock has a dark greenish-gray color, a massive texture and cryptocrystalline structure in a molten matrix. The Jänisjärvi impactite in the powdered form was studied by X-ray diffraction (XRD) and Mössbauer spectroscopy with a high velocity resolution (see [2] for details).

X-ray diffraction. X-ray diffraction (XRD) pattern of the Jänisjärvi impact melt rock is shown in Fig. 1. XRD pattern showed the presence of some iron-bearing minerals, e.g., cordierite $(Fe, Mg)_2Al_4Si_5O_{18}$ and chamosite (the Fe^{2+} end member of the chlorite group) $(Fe, Mg)_5Al(Si_3Al)O_{10}(OH, O)_8$, ilmenite $FeTiO_3$ and ferrihydrite $5Fe_2O_3 \times 9H_2O$ as well as some iron-free minerals such as orthoclase (sanidine) $K(AlSi_3)O_8$, cristobalite SiO_2, tridymite SiO_2, quartz SiO_2, albite $Na(AlSi_3O_8)$, titanite $CaTiO(SiO_4)$.

Mössbauer spectroscopy. The Mössbauer spectrum of Jänisjärvi impactite powdered sample measured with a high velocity resolution (in 4096 channels) at room temperature is shown in Fig. 2. This spectrum was well decomposed using seven quadrupole doublets (see [2] and references therein). The ^{57}Fe hyperfine parameters of quadrupole doublet with the largest relative area (A ~ 50%) was related to cordierite. The ^{57}Fe hyperfine parameters for three quadrupole doublets with: (i) δ = 1.203 mm/s and ΔE_Q = 2.560 mm/s, (ii) δ = 1.004 mm/s and ΔE_Q = 2.417 mm/s and (iii) δ = 0.785 mm/s and ΔE_Q = 2.250 mm/s were assigned to Fe^{2+} occupying the M1, M2 and M3 sites in chamosite, respectively. Quadrupole doublet with δ = 0.392 mm/s and ΔE_Q = 1.157 mm/s was related to Fe^{3+} in the M4 sites of chamosite. Remained quadrupole doublets were assigned to Fe^{2+} in ilmenite and ferrihydrite resulting from iron oxidation.

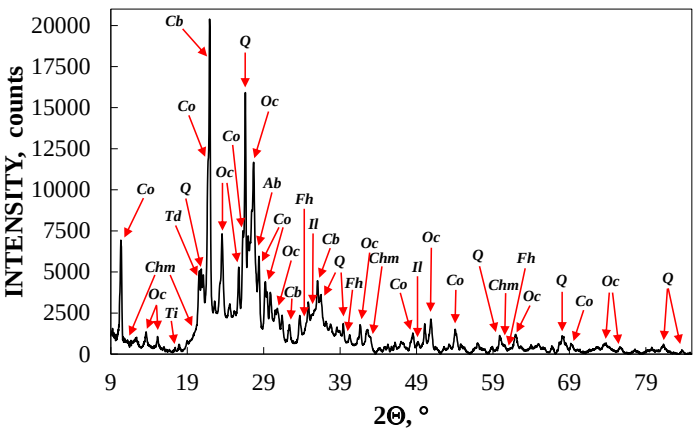


Fig. 1. X-ray diffraction pattern of Jänisjärvi impact melt rock with selected phases: chamosite (***Chm***), cordierite (***Co***), ilmenite (***Il***), ferrihydrite (***Fh***), tridymite (***Td***), quartz (***Q***), orthoclase (***Oc***), albite (***Ab***), titanite (***Ti***) and cristobalite (***Cb***).

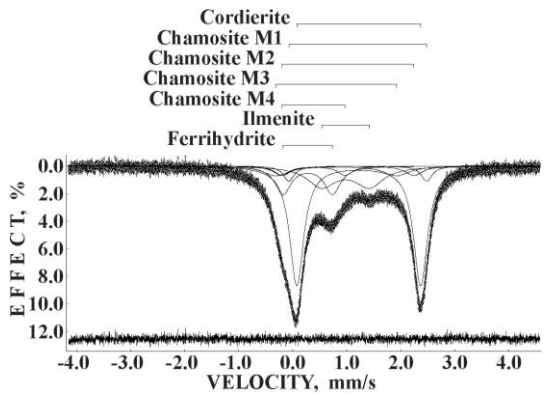


Fig. 2. Mössbauer spectrum of Jänisjärvi impact melt rock measured at room temperature. Indicated components are the results of the best fit. The differential spectrum is shown on the bottom.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project № FEUZ-2020-0060. The Zavaritsky Institute of Geology and Geochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences is supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project № AAAA-A19-119071090011-6 (A.A.M.).

[1] D. Stöffler, C. Hamann and K. Metzler, *Meteorit. & Planet. Sci.*, **53**, 5–49 (2018).
[2] A.A. Maksimova, D.A. Zamiatina, D.A. Zamyatin, A.D. Ryanskaya, A.V. Chukin and M.I. Oshtrakh, *Meteorit. & Planet. Sci*., **57**, 912–925 (2022).

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ МИНЕРАЛОВ В ИМПАКТИТЕ ЯНИСЪЯРВИ

А.А. Максимова[1,2*], А.В. Чукин[2], М.И. Оштрах[2]

[1]*Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, 620016, Россия*
[2]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, 620002, Россия*
**e-mail: alia55@bk.ru*

Ударные кратеры образуются на поверхности планет в результате их столкновений с малыми космическими телами, такими как крупные метеориты и малые астероиды [1]. Импактиты являются результатом ударно-взрывного метаморфизма пород-мишеней после столкновения метеоритов с поверхностью планеты. В настоящей работе изучен образец импактита, обнаруженный в ударном кратере Янисъярви, расположенном в 25 км к северу от Ладожского озера (Карелия, Российская Федерация). Образец импактита Янисъярви был извлечен на мысе Леппиниеми. Импактит имеет темный зеленовато-серый цвет, массивную текстуру и скрытокристаллическую структуру в расплавленной матрице. Импактит Янисъярви в порошкообразном виде был исследован методами рентгеновской дифракции и мессбауэровской спектроскопии с высоким скоростным разрешением (подробнее см. в [2]).

Рентгеновская дифракция. Рентгенограмма импактита Янисъярви показана на рис. 1. Анализ рентгенограммы показал присутствие некоторых железосодержащих минералов, например, кордиерита $(Fe, Mg)_2Al_4Si_5O_{18}$ и шамозита (конечный член Fe^{2+} группы хлорита) $(Fe, Mg)_5Al(Si_3Al)O_{10}(OH, O)_8$, ильменита $FeTiO_3$ и ферригидрита $5Fe_2O_3 \times 9H_2O$, а также некоторых не содержащих железа минералов, таких как ортоклаз (санидин) $K(AlSi_3)O_8$, кристобалит SiO_2 , тридимит SiO_2, кварц SiO_2, альбит $Na(AlSi_3O_8)$, титанит $CaTiO(SiO_4)$.

Мессбауэровская спектроскопия. Мессбауэровский спектр образца импактита Янисъярви, измеренный с высоким скоростным разрешением (в 4096 каналов) при комнатной температуре, показан на рис. 2. Этот спектр был наилучшим образом аппроксимирован с использованием семи квадрупольных дублетов (см. [2] и ссылки в ней). Квадрупольный дублет с наибольшей относительной площадью (A~50%) был связан с кордиеритом. Три квадрупольных дублета с параметрами (а) δ = 1.203 мм/с и ΔE_Q = 2.560 мм/с, (б) δ = 1.004 мм/с и ΔE_Q = 2.417 мм/с и (в) δ = 0.785 мм/с и ΔE_Q = 2.250 мм/с отнесены к ионам Fe^{2+}, занимающим позиции M1, M2 и M3 в шамозите, соответственно. Квадрупольный дублет с δ = 0.392 мм/с и ΔE_Q = 1.157 мм/с связан с Fe^{3+} в позициях M4 шамозита. Оставшиеся два квадрупольных дублета связаны с ильменитом и ферригидритом, образовавшимся в результате окисления железа.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № № FEUZ-2020-0060. Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № AAAA-A19-119071090011-6 (A.A.M.)

MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF HEAT-TREATED TOURMALINE FROM MINISTERSKAYA PIT (MIDDLE URAL)

M.V. Voronin[1*], L.V. Sipavina[1]

[1] *D.S. Korzhinskii Institute of Experimental Mineralogy, Chernogolovka, Russia*
**e-mail: voronin@iem.ac.ru*

Heat treatment of minerals is used both for applied purposes (for example, gemstone refinement) and for a fundamental understanding of the thermal behavior of minerals, including studying the conditions of formation and artificial production. In this case, the process can be carried out under various redox conditions, but, as a rule, oxidative annealing is used, and among recent publications [1, 2] studying the behavior of tourmaline during heating, the Mössbauer spectroscopy method was not used to analyze the change in the valence state of iron.

Among previously studied [3] tourmalines from various pegmatite fields of the Murzinsky massif (Middle Urals), according to the nature of the Mössbauer spectrum, in order to study the behavior of iron during annealing, tourmaline of the Ministerskaya pit of intermediate schorl-dravite composition was selected. The powder sample was annealed under vacuum in quartz glass ampoules at temperatures of 300-750°C for various durations without a kinetic series. The method for obtaining Mössbauer spectra is described in [4].

The resulting spectra were decomposed into components with the selection of five doublets according to the model [5]. The decomposition of the spectra into components shows that the parameters of the doublets do not change during annealing, but the areas of some components vary markedly relative to the initial sample, especially at temperatures above 550°C. In this case, the total content of Fe^{3+} in samples annealed at temperatures below 600°C becomes slightly lower (by 1-1.5%) of the original sample. At the same time, the sample annealed at 750°C became more oxidized $Fe^{3+} \approx 49\%$ versus 39% in the original sample, which indicates that at this temperature tourmaline is transformed, namely, the loss of hydrogen and/or hydroxyl group (water) with the formation of oxy-tourmaline, which agrees with the data of [1].

[1] X. Liu et al., Eur. J. of Miner. 31(5-6), 919-928 (2019).
[2] F. Wang et al., JOM. 71(8), 2468-2474 (2019).
[3] T.A. Gvozdenko, I.A. Baksheev, M.V. Voronin, Proceedings of the XIII Congress of the Russian Mineralogical Society and the Fedorov session. 2, 184-185 (2021) [in Russian].
[4] V.B. Polyakov et al., Geochem. Inter. 57(4), 369-383 (2019).
[5] M.D. Dyar et al., Amer. Miner. 83(7-8), 848-864 (1998).

МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТЕРМООБРАБОТАННОГО ТУРМАЛИНА ИЗ КОПИ МИНИСТЕРСКАЯ (СРЕДНИЙ УРАЛ)

М.В. Воронин[1*], Л.В. Сипавина[1]

[1] *Институт экспериментальной минералогии им. акад. Д.С. Коржинского РАН, Черноголовка, Россия*

**e-mail: voronin@iem.ac.ru*

Термообработка минералов применяется, как с прикладными целями (например, облагораживание ювелирных камней), так и для фундаментального понимания термического поведения минералов, в том числе для изучения условий образования и искусственного получения. При этом процесс может осуществляться в различных окислительно-востановительных условиях, но, как правило, применяется окислительный отжиг, а среди последних публикаций [1, 2] изучающих поведение турмалина при нагревании не использовался метод мессбауэровской спектроскопии для анализа изменения валентного состояния железа.

Среди ранее изученных [3] турмалинов из различных пегматитовых полей Мурзинского массива (Средний Урал) по характеру мессбауэровского спектра, с целью изучения поведения железа при отжиге, был отобран турмалин копи Министерская промежуточного шерл-дравитового состава. Отжиг порошковой пробы проводился под вакуумом в ампулах из кварцевого стекла при температурах 300-750°C с различной продолжительностью без кинетической серии. Методика получения мессбауэровских спектров описана в [4].

Полученные спектры раскладывались на компоненты с выделением пяти дублетов по модели [5]. Разложение спектров на компоненты показывает, что параметры дублетов не меняются при отжиге, а вот площади некоторых компонент заметно варьируют, относительно исходного образца, особенно при температурах выше 550°C. При этом общее содержание Fe^{3+} в образцах отожженных при температурах ниже 600°C становится незначительно ниже (на 1-1,5%) исходного образца. В тоже время образец отожжённый при 750°C стал более окисленным $Fe^{3+} \approx 49\%$ против 39 в исходном образце, что указывает на то, что при этой температуре происходит преобразование турмалина, а именно потеря водорода и/или гидроксогруппы (воды) с образованием окситурмалина, что согласуется с данными [1].

[1] X. Liu et al., Eur. J. of Miner. 31(5-6), 919-928 (2019).
[2] F. Wang et al., JOM. 71(8), 2468-2474 (2019).
[3] Т.А. Гвозденко, И.А. Бакшеев, М.В. Воронин, Материалы XIII Съезда Российского минералогического общества и Федоровской сессии. 2, 184-185 (2021).
[4] В.Б. Поляков и др., Геохимия. 64(4), 372-386 (2019).
[5] M.D. Dyar et al., Amer. Miner. 83(7-8), 848-864 (1998).

^{57}Fe HYPERFINE PARAMETERS IN Fe-Ni ALLOY FROM VARIOUS METEORITES

M.V. Goryunov[1*], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*
**e-mail: goryunov_asd@mail.ru*

Meteorites are the space messengers reaching the Earth every day, which carry an important information about formation and evolution of the Solar System, metamorphism of the matter in space and the effect of extreme space factors [1]. The majority of meteorites contains Fe-Ni alloy: iron meteorites have the main part of alloy, stony-iron meteorites have around a half content of metallic alloy while stony meteorites usually have much smaller amount of metal then other iron-bearing phases. Fe-Ni alloy in meteorites demonstrates the presence of the α-Fe(Ni), α_2-Fe(Ni), γ-Fe(Ni) and γ-FeNi phases. Mössbauer spectroscopy was applied for the study of Fe-Ni alloy in some meteorites to analyze their phase compositions and the ^{57}Fe hyperfine parameters (for review see [2, 3] and references therein).

Iron meteorites. Room temperature Mössbauer spectra of Chinga iron ungrouped and Sikhote-Alin IIAB are shown in Fig. 1 to demonstrate differences in these spectra decompositions which are related to the different phase compositions. Magnetic sextets revealed in the Chinga spectrum were assigned to the following phases: α_2-Fe(Ni) (sextets 1–5), α-Fe(Ni) (sextets 6, 7) and γ-Fe(Ni) (sextets 8, 9). Three magnetic sextets found in the Sikhote-Alin spectrum were associated with α-Fe(Ni) phase.

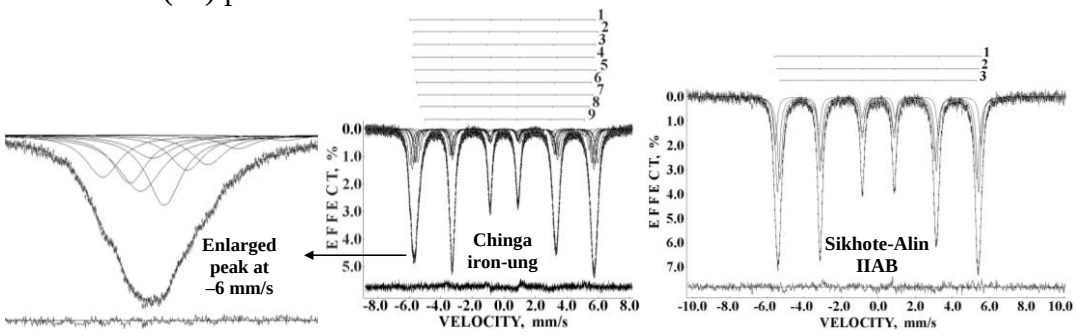


Fig. 1. Room temperature Mössbauer spectra of Fe-Ni-Co alloy from Chinga iron-ung and Sikhote-Alin IIAB iron meteorites. Indicated components are the results of the best fits. The differential spectra are shown on the bottom.

Stony-iron meteorites. Room temperature Mössbauer spectrum of Fe-Ni alloy extracted from Seymchan main group pallasite (PMG) is shown in Fig. 2. Basing on the H_{eff} values, magnetic sextets 1 and 2 were assigned to the α_2-Fe(Ni) phase, sextets 3–6 were associated with the α-Fe(Ni) phase while sextets 7 and 8 were related to the γ-Fe(Ni) phase.

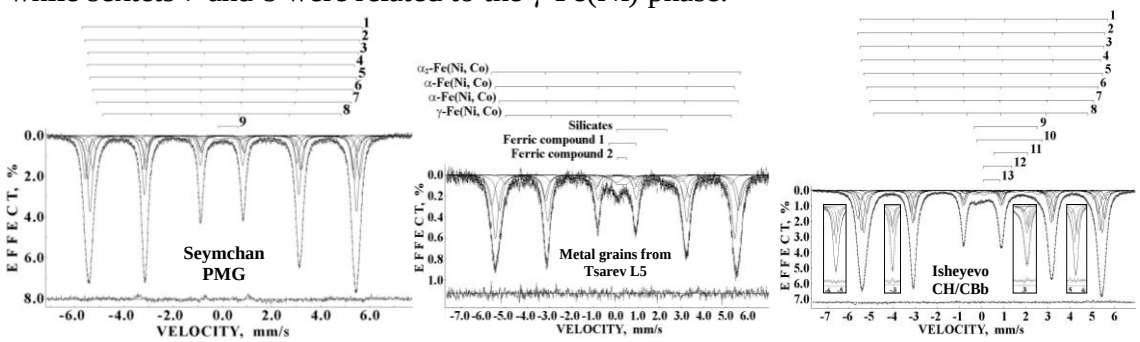


Fig. 2. Mössbauer spectra of Fe-Ni alloy extracted from Seymchan PMG, grains extracted from Tsarev L5 and internal part of Isheyevo CH/CBb. Indicated components are the results of the best fits. The differential spectra are shown on the bottom.

Stony meteorites. Room temperature Mössbauer spectra of Fe-Ni grains extracted from Tsarev L5 ordinary chondrite and internal part of Isheyevo CH/CBb carboneceous chondrite are

shown in Fig. 2. Magnetic sextets revealed in the spectrum of metal grains extracted from Tsarev L5 were attributed to the α_2-Fe(Ni), α-Fe(Ni) and γ-Fe(Ni) phases. Basing on the H_{eff} values, the revealed magnetic sextets in the Isheyevo spectrum can be related to the following metal phases: the α_2-Fe(Ni) phase (1 and 2), the α-Fe(Ni) phase (3–6), the γ-Fe(Ni) phase (7 and 8). The presence of several magnetic sextets for one phase was also explained as a result of variations in Ni content in the iron local microenvironments within one phase.

Mössbauer study of Fe-Ni alloy in various meteorites suggested the following relations of the ^{57}Fe hyperfine parameters and Fe-Ni phases: H_{eff} > ~345 kOe for the α_2-Fe(Ni) phase, ~327 kOe < H_{eff} ≤ ~345 kOe for the α-Fe(Ni) phase, ~283 kOe ≤ H_{eff} ≤ ~327 kOe for the γ-Fe(Ni) phase (the values of H_{eff} < ~290 kOe may also be associated with the γ-FeNi phase) and ~–0.20 mm/s < δ < ~0.15 mm/s for the paramagnetic γ-Fe(Ni) phase.

This work was supported by the Ministry of Science RF, project # FEUZ-2020-0060.

[1] J.T. Wasson, Meteorites. Classification and Properties, Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg, New York, 1974, pp. 1–320.
[2] A.A. Maksimova, M.I. Oshtrakh, *Minerals*, **11**, 612 (2021).
[3] A.A. Maksimova, M.V. Goryunov, M.I. Oshtrakh, *Minerals*, **11**, 614 (2021).

СВЕРХТОНКИЕ ПАРАМЕТРЫ ^{57}Fe В СПЛАВЕ Fe-Ni РАЗЛИЧНЫХ МЕТЕОРИТОВ

М.В. Горюнов[1*], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра Экспериментальной физики, Физико-Технологический институт, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, 620002, Российская Федерация*
**e-mail: goryunov_asd@mail.ru*

Метеориты достигают поверхности Земли каждый день и несут уникальную информацию о процессах формирования вещества Солнечной системы, последующих его трансформациях и действиях экстремальных космических факторов [1]. Большинство метеоритов содержит сплав Fe-Ni: в железных метеоритах он составляет основную часть, в железо-каменных, примерно, половину, а в каменных – гораздо меньшую часть, чем другие железосодержащие фазы. В сплаве Fe-Ni в метеоритах могут содержаться α-Fe(Ni), α_2-Fe(Ni), γ-Fe(Ni) и γ-FeNi фазы. Мессбауэровская спектроскопия применялась для исследования сплава Fe-Ni в некоторых метеоритах для анализа их фазового состава и сверхтонких параметров ^{57}Fe (например, [2, 3] и ссылки в них).

Железные метеориты. Измеренные при комнатной температуре мессбауэровские спектры (МС) сплава Fe-Ni метеоритов Чинге (Iron-ung) и Сихотэ-Алинь IIAB, приведены на Рис.1. При их аппроксимации были выявлены различия, вызванные разным фазовом составом. Магнитные секстеты, выявленные в спектре Чинге были отнесены к следующим фазам: α_2-Fe(Ni) (секстеты 1–5), α-Fe(Ni) (секстеты 6,7) и γ-Fe(Ni) (секстеты 8,9). Все три магнитных секстета, полученные при аппроксимации спектра Сихотэ-Алинь, были отнесены к α-Fe(Ni) фазе.

Железо-каменные метеориты. Измеренный при комнатной температуре МС сплава Fe-Ni, полученного из метеорита Сеймчан (PMG) приведен на Рис.2. Основываясь на значении H_{eff}, магнитные секстеты 1 и 2 были отнесены к α_2-Fe(Ni) фазе, секстеты 3–6 к α-Fe(Ni) фазе, а секстеты 7 и 8 к γ-Fe(Ni) фазе. Квадрупольный дублет 9 был отнесен к соединениям Fe^{3+}, являющимися результатом земного выветривания.

Каменные метеориты. Измеренные при комнатной температуре МС зерен Fe-Ni из обыкновенного хондрита Царев L5 и внутренней части углистого хонрита Ишеево CH/CBb показаны на Рис.2. Магнитные секстеты, выявленные в случае метеорита Царев L5 были отнесены к α_2-Fe(Ni), α-Fe(Ni) и γ-Fe(Ni) фазам, а Ишеево к фазам: α_2-Fe(Ni) (1 и 2), α-Fe(Ni) (3–6) и γ-Fe(Ni) (7 и 8). Наличие нескольких магнитных секстетов для одной фазы объясняется изменением содержания Ni в локальном окружении ядер Fe внутри одной фазы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки РФ, проект # FEUZ-2020-0060.

GAMMA-RESONANCE STUDIES OF ROCKS OF THE MIDDLE EAST (Kingdom of Saudi Arabia, Turkey)

M.M. Huseynov*

Kh.I. Amirkhanov Institute of Physics of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Russia
**e-mail: gusmagm@yandex.ru*

Rock research is of scientific and practical value. According to modern geological science, the mass of the Earth increases annually by a billion tons due to space objects falling on it - meteorites, asteroids, space dust [1]. The discoveries of modern astrophysics show that iron and many other elements in the form of meteorites, asteroids and cosmic dust came to the Sun and its planets from outer space billions of years ago [2, 3]. According to the "cosmic" hypothesis, iron should be dispersed over the entire surface of the Earth and contained in rocks, sea and river sediments. To this end, we have studied more than 100 rocks and river sediments of different morphology, collected from different territories (Russia, Europe, Asia, the Middle East, the USA), in which iron was found both in free and in the composition of different oxides and in different physico-chemical states. 20 rock samples from the territories of Saudi Arabia and Turkey were studied in the work. The samples were crushed rock powder in an agate mortar. An example of decoding the ^{57}Fe spectrum in the S.Arabia (Hira-2) sample is shown in the Fig.1. The main parameters of the spectra, the phase composition of rocks, which consist mainly of FeOOH+FeOnH (goethite), Fe_2O_3 (hematite), and Fe_3O_4 (magnetite) are determined. In free form, iron is not represented in any of the samples. According to isomeric shifts, the Fe valence in the samples corresponds to all possible valence states of iron in oxides.

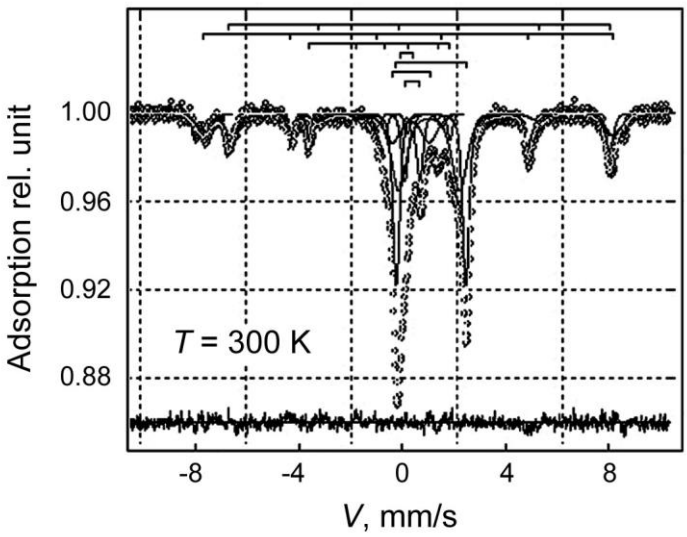


Fig. 1. The Mossbauer spectrum of ^{57}Fe in the sample of S.Arabia (Hira-2)

[1] Д.М. Печерский, *Земля и Вселенная* **6**, 68–77 (2010).
[2] Н.А. Мезенин, *Занимательно о железе.* Москва: Металлургия, 1977.
[3] P. Tarakeshwar, P.R. Buseck, and F.X. Timmes, *The Astrophysical Journal* **879**, 2 (2019).

ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД БЛИЖНЕГО ВОСТОКА (Королевство Саудовская Аравия, Турция)

М.М. Гусейнов*

Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия
**e-mail: gusmagm@yandex.ru*

Исследования горных пород представляет научную и практическую ценность. Согласно современной геологической науке, масса Земли ежегодно увеличивается на миллиард тонн из-за падающих на нее космических объектов – метеоритов, астероидов, космической пыли [1]. Открытия современной астрофизики показывают, что железо и многие другие элементы в виде метеоритов, астероидов и космической пыли миллиарды лет назад попали на Солнце и его планеты из космоса [2, 3]. Согласно «космической» гипотезе, железо должно быть рассеяно по всей поверхности Земли и содержаться в горных породах, морских и речных отложениях. С этой целью нами методом ЯГРС исследованы боле 100 разных по морфологии горных пород и речных отложений, собранные с разных территорий (Россия, Европа, Азия, Ближний Восток, США), в которых обнаружены железо как в свободном виде, так и в составе различных оксидов и в разных физико-химических состояниях. В работе исследованы 20 образцов горных пород с территорий Саудовской Аравии и Турции. Образцы представляли собой измельчённый в агатовой ступе порошок горных пород. Пример расшифровки спектра ^{57}Fe в образце S.Arabia (Hira-2) приведен на Fig.1. Определены основные параметры спектров, фазовый состав пород, которые состоят в основном из FeOOH+FeOnH (гетит), Fe_2O_3 (гематит) и Fe_3O_4 (магнетит). В свободном виде железо не представлено ни в одном из образцов. По данным изомерных сдвигов валентность Fe в образцах соответствует всем возможным валентным состояниям железа в оксидах.

Секция 7

ХИМИЯ, НЕФТЕХИМИЯ, КАТАЛИЗ, СТРУКТУРА И СВЯЗЬ

Section 7

CHEMISTRY, PETROCHEMISTRY, CATALYSIS, STRUCTURE AND COMMUNICATION

A NEW APPROACH TO THE INTERPRETATION OF THE ^{57}Fe MÖSSBAUER ISOMER SHIFTS

S.K. Dedushenko[1*], Yu.D. Perfiliev[2]

[1]*Lyalin Pereulok 24/26-43, Moscow 101000, Russia*
[2]*Department of Chemistry, Moscow State University, Lenin Hills 1-3, Moscow 119992, Russia*
**e-mail: dedushenko@mail.ru*

Analysis of the available experimental data on iron compounds has shown the following [1]:

The ^{57}Fe Mössbauer isomer shift (IS) depends on the average interatomic distance between the iron ion and the ions of its first coordination sphere (aID), on the chemical nature of these ions, and also on the iron coordination number. An increase in aID and a decrease in the coordination number lead to an increase in IS.

For a given polyhedron, the correlation between IS and aID is close to linear with a slope of about 0.04 mm·s^{-1}·pm^{-1}. A change in the oxidation state of iron (OS_{Fe}) affects IS, since a change in OS_{Fe} causes a change in aID due to a change in the number of electrons on the valence shell of iron; the more OS_{Fe}, the less IS. If the aID of differently charged ions are close (e.g., for the pair $H_4[Fe(CN)_6]$ and $H_3[Fe(CN)_6]$), then the IS values do not differ significantly.

A change in the spin state of an iron ion affects IS insofar as this change causes a change in aID. In particular, the transition from the high-spin to the low-spin state in iron(II) spin-crossover compounds leads to a decrease in aID and, accordingly, to a decrease in IS.

A change in the spatial structure of the iron coordination polyhedron may affect IS. This was observed when comparing tetrahedral and square-planar iron(II) oxygen polyhedra. The tetrahedral and square-planar oxygen polyhedra of high-spin iron(II) show increased IS values.

The replacement of ions surrounding iron with ones of larger radius leads to an increase in aID. In this case, if the electronic structures of the substituted and substituting ions are similar, the increase in aID corresponds to the difference in the radii of these ions, while IS changes insignificantly. This was observed when comparing the pairs of compounds with $[FeS_4]$-$[FeSe_4]$, $[FeF_6]$-$[FeCl_6]$, and $[FeCl_4]$-$[FeBr_4]$ polyhedra.

In terms of the orbital model of the electron shell of the atom, the above data can be explained by the interactions of the 4s-orbital of iron with its other valence orbitals (undergoing hybridization), as well as with the orbitals of the ions surrounding iron (establishing directional chemical bonds). These interactions affect the electron density at the iron nucleus:

$$|\psi_s(0)|^2 = \sum_{i=1}^{1+n+m} \left|\psi^{(i)}_{sp^n d^m}(0)\right|^2,$$

where n = 0…3 and m = 0…5 are the numbers of the 4p- and 3d-orbitals involved into sp^nd^m-hybridization. The corresponding contributions depend on the distances between the iron ion and the ions surrounding it, but do not depend on the number of orbitals involved into hybridization or on the number of directional chemical bonds. The electron shell of each ion of the iron polyhedron also makes an additional (non-bonding) contribution to the electron density at the iron nucleus.

In some specific cases (e.g., for iron in noble gas matrices), the observed unusually low IS can be explained by the filling of the 4s-orbital of iron with its valence non-bonding electron(s).

[1] S.K. Dedushenko and Yu.D. Perfiliev, Hyperfine Interactions **243**, 15 (2022).

НОВЫЙ ПОДХОД К ИНТЕРПРЕТАЦИИ МЕССБАУЭРОВСКИХ ИЗОМЕРНЫХ СДВИГОВ ЖЕЛЕЗА

С.К. Дедушенко[1*], Ю.Д. Перфильев[2]

[1] *Москва, Лялин переулок 24/26-43*
[2] *Химический ф-т МГУ им. М.В.Ломоносова*
**e-mail: dedushenko@mail.ru*

Анализ имеющихся экспериментальных данных по соединениям железа показал следующее:

Мессбауэровский изомерный сдвиг (IS) зависит от среднего межатомного расстояния между ионом железа и ионами его первой координационной сферы (aID), от химической природы этих ионов, а также от координационного числа железа. Увеличение aID и уменьшение координационного числа приводят к увеличению IS.

Для данного координационного полиэдра корреляция между IS и aID близка к линейной с наклоном около 0,04 мм·с$^{-1}$·пм$^{-1}$. Изменение степени окисления железа (OS_{Fe}) влияет на IS, поскольку изменение OS_{Fe} вызывает изменение aID за счет изменения числа электронов на валентной оболочке железа; чем больше OS_{Fe}, тем меньше IS. Если aID ионов с разным зарядом близки (например, как у пары $H_4[Fe(CN)_6]$ и $H_3[Fe(CN)_6]$), то значения IS существенно не различаются.

Изменение спинового состояния иона железа влияет на IS, поскольку это изменение вызывает изменение aID. В частности, переход из высокоспинового в низкоспиновое состояние в соединениях железа(II) спиновым переходом (spin crossover) приводит к уменьшению aID и, соответственно, к уменьшению IS.

Изменение пространственной структуры координационного полиэдра железа может повлиять на IS. Это наблюдается при сравнении тетраэдрических и плоско-квадратных кислородных полиэдров железа. Тетраэдрические и плоско-квадратные кислородные полиэдры высокоспинового железа(II) показывают повышенные значения IS.

Замещение ионов, окружающих железо, на ионы большего радиуса приводит к росту aID. При этом, если электронные структуры замещаемого и замещающего ионов аналогичны, рост aID соответствует разнице радиусов этих ионов, а IS изменяется незначительно. Это наблюдалось при сравнении пар соединений с полиэдрами $[FeS_4]$-$[FeSe_4]$, $[FeF_6]$-$[FeCl_6]$, и $[FeCl_4]$-$[FeBr_4]$.

В рамках орбитальной модели электронной оболочки атома приведенные выше выводы можно объяснить взаимодействием 4s-орбитали железа с другими его валентными орбиталями (путем гибридизации), а также с орбиталями ионов, окружающих железо (за счет образования направленных химических связей). Это взаимодействие влияет на электронную плотность на ядре железа:

$$|\psi_s(0)|^2 = \sum_{i=1}^{1+n+m} \left|\psi^{(i)}_{sp^n d^m}(0)\right|^2,$$

где n = 0…3 и m = 0…5 – число 4*p*- и 3*d*-орбиталей, вовлеченных в sp^nd^m-гибридизацию. Соответствующие вклады зависят от расстояний между ионом железа и окружающими его ионами, но не зависят от числа орбиталей, участвующих в гибридизации, или от числа направленных химических связей. Электронная оболочка каждого иона полиэдра железа также вносит дополнительный вклад в электронную плотность на ядре железа.

В некоторых специфических случаях (например, для железа в матрицах благородных газов) наблюдаемые необычно низкие IS можно объяснить заполнением 4s-орбитали железа его валентными несвязывающими электронами.

MÖSSBAUER STUDY OF THE IRON-BASED NANOCATALYSTS FOR THE FISCHER-TROPSCH SYNTHESIS

K.V. Frolov[1*], M.I. Ivantsov[2], M.V. Kulikova[2]

[1]*Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*
[2]*Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis RAS, Moscow, Russia*
**e-mail: green@crys.ras.ru*

Fischer-Tropsch synthesis is an important part of most processes for converting alternative raw materials (associated gas, coal, peat and various types of biomass) to the components of different fuels and chemicals (olefins, alcohol, n-alkanes). In recent years, nanoscale metal-carbon materials as catalysts for the Fischer-Tropsch synthesis have increasingly garnered the interest of the researchers. Iron- and Cobalt- based catalysts have higher catalytic activity, lower cost, and high selectivity for hydrocarbons formation compared to the other catalysts [1-4]. The introduction and regular distribution of the catalytic active metal particles into carbon matrix is carried out by the different methods during the heat treatment of mixtures of different organic precursors and metal salts when the ordered carbon structures are formed and simultaneously the metal reduction occurs with the participation of the organic destruction products. Precise quantitative information on the phase composition and electronic states of metal ions in the catalyst are required to control the structure of a nanocomposites and their properties.

The results of the ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy measurements at room temperature of the iron-based nanocomposites, which are prepared by different methods from the mixtures of metal salts with the polymers, organic precursors (glucose, starch, polyvinyl alcohol), and carbon fiber are presented. Phase transformations of iron oxides and carbides during catalysis, structural and electronic states of Fe ions are determined and discussed.

In part of the Mössbauer spectroscopy measurements this work was supported by the Russian Ministry of Science and Higher Education within the State assignment of the FSRC "Crystallography and Photonics" of RAS.

[1]. C. Zhu, G.M.Bollas, Appl. Catal. B: Environ. **235**, 92 (2018).
[2] A.A. Vasilev, M.N. Efimov, G.N. Bondarenko et al, Chem. Phys. Lett. **730**, 8 (2019).
[3] J.-S. Bae, S.Y. Hong, J.Ch. Park et al, Appl. Catal. B: Environ. **244**, 576 (2019).
[4] F. Lu, X. Chen, Z. Lei, L. Wen, Y. Zhang, Appl. Catal. B: Environ. **281**, 119521, (2021).

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША

К.В. Фролов[1*], М.В. Иванцов[2], М.В. Куликова[2]

[1]*Институт кристаллографии имени А.В. ,Шубникова ФНИЦ «Кристаллогрфия и фотоника» РАН, Москва, Россия*

[2]*Институт Нефтехимического синтеза имени А.В. Топчева, Москва, Россия*

**e-mail: green@crys.ras.ru*

Синтез Фишера-Тропша является важной частью большинства процессов преобразования альтернативного сырья (попутного газа, угля, торфа и различных видов биомассы) в компоненты различных топлив и химикатов (олефины, спирт, н-алканы). В последние годы наноразмерные металл-углеродные материалы в качестве катализаторов синтеза Фишера-Тропша вызывают всё больший интерес исследователей. Катализаторы на основе железа и кобальта обладают более высокой каталитической активностью, меньшей стоимостью и высокой селективностью образования углеводородов по сравнению с другими катализаторами [1-4]. Введение и равномерное распределение частиц каталитически активного металла в углеродную матрицу осуществляется различными способами при термообработке смесей различных органических прекурсоров и солей металлов в процессе формирования упорядоченных углеродных структур и одновременного восстановления металла с участием продуктов органического разложения. Точная количественная информация о фазовом составе и электронных состояниях ионов металлов в катализаторе необходима для управления структурой нанокомпозитов и их свойствами.

В работе представлены результаты измерений при комнатной температуре методом мёссбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe нанокомпозитов на основе железа, полученных различными методами из смесей солей металлов с полимерами, органическими прекурсорами (глюкозой, крахмалом, поливиниловым спиртом) и углеродным волокном. Определены и обсуждены фазовые превращения при катализе оксидов и карбидов железа, структурное и электронное состояния ионов Fe.

В части мёссбауэровских измерений работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Секция 8

ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И МЕТОДОЛОГИЯ

Section 8

EXPERIMENTAL TECHNIQUE AND METHODOLOGY

NEW MODEL OF MOSSBAUER SPECTROMETER MS-2020

D.A. Sarychev*, D.N. Sivokon, M.Yu. Zekhtser, S.V. Khristich, V.V. Kitaev

Research Institute of Physics of the Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia
**e-mail:* dasarychev@sfedu.ru

A new model of the MS-2020 Mossbauer spectrometer with significantly improved Doppler modulation parameters and adaptive tuning has been developed.

The digital part of the MS-2020 electronic unit is made on a high-performance STM32F765VGT6 microcontroller, in which the software and hardware implements an algorithm for adaptive adjustment of the modulator's operating mode with variable load values on its movable part, Mossbauer and amplitude spectrum drives, and a synchronization system of two MS-2020 electronic units with each other, which makes it possible to implement a synchronous operation mode two modulators. Interaction with a personal computer is carried out by means of the FT232H chip, which acts as a converter of the USB interface to SPI.

The key components of the analog part are the following chips: The AD5762R DAC, which is a 16-bit converter with a low level of intrinsic noise and an extremely low value of nonlinear distortion, the AD7685 16-bit ADC, which digitizes the modulator control error signal for further use by the automatic tuning algorithm, and for displaying the error signal to the user. It is possible to compensate for temperature drifts.

The MS-2020 spectrometer is controlled by a special program of a personal computer (PC) with Windows OS (version 7 or newer) via the USB port of the computer corresponding to the standard version 1.1 or higher. The control program allows you to automatically set up and start the modulator of the Mossbauer spectrometer in the mode of constant acceleration, constant speed, and intervals with the desired speed ranges, configure one or two spectrometric channels and enable the accumulation of spectra. The built-in microcontroller software allows you to maintain the operation of the spectrometer modulator in the selected mode and accumulate Mossbauer spectra in two spectrometric channels in offline mode, without constant connection to a PC.

The new model of the Mossbauer spectrometer is compatible with the analytical unit of the previous model - the MS1104E spectrometer. The appearance of the control program is deliberately made as similar as possible to the control program of the old model. As before, the management of the various components of the spectrometer is focused on the corresponding tabs of the main program window: storage, discriminator, modulator, and cryostat. Due to internal calibration, the desired speed of movement can be set with an accuracy of up to hundredths of mm/s. At the same time, the characteristics of the movement are demonstrated:

- high-speed noise is better than 0.002% of the maximum speed of movement;
- the nonlinearity of the modulator speed does not exceed 0.01%;
- the error of setting the modulator speed is less than 0.1 mm/s;
- the maximum speed range of the modulator is not less than 100 mm/s.

НОВАЯ МОДЕЛЬ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРОМЕТРА MS-2020

Д.А. Сарычев*, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич, В.В. Китаев

НИИ физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия
**e-mail:* dasarychev@sfedu.ru

Разработана новая модель мёссбауэровского спектрометра MS-2020 с существенно улучшенными параметрами доплеровской модуляции и адаптивной настройкой.

Цифровая часть электронного блока MS-2020 выполнена на высокопроизводительном микроконтроллере STM32F765VGT6, в котором программно-аппаратными средствами реализован алгоритм адаптивной настройки режима работы модулятора с изменяемыми значениями нагрузки на его подвижную часть, накопители мессбауэровских и амплитудных спектров, и система синхронизации двух электронных блоков MS-2020 между собой, что обеспечивает возможность реализации режима синхронной работы двух модуляторов. Взаимодействие с персональным компьютером производится посредством микросхемы FT232H, которая выступает в качестве преобразователя интерфейса USB в SPI.

Ключевыми компонентами аналоговой части являются следующие микросхемы: ЦАП AD5762R, представляющий собой 16-и битный преобразователь с низким уровнем собственных шумов и крайне низким значением нелинейных искажений, 16-и битный АЦП AD7685, который оцифровывает сигнал ошибки регулирования модулятора для дальнейшего использования алгоритмом автоматический настройки, и для отображения сигнала ошибки пользователю. Предусмотрена возможность компенсации температурных дрейфов.

Управление спектрометром MS-2020 осуществляется специальной программой персонального компьютера (ПК) с ОС Windows (версии 7 или более новой) через USB-порт компьютера, соответствующий стандарту версии 1.1 или выше. Управляющая программа позволяет автоматически настроить и запустить модулятор мёссбауэровского спектрометра в режиме постоянного ускорения, постоянной скорости и интервалов с нужными диапазонами скоростей, настроить один или два спектрометрических канала и включить накопление спектров. Встроенное ПО микроконтроллера позволяет поддерживать работу модулятора спектрометра в выбранном режиме и накапливать мёссбауэровские спектры в двух спектрометрических каналах в автономном режиме, без постоянного подключения к ПК.

Новая модель мёссбауэровского спектрометра совместима с аналитическим блоком предыдущей модели - спектрометра MS1104E. Внешний вид управляющей программы преднамеренно сделан максимально похожим на управляющую программу старой модели. Как и раньше, управление различными компонентами спектрометра сосредоточено на соответствующих вкладках главного окна программы: накопителя, дискриминатора, модулятора и криостата. За счёт внутренней калибровки желаемую скорость движения можно задать с точностью до сотых долей мм/с. При этом демонстрируются характеристики движения:

- скоростной шум лучше 0,002% от максимальной скорости движения;
- нелинейность скорости модулятора не превышает 0,01%;
- ошибка задания скорости модулятора составляет менее 0,1 мм/с;
- максимальный диапазон скорости модулятора не менее 100 мм/с.

DOPPLER MODULATOR: PRINCIPLES OF CONSTRUCTION AND PROSPECTS OF DEVELOPMENT

V.G. Semenov[1*], V.V. Panchuk[1], N.A. Makarov[1]

[1]*Saint Petersburg University, Saint Petersburg, Russia*
**e-mail: val_sem@mail.ru*

In Mössbauer spectroscopy, Doppler modulators of the electrodynamic type, which in principle are simple in design and must have linear characteristics over a wide range of displacement amplitudes, are usually used to obtain the Doppler shift of gamma-quantum energy. Motion control of the Doppler electrodynamic modulator is performed by a special device - the modulator driver. It should be noted that the performance of the Mössbauer spectrometer as a whole is significantly affected by the characteristics of both the Doppler modulator and the control system. The paper will review the history of Doppler modulators and their evolution. An analysis of the capabilities of Doppler modulator systems from various manufacturers will be presented and their characteristics will be presented. The purpose of this paper is to investigate the principles of Doppler modulation systems, ensuring maximum accuracy of the specified motion law, and to develop an "intelligent" Doppler modulation system. The definition highlighted in quotation marks was first introduced by S. M. Irkaev. In the final part we will consider the Doppler modulation system developed at the Institute of Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences together with the staff of St. Petersburg State University. A distinctive feature of this system is its very flexible and user-friendly setup, for different types of reference signals, with which different techniques in Mössbauer spectroscopy can be implemented.

ДОПЛЕРОВСКИЙ МОДУЛЯТОР: ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

В.Г. Семенов[1*], В.В. Панчук[1], Н.А. Макаров[1]

[1]*Санкт-Петербургский университет, Санкт-Петербург, Россия*
**e-mail: val_sem@mail.ru*

В мессбауэровской спектроскопии для получения доплеровского сдвига энергии гамма-квантов используются, как правило, доплеровские модуляторы электродинамического типа, которые в принципе просты по конструкции и должны обладать линейными характеристиками в широком диапазоне амплитуд перемещений. Управление движением доплеровского модулятора электродинамического типа осуществляет специальное устройство – драйвер модулятора. Следует отметить, что на качество работы мессбауэровского спектрометра в целом существенным образом влияют характеристики как доплеровского модулятора, так и системы управления. В работе будет рассмотрена история создания доплеровских модуляторов и их эволюция. Будет представлен анализ возможностей систем доплеровских модуляторов различных производителей и представлены их характеристики. Целью настоящей работы является исследование принципов построения систем доплеровской модуляции, обеспечивающих максимальную точность отработки заданного закона движения, и разработка «интеллектуальной» системы доплеровской модуляции. Выделенное в кавычках определение было впервые введено С.М. Иркаевым. В заключительной части будет рассмотрена система доплеровской модуляции, разработанная на базе Института аналитического приборостроения РАН совместно с сотрудниками СПбГУ. Отличительной особенностью данной системы является очень гибкая и удобная с точки зрения пользователя её настройка, под различные виды опорных сигналов, с помощью которых можно реализовать различные методики в мессбауэровской спектроскопии.

GAMMA RESONANCE METHOD FOR SIMULTANEOUS MEASUREMENT OF THE AMPLITUDE OF NUCLEI OSCILLATIONS ON THE SURFACE AND IN THE VOLUME OF A SAMPLE UNDER ACOUSTIC EXCITATION

A.L. Zinnatullin, F.G. Vagizov*

Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan, Russia
**e-mail: vagizovf@gmail.com*

Various micro-electro-mechanical systems (MEMS) are important and actively developing devices today. MEMS devices are widely used as ultrasonic transducers, filters, actuators, various sensors such as gyroscopes, magnetometric and barometric sensors, accelerometers, environmental analyzers, etc. The requirements for their functional properties, energy efficiency and linear dimensions are constantly growing. The effectiveness of these devices mostly depends on the quality factor and sensitivity of the active elements, which are determined by the execution quality of the technological processes, the elastic properties of the materials they are made from. The latter depends on the features of the propagation of surface (SAW) and bulk acoustic waves (BAW), their mutual transformation in the active element material. In this regard, the important role is played by methods that allow one to simultaneously obtain information about the vibrations of atoms involved in the propagation process of surface and bulk acoustic waves separately. The informative parameters in this case are the phase and amplitude of ultrasonic vibrations of atoms. Moreover, the oscillation amplitude can vary from picometers to nanometers.

To date, to study the elastic high-frequency vibrations of MEMS active elements, various optical interference schemes are used, where visible lasers are commonly implemented [1-3]. Despite some advantages of these schemes, they are limited to studying only surface vibrations. Therefore, important information about the vibrations in the resonator volume remains inaccessible. Compared with optical radiation, gamma-resonance spectroscopy has a number of useful features. These are a high penetrating length, a short wavelength (86 pm for ^{57}Fe), a high accuracy in measuring the amplitude of ultrasonic vibrations of atoms (on the order of several picometers [4]), and the possibility of simultaneously recording the Mössbauer spectra of nuclei located on the surface and in the volume of a sample [5].

In this work, we report on the development of a special Mössbauer detector for the simultaneous registration of nuclei oscillations on the surface and in the volume of a sample. The first results of simultaneous observation of vibrations on the surface and in the volume of film materials under acoustic excitation are presented. It was found that in the case of a homogeneous sample (stainless steel foil), the amplitude of oscillations in the volume of the sample exceeds the amplitude on its surface. However, in the case of a heterogeneous sample (stainless steel foil implanted with iron ions), an inverse relationship is observed. The proposed method opens up new possibilities for studying the bulk and surface acoustic waves in elastic materials and the mechanisms of their mutual transformation.

The reported research was funded by RFBR, project number 18-02-00845 A.

[1] J. V. Knuuttila, P. T. Tikka, and M. M. Salomaa, Opt. Lett. 25, 613 (2000).
[2] H. Martinussen, A. Aksnes, and H. E. Engan, Opt. Express 15, 11370 (2007).
[3] K. Kokkonena, M. Kaivola, Appl. Phys. Lett. 92, 063502 (2008).
[4] R. N. Shakhmuratov, F. G. Vagizov, Phys. Rev. B 95, 245429 (2017).
[5] A.S. Kamzin, L.A. Grigoriev, FTT. 94, 1271 (1994).

ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЙ МЕТОД ОДНОВРЕМЕННОГО ИЗМЕРЕНИЯ АМПЛИТУДЫ КОЛЕБАНИЙ ЯДЕР НА ПОВЕРХНОСТИ И В ОБЪЕМЕ ОБРАЗЦА ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов*

Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия
**e-mail: vagizovf@gmail.com*

Различные микроэлектромеханические системы (MEMS - micro-electro-mechanical systems) на сегодняшний день являются важными и активно развивающимися устройствами. Устройства MEMS находят широкое применение в качестве ультразвуковых преобразователей, фильтров, актуаторов, разнообразных датчиков, таких как гироскопы, магнитометрические и барометрические датчики, акселерометры, анализаторы среды и т.д. Требования к их функциональным свойствам, энергоэффективности и линейным размерам постоянно растут. Эффективность этих устройств во многом зависит от добротности и чувствительности активных элементов, что определяется совершенством технологического исполнения, упругими свойствами материалов из которых они сделаны. Последнее зависит от особенностей распространения поверхностных (SAW) и объемных акустических волн (BAW), их взаимной трансформации в материале активного элемента. В связи с этим приобретает важную роль разработка новых методов исследования ультразвуковых колебаний атомов, позволяющих получать одновременно информацию о колебаниях атомов, участвующих в процессе распространения поверхностных и объемных акустических волн в отдельности. Информативными параметрами в этом случае являются фаза и амплитуда ультразвуковых колебаний атомов. Причем амплитуда колебаний может изменяться от пикометров до нанометров.

На сегодняшний день для исследования упругих высокочастотных колебаний активных элементов MEMS используют различные оптические интерференционные схемы, где используются лазеры видимого диапазона [1-3]. Несмотря на некоторые преимущества этих схем, они ограничены исследованием лишь поверхностных колебаний. Поэтому важная информация о характере колебаний в объеме резонатора остаётся недоступной. По сравнению с оптическим излучением гамма-резонансная спектроскопия обладает рядом полезных особенностей. Это – большая проникающая способность, короткая длина волны (86 пм для ^{57}Fe), высокая точность измерений амплитуды ультразвуковых колебаний атомов (порядка нескольких пикометров [4]) и возможность одновременной регистрации мессбауэровских спектров ядер, находящихся на поверхности и в объеме образца [5].

В данной работе мы сообщаем о разработке специального мёссбауэровского блока одновременного детектирования колебаний ядер на поверхности и в объеме образца. Приводятся первые результаты одновременного наблюдения колебаний атомов на поверхности и в объеме пленочных материалов при акустическом возбуждении. Обнаружено, что в случае однородного образца (фольга SS), амплитуда колебаний в объёме образца превышает амплитуду на поверхности. Однако в случае гетерогенного образца (фольга SS, имплантированная ионами железа) наблюдается обратная зависимость. Предложенный метод открывает новые возможности исследования объемных и поверхностных акустических волн в упругих материалах, а также механизмов их взаимной трансформации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-02-00845 А.

[1] J. V. Knuuttila, P. T. Tikka, and M. M. Salomaa, Opt. Lett. 25, 613 (2000).
[2] H. Martinussen, A. Aksnes, and H. E. Engan, Opt. Express 15, 11370 (2007).
[3] K. Kokkonena, M. Kaivola, Appl. Phys. Lett. 92, 063502 (2008).
[4] R. N. Shakhmuratov, F. G. Vagizov, Phys. Rev. B 95, 245429 (2017).
[5] А.С. Камзин, Л.А. Григорьев, ФТТ. 94, 1271 (1994).

MÖSSBAUER SPECTROMETER WITH A MOVABLE RESONANCE DETECTOR AND SYNCHRONOUS DOPPLER MODULATION SYSTEM

D.A. Sarychev*, D.N. Sivokon, M.Yu. Zekhtser, S.V. Khristich

Research Institute of Physics of the Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia
**e-mail:* dasarychev@sfedu.ru

A new Mössbauer spectrometer with a synchronously moving resonant scintillation detector and a radionuclide source has been developed based on two Doppler modulators, two control electronic units of the spectrometer and special software that allows setting the required amount of motion desynchronization in the modulation modes used, such as constant acceleration, constant velocity, and "interval" mode.

The analytical unit of the spectrometer consists of two modulators like those used in the MS1104 spectrometer, mounted on a massive base weighing at least 60 kg. One modulator moves a standard radionuclide source, and the other moves a specially designed resonant scintillation detector. A stationary test sample is located between the moving source and the detector. The large mass of the base is due to the need to reduce the magnitude of the relative parasitic oscillations of the source and the resonant detector that are phased with the starting pulses. If necessary, a cryostat or heater with the test sample can be placed between the moving source and the detector.

Each modulator is controlled by its own electronics unit. To synchronize the movement of the two modulators, two interchangeable electronic units of the MS-2020 Mössbauer spectrometer are switched via the available connectors and programmatically switched to a special mode of collaboration. One of them, the master controls the entire spectrometer: the movement of the modulator, the setting of the detector and the accumulation of the spectrum, generates sync pulses for the slave electronics unit, which controls the movement of the second slave modulator. Monitoring of the equipment is carried out through two copies of the MS-2020 spectrometer control program running on the same computer.

Synchro pulses are transmitted to the slave modulator with a certain delay set by the user of the spectrometer, determined by the difference in isomeric shifts of the resonant emission lines of the source and the absorption line of the detector converter. This makes it possible to maintain the source and detector exactly in resonance throughout the entire working section of the oscillation period of the modulator when the spectrum is accumulating. When working in the "saw" mode, the modulators are given the same speed range and the required speed shift is set directly in mm/s in a separate program window.

Comparative measurements using a detector based on a thin (0.15 mm) NaI crystal and the described method with a modulation velocity shift of 0.215 mm/s, a ^{57}Co source in Rh and a thin (7 microns) alpha-Fe foil demonstrated the following results: the effect values of the inner lines are 3.7% and 7.36% with their widths of 0.25 mm/s and 0.175 mm/s, respectively.

The use of the described modulation scheme makes it possible to expand the search area for more efficient materials for resonant detector converters, and to use sources in any matrix for existing detectors. An interesting application of such a modulation scheme would be the use of a moving resonant detector to register synchrotron radiation.

МЁССБАУЭРОВСКИЙ СПЕКТРОМЕТР С ПОДВИЖНЫМ РЕЗОНАНСНЫМ ДЕТЕКТОРОМ И СИНХРОННОЙ СИСТЕМОЙ ДОПЛЕРОВСКОЙ МОДУЛЯЦИИ

Д.А. Сарычев*, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич

НИИ физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия
**e-mail:* dasarychev@sfedu.ru

Разработан новый мёссбауэровский спектрометр с синхронно движущимися резонансным сцинтилляционным детектором и радионуклидным источником на основе двух доплеровских модуляторов, двух управляющих электронных блоков спектрометра и специального программного обеспечения, позволяющего задание необходимой величины рассинхронизации движения в используемых режимах модуляции, таких как постоянное ускорение, постоянная скорость и режим «интервал».

Аналитический блок спектрометра состоит из двух модуляторов, аналогичных применяемым в составе спектрометра MC1104, закрепленных на массивном основании массой не менее 60 кг. Один модулятор перемещает стандартный радионуклидный источник, а другой – специальной конструкции резонансный сцинтилляционный детектор. Между движущимися источником и детектором располагается неподвижный исследуемый образец. Большая масса основания обусловлена необходимостью уменьшения величины сфазированных со стартовыми импульсами относительных паразитных колебаний источника и резонансного детектора. При необходимости между движущимися источником и детектором можно разместить криостат или нагреватель с исследуемым образцом.

Каждый модулятор управляется своим блоком электроники. Для синхронизации движения двух модуляторов два взаимозаменяемых электронных блока мёссбауэровского спектрометра MS-2020 коммутируются через имеющиеся разъемы и программно переключаются в особый режим совместной работы. Один из них, ведущий управляет всем спектрометром: движением модулятора, настройкой детектора и накоплением спектра, генерирует синхроимпульсы для ведомого блока электроники, который управляет движением второго ведомого модулятора. Контроль за аппаратурой осуществляется через два экземпляра управляющей программы спектрометра MS-2020, запущенных на одном компьютере.

Синхроимпульсы на ведомый модулятор передаются с определенной устанавливаемой пользователем спектрометра задержкой, определяемой разницей в изомерных сдвигах резонансных линий испускания источника и линией поглощения конвертора детектора. Это позволяет поддерживать точно в резонансе источник и детектор на протяжении всего рабочего участка периода колебаний модулятора, когда идёт накопление спектра. При работе в режиме «пилы» модуляторам задается одинаковый скоростной диапазон и в отдельном окне программы задаётся необходимый сдвиг скорости непосредственно в мм/с.

Проведенные сравнительные измерения с использованием детектора на основе тонкого (0.15 мм) кристалла NaI и описанного метода со сдвигом скорости модуляции на 0.215 мм/с, источника ^{57}Co в Rh и тонкой (7 мкм) фольги альфа-Fe продемонстрировали следующие результаты: величины эффекта внутренних линий 3.7% и 7.36% при их ширине 0.25 мм/с и 0.175 мм/с соответственно.

Применение описанной схемы модуляции позволяет расширить область поиска более эффективных материалов конверторов резонансных детекторов, а для имеющихся детекторов использовать источники в любой матрице. Интересным применением подобной схемы модуляции было бы использование движущегося резонансного детектора для регистрации синхротронного излучения.

THE DIFFERENTIAL NONLINEARITY TESTING FOR THE VELOCITY DRIVING SYSTEMS IN MÖSSBAUER SPECTROMETERS USING REFERENCE ABSORBER α-Fe FOIL

V.A. Semionkin[1*], E. Kuzmann[2], Z. Homonnay[2], M.I. Oshtrakh[1]

[1]*Department of Experimental Physics, Institute of Physics and Technology, Ural Federal University, Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*

[2]*Laboratory of Nuclear Chemistry, Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary*

**e-mail: sva1946@mail.ru*

The application of various reference absorbers for testing the quality of the velocity driving system in various Mössbauer spectrometers has recently been suggested in [1]. In the present work, we pay attention to the estimation of the differential nonlinearity (*DNL*) in several different Mössbauer spectrometers using the same thin α-Fe foil of 7 μm. The principle of the differential nonlinearity estimation is based on the fitting of the α-Fe foil spectrum using: (i) one magnetic sextet and (ii) six singlets. Then the distances between the 1st and the 2nd peaks ($A_{1,2}$ and $B_{1,2}$ for both fits, respectively), the 2nd and the 3rd peaks ($A_{2,3}$ and $B_{2,3}$ for both fits, respectively), etc., are determined. Calculation of the differential nonlinearities for corresponding velocity ranges (between two neighboring peaks) can be done using the formula:

$$DNL_{m,n} = |A_{m,n} - B_{m,n}|/A_{m,n}. \quad (1)$$

The room temperature Mössbauer spectra of α-Fe foil were measured at Eötvös Loránd University (Budapest) using Ranger Electronics and Wissel spectrometers and at the Ural Federal University (Ekaterinburg) using SM-2201 spectrometers. The triangular velocity reference signal was used in both Ranger Electronics and Wissel spectrometers with measurements in transmission geometry with moving source. Therefore, for analysis, only the direct parts of the two mirror spectra measured in 256 channels were used. Saw-tooth velocity reference signal was used in the case of SM-2201 spectrometers with the spectra measured in 4096 channels in transmission geometry with moving absorber. Some of these spectra were converted into 2048-, 1024- and 256-channel spectra for comparison of these spectra from the point of view of nonlinearity. The results obtained for the 10 measured Mössbauer spectra demonstrate that the number of channels slightly affects the values of *DNL*. The most significant effect on the nonlinearity can be seen for the out-of-tune velocity driving system. In this case, the values of *DNL* can be as high as 10–100 times of those of the adjusted velocity driving systems the *DNL* values of which are in the range 0.0001–0.0030 arbitrary units for different velocity ranges and for different spectrometers. Therefore, this method can be used for testing the differential nonlinearity in various spectrometers used triangular or saw-tooth velocity reference signals.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, project # FEUZ-2020-0060. M.I.O. was supported in part by the Ural Federal University project within the Priority-2030 Program.

[1] M.I. Oshtrakh and V.A. Semionkin, *Hyperfine Interact.*, **242**, 28 (2021).

ОЦЕНКА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ СИСТЕМЫ ДВИЖЕНИЯ В МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОМЕТРАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭТАЛОННОГО ПОГЛОТИТЕЛЯ ФОЛЬГИ α-Fe

В.А. Семенкин[1*], Э. Кузманн[2], З. Хомоннай[2], М.И. Оштрах[1]

[1]*Кафедра экспериментальной физики, Физико-технологический институт, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*
[2]*Лаборатория ядерной химии, Институт Химии, Университет им. Л. Ётвоша, Будапешт, Венгрия*
**e-mail: sva1946@mail.ru*

Применение различных эталонных поглотителей для проверки качества системы движения в различных мессбауэровских спектрометрах было недавно предложено в [1]. В настоящей работе мы уделяем внимание оценке дифференциальной нелинейности (*DNL*) в нескольких различных мессбауэровских спектрометрах с использованием одной тонкой фольги α-Fe толщиной 7 мкм. Принцип оценки дифференциальной нелинейности основан на аппроксимации спектра фольги α-Fe с использованием: (i) одного магнитного секстета и (ii) шести синглетов. Затем определяются расстояния между 1-м и 2-м пиками ($A_{1,2}$ and $B_{1,2}$ для обеих аппроксимаций, соответственно), 2-м и 3-м пиками ($A_{2,3}$ and $B_{2,3}$ для обеих аппроксимаций, соответственно) и т. д. Расчет дифференциальной нелинейности для соответствующих диапазонов скорости (между двумя соседними пиками) может быть выполнен по формуле:

$$DNL_{\mathrm{m,n}} = |A_{\mathrm{m,n}} - B_{\mathrm{m,n}}|/A_{\mathrm{m,n}}. \quad (1)$$

Мессбауэровские спектры фольги α-Fe были измерены при комнатной температуре в Eötvös Loránd University (Будапешт) на спектрометрах Ranger Electronics и Wissel и в Уральском федеральном университете (Екатеринбург) на спектрометрах СМ-2201. В спектрометрах Ranger Electronics и Wissel использовался опорный сигнал скорости треугольной формы, измерения проводились в геометрии пропускания с движущимся источником. Поэтому для анализа использовались только «прямые» спектры из двух зеркальных спектров, измеренные в 256 каналов. Пилообразный опорный сигнал скорости использовался в спектрометре СМ-2201 с измерением спектров в 4096 каналов в геометрии пропускания с движущимся поглотителем. Некоторые из этих спектров были конвертированы в спектры на 2048, 1024 и 256 каналов для сравнения этих спектров с точки зрения нелинейности. Результаты, полученные для 10 мессбауэровских спектров, показали, что число каналов в спектре слегка влияет на значения *DNL*. Наиболее значительное влияние на нелинейность можно увидеть для расстроенной системы движения. В этом случае величины *DNL* могут быть от 10 до 100 раз больше, чем для настроенных систем движения, для которых значения *DNL* находятся в диапазоне 0.0001–0.0030 условных единиц для различных диапазонов скорости и для различных спектрометров. Поэтому этот метод может быть использован для проверки дифференциальной нелинейности в различных спектрометрах, использующих треугольный или пилообразный опорные сигналы скорости.

[1] M.I. Oshtrakh and V.A. Semionkin, *Hyperfine Interact.*, **242**, 28 (2021).

ON GRAIN BOUNDARY SEGREGATIONS AND RELATED PHENOMENA IN NANOCRYSTALLINE ALLOYS BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

G.A. Dorofeev[1*], V.E. Porsev[1], A.L. Ulyanov[1], O.M. Nemtsova[1]

[1]*Udmurt Federal Research Center UB RAS, Izhevsk, Russia*
**e-mail: gadorofeev@mail.ru*

Nanocrystalline (NC) materials have properties often superior to those of their macrocrystalline counterparts. However, the high density of high-energy grain boundaries in NC materials makes them unstable relative to grain growth, which constrains the use of these materials at elevated temperatures. There are two approaches to solving this problem: thermodynamic and kinetic stabilization of grain size [1]. Segregations of impurity atoms in grain boundaries can provide a synergistic combination of these two approaches. Grain boundary segregations (GBS) reduce the energy of the boundaries and thus reduce the thermodynamic driving force of grain coarsening. GBS pin boundaries and thereby restrain their migration. The number of methods for studying GBS, especially in NC alloys, is very limited. Mössbauer spectrometry, due to its high locality, belongs to these methods.

The report presents the methodical principles of the Mössbauer analysis of segregation phenomena in the NC iron-based solid solutions. Segregation can provoke the precipitation of second phases at the boundaries. The redistribution of elements during the GBS formation in Fe-based magnetic alloys is accompanied by a change in the distribution function of hyperfine fields $P(H)$. A semi-quantitative estimate of the redistribution of impurity atoms is given by the $P(H)$ parameters: the average effective magnetic field at the resonant core $\langle H \rangle$ and the width of the hyperfine fields distribution W, which can be calculated from the function $P(H)$ on the interval ($H_{\min} - H_{\max}$) as $\langle H \rangle = \int_{Hmin}^{Hmax} HP(H)dH$ and $W = \int_{Hmin}^{Hmax} P(H)dH/P_{max}(H)$. The phenomena of short-range atomic ordering, clustering or phase separation lead to a change in the parameters $\langle H \rangle$ and W. An important quantitative characteristic of segregation is the Cowley parameter of the short-range order α_i, where i is the number of the coordination sphere of Fe atoms: $\alpha_i = 1 - x_i^*/x$, where x and x_i^* are the average (or nominal) impurity concentration in a solid solution and the apparent (local) impurity concentration in the i-th coordination sphere of iron atoms, respectively. A positive value of the short-range order parameter ($\alpha_i > 0$) indicates segregation or clustering. The values of α_i can be found by fitting the Mössbauer spectrum taking into account the binomial probability distribution of the atomic environment configurations of iron atoms $P_i(n_i, x_i^*) = \binom{Z_i}{n_i}(x_i^*)^{n_i}(1 - x_i^*)^{Z_i - n_i}$ and the model spectrum $I(v) = \sum_{i=1}^{l}\sum_{n_i=0}^{Z_i} P_i(n_i, x_i^*)L_i(n_i, v)$. Here n_i is the number of impurity atoms in the i–th coordination sphere of the Fe atom, Z_i is the coordination number of the i-th sphere, l is the maximum number of coordination spheres taken into account, L_i is Lorentzian sextet for individual configurations of the atomic environment. The clustering stage may end with the stage of a new phase formation or phase separation. For the case of iron-containing phases, the phase composition can be estimated from the Mössbauer spectrum. Accounting for the material balance equations gives the amount of the j-th phase in the alloy $X_j = \frac{S_j C_r}{C_{rj} f_j' \sum_{k=1}^{m} S_k/f_k'}$, where C_i is the atomic fraction of the i-th component in the alloy, C_{ij} is the atomic fraction of the i-th component in the j-th phase, S and f' are the relative area of the subspectrum and the probability of γ-quanta absorption for the corresponding phase, the index r refers to the resonance isotope.

The study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme no. 121030100003-7).

[1] H. Peng, Z. Jian, and F. Liu, Int. J. Ceramic Eng. Sci. **2**, 49-65 (2020).

О ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ СЕГРЕГАЦИЯХ И СОПУТСТВУЮЩИХ ЯВЛЕНИЯХ В МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

Г.А. Дорофеев[1*], В.Е. Порсев[1], А.Л. Ульянов[1], О.М. Немцова[1]

[1]*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия*
**e-mail: gadorofeev@mail.ru*

Нанокристаллические (НК) материалы обладают свойствами, часто превосходящими свойства их крупнокристаллических аналогов. Однако большая плотность высокоэнергетических границ зерен в НК материалах делает их нестабильными относительно роста зерна, что сдерживает применение этих материалов при повышенных температурах. Существует два подхода в решении данной проблемы: термодинамическая и кинетическая стабилизация размера зерна [1]. Сегрегации примесных атомов в границах зерен могут обеспечить синергетическое сочетание этих двух подходов. Зернограничные сегрегации (ЗГС) уменьшают энергию границ и таким образом уменьшают термодинамическую движущую силу укрупнения зерна. ЗГС закрепляют границы и тем самым сдерживают их миграцию. Количество методов изучения ЗГС, особенно в НК сплавах, весьма ограничено. Мёссбауэровская спектрометрия, благодаря своей высокой локальности, принадлежит к этим методам.

В докладе представлены методические основы мёссбауэровского анализа сегрегационных явлений в НК твердых растворов на основе железа. Сегрегации могут провоцировать выделение вторых фаз на границах. Перераспределение элементов при формировании ЗГС в магнитных сплавах на основе Fe сопровождается изменением функции распределения сверхтонких полей $P(H)$. Полуколичественную оценку перераспределения атомов примеси дают параметры $P(H)$: среднее эффективное магнитное поле на резонансном ядре $\langle H \rangle$ и ширина распределения сверхтонких полей W, которые могут быть вычислены из функции $P(H)$ на интервале (H_{min} – H_{max}) как $\langle H \rangle = \int_{Hmin}^{Hmax} HP(H)dH$ и $W = \int_{Hmin}^{Hmax} P(H)dH/P_{max}(\mathrm{H})$. Явления ближнего атомного упорядочения, кластеризации или распада приводят к изменению параметров $\langle H \rangle$ и W. Важной количественной характеристикой сегрегирования является каулевский параметр ближнего порядка α_i, где i - номер координационной сферы атомов Fe: $\alpha_i = 1 - x_i^*/x$, где x и x_i^* – средняя (или номинальная) концентрация примеси в твердом растворе и кажущаяся (локальная) концентрация примеси в i-той координационной сфере атомов железа соответственно. Положительное значение параметра ближнего порядка ($\alpha_i > 0$) свидетельствует о сегрегациях или кластеризации. Величины α_i могут быть найдены посредством додгонки мёссбауэровского спектра с учетом биномиального распределения вероятностей конфигураций атомного окружения атомов железа $P_i(n_i, x_i^*) = \binom{Z_i}{n_i}(x_i^*)^{n_i}(1 - x_i^*)^{Z_i - n_i}$ и модельного спектра $I(v) = \sum_{i=1}^{l}\sum_{n_i=0}^{Z_i} P_i(n_i, x_i^*)L_i(n_i, v)$. Здесь n_i – число атомов примеси в i-той координационной сфере атома Fe, Z_i – координационное число i-той сферы, l – максимальное число учитываемых координационных сфер, L_i – секстет лоренцевских линий для индивидуальных конфигураций атомного окружения. Стадия кластеризации может завершаться стадией нового фазообразования или фазового разделения. Для случая железосодержащих фаз фазовый состав можно оценить из мёссбауэровского спектра. Учет уравнений материального баланса дает количество j-той фазы в сплаве $X_j = \frac{S_j C_r}{C_{rj} f_j' \sum_{k=1}^{m} S_k/f_k'}$, где C_i – атомная доля i-го компонента в сплаве, C_{ij} – атомная доля i-го компонента в j-той фазе, S и f' - относительная площадь подспектра и вероятность поглощения γ-квантов для соответствующей фазы, индекс r для атомов резонансного изотопа.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (тема № 121030100003-7).

UPGRADE OF THE CLOSED-CYCLE CRYOSTAT FOR MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

V.A. Zayakhanov[1*], S.S. Starchikov[1], K.O. Funtov[1], M. Klenov[2], I. Bondarenko[2], K.V. Frolov[1], I.S. Lyubutin[1]

[1]*Shubnikov Institute of crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia*
[2]*OOO Cryogennye Pribory, Moscow, Russia http://cryopribor.ru/*
**e-mail: zaiahanov@gmail.com*

Currently, closed-cycle cryostats are increasingly used for fundumental and applied scientific research instead of bath type and continuous flow cryostats. Their main advantage is the absence of the need to use an expensive refrigerant – liquid helium (cryogen-free). This is especially important for Mössbauer studies, which usually carried out for a long time (days, weeks, sometimes months). Typically, sample is cooled by exchange gas (helium of technical purity) which provides the heat exchange between the sample and the cold head.

There are two main types of cryocoolers: based on the Gifford-McMahon cycle and based on "pulsating" tubes. A common disadvantages of these cryocoolers are the mechanical vibrations and noise caused by the periodic pumping of cooling gas at high pressure and (for Gifford-McMahon cycle) cycling movements of dispacer of certain mass. This issues are negatively affects the results of experiments, since even a small level of vibration (at the micron level) causes a noticeable broadening of the γ-resonance absorption spectra.

At present, Mössbauer cryostats for scientific research are produced by commercial manufacturers, such as LakeShore (Janis), CryoIndustries of America Inc, ICEoxford, Advanced Research Systems Inc, Montana Instruments, OOO Cryogennye Pribory, and are also developed by individual scientific groups. In 2010, at the Institute of Crystallography of the Russian Academy of Sciences, members of the scientific group led by I.S. Lyubutin developed, created and put into operation a closed-cycle Mössbauer cryostat on the Gifford-McMahon cycle [1].The cooling capacity of the cold head at 4.2 K was 1 W. The capabilities of cryostat allowed for Mössbauer studies in the temperature range of 4.2 - 300 K with a minimum broadening of the spectra of about 15% at 5K, which was superior to similar cryostats in the world. However, over 10 years of operation, the resource of the cold head was exhauste. Along with the need to replace the cold head, additional upgrades were made to various cryostat units to minimize broadening and the LabView program was developed to control the temperature of the sample.

This work describes the upgraded cryostat units, the cryostat characteristics, and the results of line broadening measurements on a-Fe foil and a $FeBO_3$ single crystal (Fig.1) before and after upgrade. It was shown that in the new design at 5K the line broadening is about 4% and it does not increase with increasing temperature; at 4.2 K the broadening is about 28%, which is significantly less than in [1]. An analysis of the spectra showed a significant improvement in the line width parameter at half-maximum , as well as in the intensity. In particular, the 2nd line widths are 0.3710(54) mm/s and 0.2972(18) mm/s for the previous and new cryostat designs, respectively.

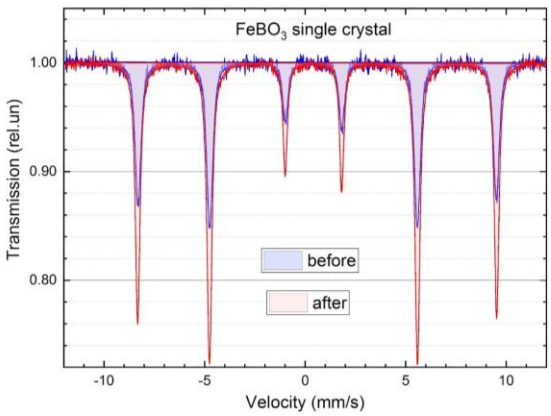


Fig. 1. Mössbauer spectra of the same $FeBO_3$ single crystal at T=10K before and after cryostat upgrade.

Authors acknowledge Dr. P.G. Naumov for his help and fruitfull discussions. The work on Mössbauer measurements of $FeBO_3$ at low temperatures was supported by RFBR grant 19-29-12016-mk.

[1] P.G. Naumov, I.S. Lyubutin, et.al., *Instruments Exp. Tech.* ***53*** (5), 770–776. (2010)

МОДЕРНИЗАЦИЯ КРИОСТАТА ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА ДЛЯ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

В.А. Заяханов[1*], С.С. Старчиков[1], К.О. Фунтов[1], М. Клёнов[2], И. Бондаренко[2], К.В. Фролов[1], И.С. Любутин[1]

[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*
[2]*ООО Криогенные приборы, Москва, Россия http://cryopribor.ru/*
**e-mail: zaiahanov@gmail.com*

В настоящее время для фундаментальных и прикладных научных исследований вместо заливных и проточных криостатов все чаще используются криорефрижераторы замкнутого цикла. Основное их преимущество – отсутствие дорогостоящего хладагента, жидкого гелия (cryogen-free). Особенно это преимущество актуально для мёссбауэровских исследований, которые, как правило, занимают длительное время (дни, недели, иногда месяцы). В типовых криостатах замкнутого цикла охлаждение образца происходит за счет обменного газа (гелий технической чистоты), который обеспечивает теплообмен между образцом и криоголовкой.

По принципу работы можно выделить два основных типа криорефижераторов: 1. Криокуллеры работающие на цикле Гиффорда-МакМагона и 2. Криокуллеры на основе «пульсирующих» труб. Общим недостатком этих криокуллеров являются механические вибрации и шум, вызванные периодической прокачкой охлаждающего газа при высоком давлении и (в случае цикла Гиффорда-МакМагона) циклическое движение вытеснителя, имеющего значимую массу. Даже небольшой уровень вибраций (на уровне микронов) вызывает заметное уширение экспериментальных спектров γ-резонансного поглощения.

В настоящее время мессбауэровские криостаты для научных исследований выпускаются как коммерческими производителями, например, LakeShore(Janis), CryoIndustries of America Inc, ICEoxford, Advanced Research Systems Inc, Montana Instruments, ООО Криогенные приборы, так и разрабатываются отдельными научными группами. В 2010 году сотрудниками научной группы И.С. Любутина в Институте кристаллографии РАН был разработан, сделан и введен в эксплуатацию мёссбауэровский криостат замкнутого цикла на цикле Гиффорда-МакМагона [1]. Холодопроизводительность криоголовки при 4.2 К составляла 1 Вт. Криостат позволял проводить мёссбауэровские исследования в диапазоне температур 4.2 – 300 К с минимальным уширением около 15% при 5К, что превосходило уровень мировых аналогов криостата. Однако за 10 лет работы ресурс криорефрижиратора был исчерпан, что привело к увеличению уширению линий. Была проведена дополнительная модернизация различных узлов криостата для минимизации уширения линий и написана программа в среде LabView для управления температурой образца.

В данной работе приводится описание модернизированных узлов криостата, характеристики криостата, а также результаты тестовых измерений уширения линий на примере спектров фольги a-Fe и монокристаллов $FeBO_3$ до и после модернизации. Показано, что в новой конструкции при 5К уширения составляют около 4% и данные уширения не увеличиваются с ростом температуры. При 4.2 К уширения составляют около 28%, что заметно ниже, чем в работе [1]. Мёссбауэровские спектры одного и того же монокристалла $FeBO_3$, измеренные при 10К до и после модернизации представлены на Рис.1. Анализ спектров показал существенное улучшения параметра ширины линии на полувысоте и интенсивности. При аппроксимация функцией Псевдо-Войта 2-й линии в спектре получены значения ширины 0.3710(54) мм/с и 0.2972(18) мм/с для старой и новой конструкции криостата соответственно.

Авторы выражают благодарность к.ф.-м.н. П.Г. Наумову за помощь, ценные замечания и обсуждение результатов работы. Работы по мёссбауэровским измерениям $FeBO_3$ при низких температурах выполнены при поддержке гранта РФФИ № 19-29-12016-мк.

EXCLUSIVE CAPABILITIES OF THE REGULARIZATION METHOD IN APPLICATION TO MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

O.M. Nemtsova*, G.N. Konygin

Udmurt Federal Research Center, UB of the RAS, Izhevsk, Russia
**e-mail: olganemtsova@udman.ru*

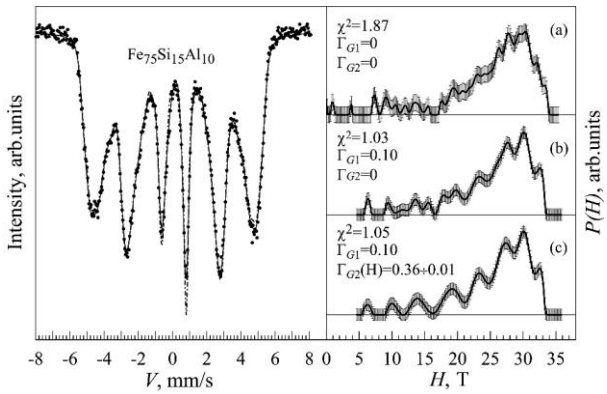


Fig. 1. The distribution function of the hyperfine magnetic field *P(H)* obtained by processing the Mössbauer spectrum of the $Fe_{75}Si_{15}Al_{10}$ solid solution using the Tikhonov regularization method with an integral kernel in the form of (a) the Lorentz function; b) a simple convolution of the Lorentz and Gaussian functions of width Γ_{G1}; c) double convolution with widths Γ_{G1} and Γ_{G2} (depending on the field *H*).

The paper demonstrates the capabilities of the Tikhonov regularization method in processing Mössbauer spectra, the analysis of which using fitting methods is problematic.

To process the Mössbauer spectra of disordered supersaturated binary and multicomponent systems, a mathematical model is proposed using double convolution of the Lorentz function and two Gaussians, as well as a scaling factor for projecting a hyperfine magnetic field onto the velocity scale of the experimental spectrum [1]. It is shown that in the case of using a simple convolution of the Lorentz and Gauss functions to describe the spectra, the solution may also be incorrect: an excessive number of local maxima and the problem of their identification in the distribution function of the HFMF (Fig. 1a,b).

When using double convolution, the number of local maxima on the distribution function of the HFMF and their relative intensities fully correspond to the probabilities of local atomic configurations calculated from the binomial distribution with K impurity atoms in the nearest atomic environment for a bcc-lattice with a coordination number *Z*=8. In addition, the dependence of the width of the Gaussian function Γ_{G2} on the hyperfine magnetic field was found for both binary $Fe_{75}Ge_{25}$ and 3-component $Fe_{75}Si_{15}Al_{10}$ disordered supersaturated solid solutions. This may be a consequence of the manifestation of local distortions of the bcc-structure and symmetry of the environment of the Fe atom (Fig. 1c).

For the processing of Mössbauer spectra, in which the effects of broadening of the resonance line are not observed and for the description of which only the elementary Lorentz function is used, the use of Tikhonov's weighted regularization method makes it possible to isolate close spectral components [2]. The model example shows that at α=0.002 the resolution of spectral components is not performed, when α=0.00003 spectral lines are resolved in full accordance with the model (Fig. 2a,b). A further decrease in the regularization parameter does not worsen the value of χ^2, but leads to a solution that is fundamentally inconsistent with the model distribution *P(H)* (Fig. 2c). In a

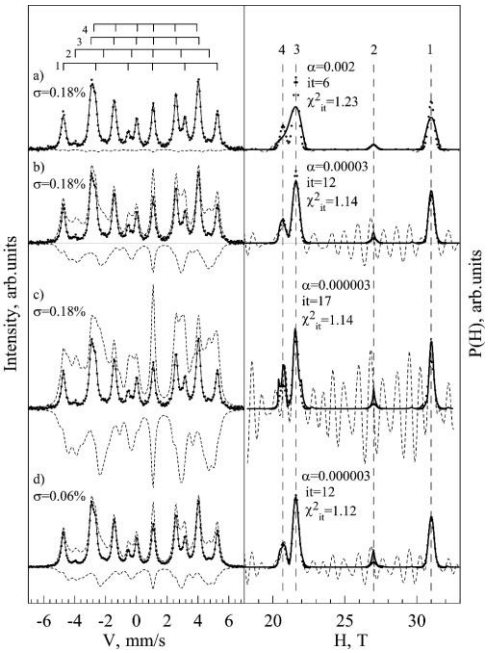


Fig. 2. Influence of the regularization parameter and statistical error on the solution (model - points, simple solution - dashed line, weighted regularization - solid line): a) components 3 and 4 are not resolved, statistics σ=0.18%; b) all lines are resolved, the model is completely restored, σ=0.18%; c) the solution is incorrect, σ=0.18%; d) all lines are resolved, the model is completely restored, σ=0.06%

real experiment, this can lead to an unreliable physical interpretation of the results. For a spectrum with a smaller statistical error (N=3000000, σ=0.06%), the iterative procedure leads to the correct result with the same α=0.000003 (Fig. 2d). The use of the weighted regularization method fundamentally improves the quality of spectrum processing and increases the information content of the spectroscopic method.

The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation 121030100003-7.

[1] G.N. Konygin, O.M. Nemtsova, J. Appl. Spectrosc. **88** (6), 1176–1182 (2022).
[2] V.E. Porsev, O.M. Nemtsova, G.N. Konygin, Khimicheskaya fizika i mezoskopiya. **21** (4), 514-524 (2019) [in Russia].

УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В ПРИЛОЖЕНИИ К МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

О.М. Немцова*, Г.Н. Коныгин

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия
**e-mail: olganemtsova@udman.ru*

В работе продемонстрированы возможности метода регуляризации Тихонова при обработке мёссбауэровских спектров, анализ которых с использованием методов подгонки является проблематичным.

Для обработки мёссбауэровских спектров разупорядоченных пересыщенных бинарных и многокомпонентных систем предложена математическая модель с использованием двойной свертки функции Лоренца и двух Гауссианов, а также масштабирующего коэффициента проектирования сверхтонкого магнитного поля на шкалу скоростей экспериментального спектра [1]. Показано, что в случае применения простой свертки функций Лоренца и Гаусса для описания спектров решение также может быть некорректным: избыточное количество локальных максимумов и проблема их идентификации в функции распределения СТМП (Рис. 1а,б). При использовании двойной свертки количество локальных максимумов на функции распределения СТМП и их относительные интенсивности полностью соответствуют рассчитанным по биномиальному распределению вероятностям локальных атомных конфигураций с K атомами примеси в ближайшем атомном окружении для ОЦК решетки с координационным числом Z=8. Помимо этого обнаружена зависимость ширины функции Гаусса Γ_{G2} от сверхтонкого магнитного поля как для бинарного $Fe_{75}Ge_{25}$, так и 3х-компонентного $Fe_{75}Si_{15}Al_{10}$ разупорядоченных пересыщенных твердых растворов. Это может быть следствием проявления локальных искажений ОЦК структуры и симметрии окружения атома Fe (Рис. 1в).

Для обработки мёссбауэровских спектров, в которых не наблюдаются эффекты уширения резонансной линии и для описания которых используется только элементарная функция Лоренца, использование метода взвешенной регуляризации Тихонова позволяет выделять близкие спектральные составляющие [2]. На модельном примере показано, что при α=0.002 разрешение спектральных составляющих не выполняется, при α=0.00003 линии разрешаются в полном соответствии с моделью (Рис. 2а,б). Дальнейшее уменьшение параметра регуляризации не ухудшает значение χ^2, но приводит к решению, кардинально не соответствующему модельному распределению $P(H)$ (Рис. 2в). В реальном эксперименте это может привести к недостоверной физической интерпретации результатов. Для спектра с меньшей статистической ошибкой (N=3000000, σ=0.06%) итерационная процедура приводит к правильному результату с тем же α=0.000003 (Рис. 2г). Применение метода взвешенной регуляризации принципиально улучшает качество обработки спектров и увеличивает информативность спектроскопического метода.

CREATING COMPLEX MODELS OF MOSSBAUER SPECTRA WITH MULTIPLE COMPONENTS IN SpectrRelax

M.E. Matsnev*, V.S. Rusakov

Lomonosov Moscow State University, Moscow (Russia)
**e-mail: mike@haali.su*

Mossbauer spectra of samples where Fe atoms are in multiple different magnetic and structural positions have complex hyperfine structure resulting in a lot of separate components. Some parameters of these subspectra may have identical values or may have dependencies defined by sample's crystallographic or magnetic structure. Adequate modelling of such spectra requires adding many subspectra to the model with dependent parameters.

In SpectrRelax we can define arbitrary dependencies between parameters by adding analytical expressions and free variables to the model [1,2]. Unfortunately working with such models becomes rather difficult when the number of subspectra and expressions reaches a couple of dozens, the probability of various mistakes rises with the size of the model. To simplify such models, we have added an option to define custom components using the embedded Lua language interpreter without modifying SpectrRelax software itself, with the possibility to reuse existing models.

The extension of the capabilities of the SpectrRelax program is demonstrated in the report on the example of a model interpretation of the spectra of alloys of the $Tb(Fe_{1-x}Al_x)_2$ [3] and $Ho(Fe_{1-x}Mn_x)_2$ systems with the Laves phase structure C15 (Fig.1-2). The creation and use of a model that simultaneously takes into account the structural and magnetic non-equivalence of the positions of Fe atoms in these alloys made it possible to obtain new information about:

- magnetic easy axis direction,
- hyperfine magnetic field anisotropy at the ^{57}Fe nuclei locations,
- substitution of Fe atoms by Al and Mn influence on the hyperfine parameters of ^{57}Fe nuclei's Mossbauer spectra.

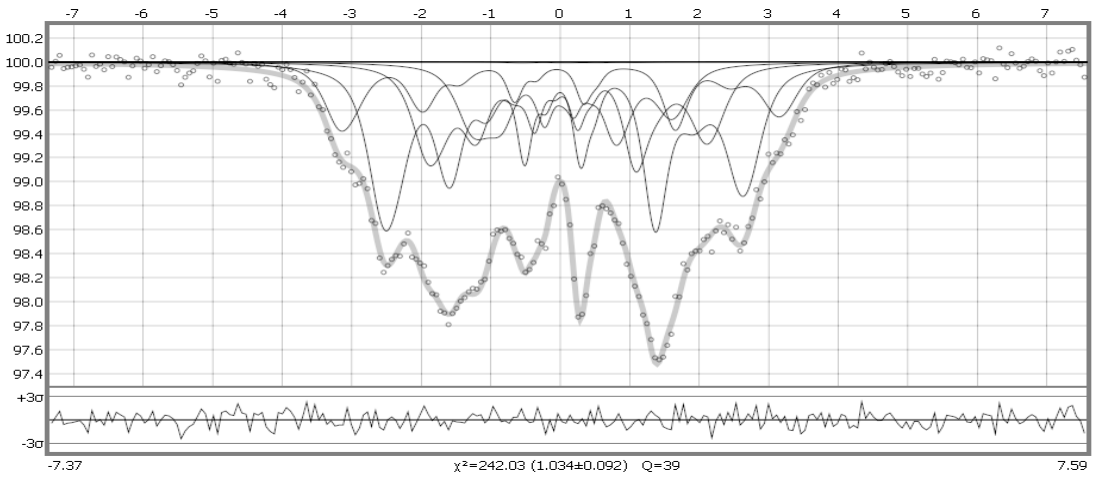


Fig. 1. The result of model fitting of the Mössbauer spectrum of alloy $Tb(Fe_{0.8}Al_{0.2})_2$.

[1] M.E. Matsnev, V.S. Rusakov. SpectrRelax: An Application for Mössbauer Spectra Modeling and Fitting. // AIP Conf. Proc., 1489, pp. 178-185 (2012).

[2] M.E. Matsnev, V.S. Rusakov. Study of spatial spin-modulated structures by Mössbauer spectroscopy using SpectrRelax. // AIP Conf. Proc., 1622, pp. 40-49 (2014).

[3] A.S. Ilyushin, A.A. Opalenko, A.I. Firov, E.V. Solodov, Z.S. Umkhaeva. Hyperfine Magnetic Interactions in $Tb(Fe_{1-x}Al_x)_2$ Alloys. // Physics of the Solid State, vol. 56, no. 3, pp. 501–504 (2014).

СОЗДАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ В ПРОГРАММЕ SpectrRelax

М.Е. Мацнев*, В.С. Русаков

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва (Россия)
**e-mail: mike@haali.su*

Мессбауэровские спектры образцов, в которых атомы железа расположены во многих структурно- и магнитно-неэквивалентных позициях, обладают сложной сверхтонкой структурой, состоящей из большого числа парциальных спектров. Часть параметров этих парциальных спектров может иметь одинаковые значения или быть связана соотношениями, обусловленными кристаллической и магнитной структурами образца. Модельная расшифровка таких спектров предполагает создание модели из отдельных парциальных спектров с физически обусловленными связями между их варьируемыми параметрами.

В программе SpectrRelax реализована возможность задавать практически произвольные связи между параметрами, создаваемые с помощью введения дополнительных варьируемых параметров и создания аналитических выражений [1,2]. Однако, при большом числе парциальных спектров и связей между их параметрами, которое может достигать несколько десятков, работать с такими моделями становится сложно, возрастает вероятность допустить ошибки в задании условий и связей. В SpectrRelax предусмотрен способ создавать новые модели парциальных спектров на основе уже существующих, встроенных в программу, моделей без изменения самой программы, путем написания фрагментов кода на встроенном языке программирования Lua.

Расширение возможностей программы SpectrRelax демонстрируется в докладе на примере модельной расшифровки спектров сплавов систем $Tb(Fe_{1-x}Al_x)_2$ [3] и $Ho(Fe_{1-x}Mn_x)_2$ со структурой фаз Лавеса C15 (Рис. 1-2). Создание и использование модели, которая учитывает одновременно структурную и магнитную неэквивалентность позиций атомов Fe в этих сплавах, позволило получить новую информацию об:

- ориентации оси легчайшего намагничивания,
- анизотропии сверхтонкого магнитного поля на ядрах ^{57}Fe,
- влиянии замещения атомов Fe атомами Al и Mn на сверхтонкие параметры мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe.

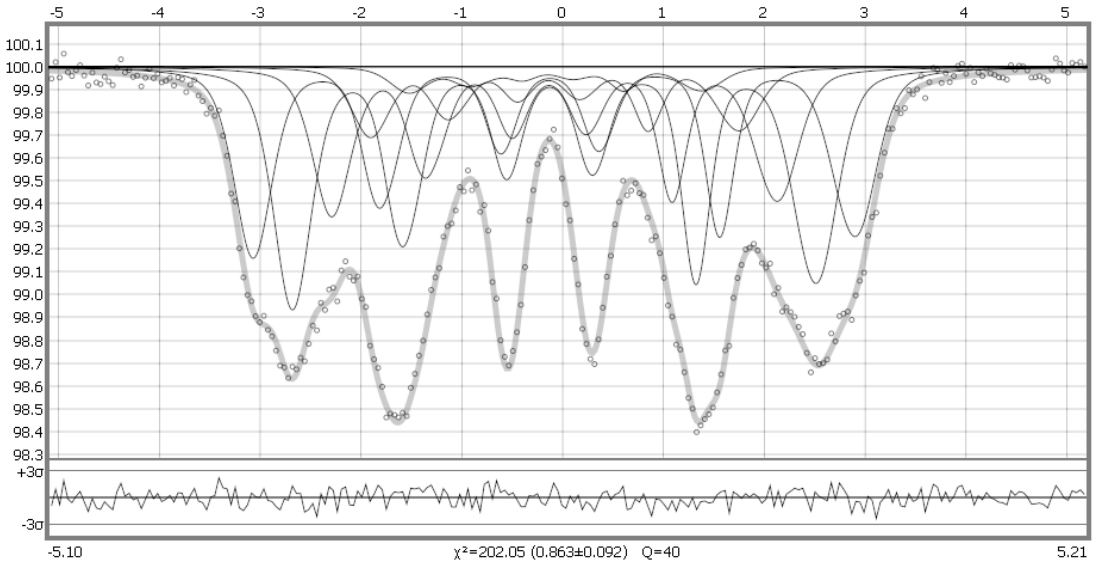


Fig. 2. The result of model fitting of the Mössbauer spectrum of alloy $Ho(Fe_{1-x}Mn_x)_2$.

TRANSFORMING THE LORENTZ LINESHAPE INTO ANOTHER ONE

E.N. Dulov*, M.T.R. Zaitov

Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan, Russian Federation
**e-mail: Evgeny.Dulov@kpfu.ru*

Representing Mossbauer spectra in a basis of Lorentz functions or their combinations is an ill-posed problem. Such a deconvolution requires apriory information about solution. For example, apriory smoothness of solution leads to the family of regularization methods which often based on the Tikhonov's algorithm. This work presents pre-treatment technique taking into account only the apriory information about natural lineshape of resonant isotope. The technique offered is a kind of finite impulse response filter which allows to replace Lorentz lineshape to required another lineshape.

The idea underliyng this work unexplicitly used in digital pulse processing algorithms, developed by Jordanov [1]. Here the pulse shape transforms to a convenient form by deconvolution of primary signal to delta-function, and then by convolution it with some other pulse shape function. In such a manner triangular and trapezoidal pulse shapers based on infinite impulse response filters can be constructed. Note that in practice the intermediate delta-function signal of this filter is not informative and looks like noise because it represents a solution of ill-posed problem. However, total linear transform of the digital shaper may provide output pulse with signal to noise ratio much better than the ratio for input signal. Such a behavior caused by spectral composition of the input and output signals. Generally, the linear transform supresses high-frequency components, whereas deconvolution does not, and such a behaviour may be effectively managed by output pulse shape selection.

Applied to Mossbauer spectroscopy the linear transformation which replaces the Lorentz lineshape to another one looks like composition of two linear operators. First of them describes deconvolution some composition of Lorentz functions to delta-functions, and the second convolutes delta-functions to desired lineshape.

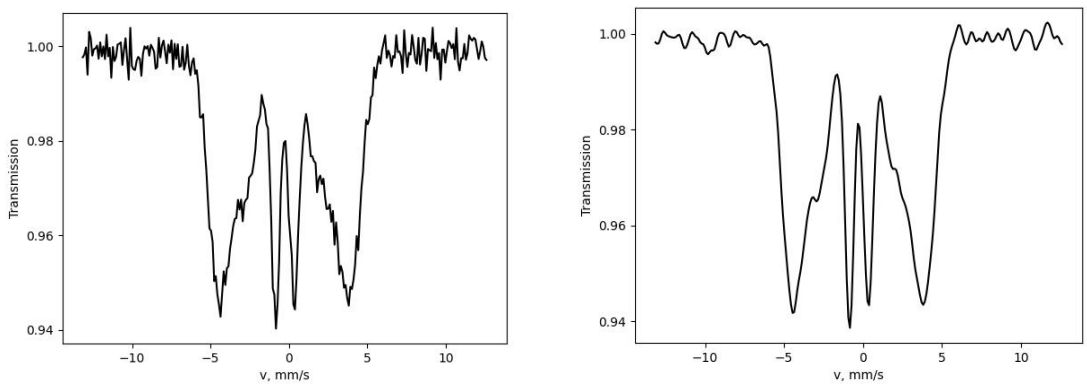


Fig. 1. Mossbauer spectra (^{57}Fe) of nanocrystalline alloy 5BDSR (Russian analog of FINEMET) before (left) and after (right) filtration with Lorentz lineshape replacement by Gauss lineshape.

An example of lineshape replacement is shown on Fig. 1. FWHM for Gauss function was selected twicely greater than the observed natural Lorentz linewidth and equal to 0.388 mm/s. Diffuse character of original experimental spectrum caused by local inhomogenities, that allows to use Voigt's function for the spectrum treatment [2]. Note, that filtered spectrum must consists only of Gauss lineshapes which may be calculated much faster or/and accurately than the Voigt lineshapes.

[1] V. T. Jordanov, NIMA **805**, 63–71 (2016).
[2] K. Lagarec and D.G. Rancourt, NIMB **129**, 266–280 (1997).

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФОРМЫ ЛИНИИ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА

Е.Н. Дулов*, М.Т.Р. Заитов

Институт физики, Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия
**e-mail: Evgeny.Dulov@kpfu.ru*

Представление мессбауэровских спектров в базисе функций Лоренца или их комбинации является некорректной задачей. Такая деконволюция (обращение свёртки) требует априорной информации о решении. Например, априорная гладкость решения приводит к семейству методов регуляризации, многие из которых основаны на алгоритме Тихонова. В данной работе представлена методика предварительной обработки, учитывающая только априорную информацию о естественной форме линии резонансного изотопа. Предлагаемая методика является разновидностью фильтра с конечной импульсной характеристикой, который позволяет заменить форму линии Лоренца на любую другую форму линии.

Идея этой работы неявным образом использована Жордановым в алгоритмах цифровой обработки импульсных сигналов с детекторов ионизирующего излучения [1]. В работе Жорданова форма импульса преобразуется в удобную форму деконволюцией первичного сигнала в дельта-функцию, а затем его свертки с какой-либо другой функцией формы импульса. Таким образом могут быть построены треугольные и трапециедальные формирователи импульсов на основе фильтров с бесконечной импульсной характеристикой. Отметим, что на практике сигнал промежуточной дельта-функции такого фильтра неинформативен и выглядит как шум, поскольку представляет собой решение некорректной задачи. Однако полное линейное преобразование цифрового формирователя может обеспечить выходной импульс с отношением сигнал/шум намного лучше, чем соотношение для входного сигнала. Такое поведение обусловлено спектральным составом входного и выходного сигналов. Как правило, итоговое линейное преобразование подавляет высокочастотные компоненты, в то время как деконволюция этого не делает. Таким поведением можно эффективно управлять путем выбора формы выходного импульса.

Применительно к мёссбауэровской спектроскопии линейное преобразование, заменяющее форму линии Лоренца на другую, выглядит как композиция двух линейных операторов. Первый из них описывает деконволюцию некоторой композиции функций Лоренца в дельта-функции, а второй сворачивает дельта-функции с желаемой формой линии.

Пример замены формы линии показан на рис. 1. Полуширина для функции Гаусса была выбрана в два раза больше наблюдаемой естественной ширины линии Лоренца и равна 0,388 мм/с. Диффузный характер исходного экспериментального спектра, обусловленный локальными неоднородностями, позволяет использовать функцию Фойгта для обработки спектра [2]. Заметим, что отфильтрованный спектр должен состоять только из гауссианов, которые могут быть рассчитаны намного быстрее и/или точнее, чем функция Фойгта.

MULTIVARIATE CURVE RESOLUTION FOR MOSSBAUER SPECTRA PROCESSING

V.V. Panchuk[1,2*], B. Debus[3], D.O. Kirsanov[1], V.G. Semenov[1,2]

[1] *Institute of Chemistry, St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russian Federation*
[2] *Institute for Analytical Instrumentation RAS, St. Petersburg, Russian Federation*
[3] *Air Quality Research Center, University of California, Davis, California, USA*
**e-mail: vitpan@mail.ru*

Traditional processing of Moessbauer spectra assumes decomposition of spectral data into separate multiplets (hypotheses) corresponding to various environments of the resonant nucleus. Typically these multiplets are the sets of Lorentzians with certain parameters of hyperfine interactions. The experimentally obtained spectra is represented as a superposition of these multiplets that are fitted to the data using standard techniques, such as e.g. Levenberg-Marquardt algorithm. As an outcome of this fitting one can obtain the parameters of the spectral lines and hyperfine interactions. In many real life examples the chemical states of resonant atom are numerous and Moessbauer spectra can have contributions from a large number of overlapping multiplets, thus leading to the difficulties in processing and uncertainties in the results. In this respect the development of automated instruments for spectral processing that would allow the determination of the number of spectral components and would not require the knowledge on initial multiplet parameters is an important task.

Multivariate Curve Resolution – Alternating Least Squares (MCR-ALS) is a well-developed method for separation of multicomponent spectral contributions which yields individual concentration profiles in a series of samples and individual spectra of contributing components in the mixtures. MCR-ALS is widely applied in analytical chemistry for processing the data derived from chromatographic, spectral and electrochemical instruments. There are several reports in the literature on the application of MCR-ALS to Moessbauer experimental data. In [1,2] this approach was applied for the processing of synchrotron Moessbauer spectra obtained during the study of battery charge/discharge processes on $FeSb_2$ electrode. It must be note, however, that the addressed system was quite simple and the spectra contained only two doublets. The purpose of the present study is to explore the potential and limitations of MCR-ALS in processing of complex multicomponent Moessbauer spectra. We will present the results of this approach applied to model three component kinetic system; real spectra from the experiments on YFeO3 formation in glycine-nitrate synthesis and real spectra form corrosion study in steam generator pipes.

[1] M. Fehse, M.T. Sougrati, A. Darwiche, V. Gabaudan, C. La Fontaine, L. Monconduit, L. Stievano, Journal of Materials Chemistry A, 6 (2018) 8724-8734
[2] M. Fehse, D. Bessas, A. Darwiche, A. Mahmoud, G. Rahamim, C. La Fontaine, R.P. Hermann, D. Zitoun, L. Monconduit, L. Stievano, M.T. Sougrati, Batteries & Supercaps, 2 (2019) 66-73

МНОГОМЕРНОЕ РАЗРЕШЕНИЕ КРИВЫХ ДЛЯ ОБРАБОТКИ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ

В.В. Панчук[1,2*], Б. Дебус[3], Д.О. Кирсанов[1], В.Г. Семенов[1,2]

[1] *Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Санкт-Петербург, Россия*
[2] *Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия*
[3] *Университет Калифорнии, Дэвис, США*
**e-mail: vitpan@mail.ru*

Традиционная обработка мессбауэровских спектров предполагает разложение спектральных данных на отдельные мультиплеты (гипотезы), соответствующие отдельным неэквивалентным состояниям резонансного атома. Как правило, такие мультиплеты представляют собой набор функций Лоренца связанных между собой параметрами сверхтонких взаимодействий. Экспериментальный спектр представляется как суперпозиция таких мультиплетов, которые подгоняются к нему с использованием стандартных алгоритмов, таких как, например, алгоритм Левенберга-Марквардта. В результате подгонки мультиплетов к экспериментальному спектру определяются параметры линий и сверхтонких взаимодействий. Во многих реальных образцах химические состояния резонансного атома многочисленны, а мессбауэровские спектры таких образцов имеют вклады большого числа перекрывающихся между собой мультиплетов, что может существенно затруднить обработку и привести к неоднозначным результатам. По этой причине для обработки таких спектров требуется привлечение дополнительных методов анализа. В этом отношении поиск автоматизированных инструментов обработки мессбауэровских спектров, позволяющих определять число компонент спектра и не требующих задания начальных параметров мультиплетов, является актуальной задачей.

Многомерное разрешение кривых с алгоритмом чередующихся наименьших квадратов (Multivariate Curve Resolution – Alternating Least Squares, MCR-ALS) является хорошо известным методом для разделения многокомпонентных смесей, в результате которого извлекается информация о профилях изменения концентраций от образца к образцу и индивидуальных спектрах отдельных компонент. Метод широко применяется в аналитической химии для обработки хроматографических, электрохимических, спектральных данных. В литературных источниках есть несколько примеров применения многомерного разрешения кривых для обработки мессбауэровских спектров. В работах [1,2] этот метод был применен для обработки синхротронных мессбауэровских спектров, полученных при изучении химических процессов, протекающих на электроде $FeSb_2$ батареи во время его заряда и разряда. Следует отметить, что исследуемые система была достаточно простой и спектры содержали только два дублета. Основная цель данного исследования - изучить возможности и ограничения MCR-ALS при обработке мессбауэровских спектров, содержащих большое число компонент. Будут представлены результаты аппробацити подхода на модельных спектрах трехкомонентной кинетической системы и на реальных спектрах, полученных при изучении процесса формирования YFeO3 при синтезе глицин-нитратного сгорания и при исследовании процессов коррозии, протекающих на внутренней поверхности трубы прямоточного парогенератора ЭУ.

[1] M. Fehse, M.T. Sougrati, A. Darwiche, V. Gabaudan, C. La Fontaine, L. Monconduit, L. Stievano, Journal of Materials Chemistry A, 6 (2018) 8724-8734
[2] M. Fehse, D. Bessas, A. Darwiche, A. Mahmoud, G. Rahamim, C. La Fontaine, R.P. Hermann, D. Zitoun, L. Monconduit, L. Stievano, M.T. Sougrati, Batteries & Supercaps, 2 (2019) 66-73

Authors

Abbas R. 78
Abdullin A.F. 26, 34, 76
Agafonov V.N. 56
Alekhina Yu.A. 28
Alekseeva O.A. 8
Alenkina I.V. 104, 106
Andreeva M.A. 64, 116, 120
Antonova A.V. 128
Arzhnikov A.K. 26, 70, 76
Aslandukova A.A. 16
Avdonin V.V. 126

Baulin R.A. 64, 116, 120
Bayukov O. A. 108, 110
Belyaev D.V. 104, 106
Bondarenko I. 160

Chausov F.F. 4
Chernov M.S. 128
Chistyakova N.I. 28, 128
Chuev M.A. 14, 44, 58
Chukin A.V. 124, 130, 132
Chulkina A.A. 82
Chumakov A. 8
Chumakov N.K. 56, 58

Danilov S.E. 86
Davydov V.A. 56
Debus B. 168
Dedushenko S.K. 142
Denisov A.E. 76
Dobysheva L.V. 4
Doludenko I.M. 58
Dorofeev G.A. 158
Dulov E.N. 166

Egizbek K. 62

Fadeev M.S. 46, 60, 62
Felner I. 104, 124, 130
Frolov K.V. 8, 18, 58, 144, 160
Funtov K.O. 56, 160

Gapochka A.M. 24, 40
Garbarino G. 8
Gaviko V.S. 20, 38
Gavrilyuk A.G. 68
Germov A.Yu. 36
Glazkova I.S. 10, 16, 40
Goloborodskiy B.Yu. 36
Golovnya O.A. 38
Goryunov M.V. 124, 136
Gribov I.V. 64, 116
Grigoreva T.F. 96
Gubaidulina T.V. 12, 40
Gudim I.A. 8
Gushchina N.V. 74

Herczeg B. 50
Homonnay Z. 50, 124, 156
Huseynov M.M. 138

Iskhakov R.S. 108, 110
Ivanenko I.P. 96
Ivanova A.G. 26, 76
Ivantsov M.I. 144
Izyurov V.V. 64, 116

Jargalan N. 18

Kadyrzhanov K.K. 60, 62
Kalai Selvan R. 30
Kamnev A.A. 100
Kamzin A.S. 54, 102
Kataeva N.V. 86, 88, 94
Kazantseva I.S. 4
Kharlamova S.A. 8
Khishigdemberel I. 96
Khristich S.V. 148, 154
Khudyakov K.E. 96
Kirsanov D.O. 168
Kis V.K. 104
Kiseleva T.Yu. 18, 78, 96, 128
Kitaev V.V. 148
Kleinerman N.M. 6, 20, 22
Klenov M. 160
Knyazev Yu.V. 108, 110
Kobayashi S. 18
Kondratev O.A. 64, 116
Konev A.S. 36
Konygin G.N. 162
Kouril L. 50
Kovács K. 100
Kozlov A.V. 80, 90
Kozlov K.A. 80, 86, 88, 90, 94
Kozlovskiy A.L. 46, 60, 62
Kubrin S.P. 92
Kuchesheva-Titova V.R. 8
Kudor M. 50
Kulakov V.I. 12
Kulikova L.F. 56
Kulikova M.V. 144
Kurmachev I.A. 36
Kuzmann E. 50, 100, 104, 124, 156

Lazareva E.V. 78, 96
Li O.A. 108, 110

Lukyanova E.N. 128
Lyashkov K.A. 88, 94
Lyubutin I.S. 8, 14, 56, 58, 68, 160
Lyubutina M.V. 56

Machala L. 50
Makarov E.V. 74, 84
Makarov N.A. 150
Makarova A.O. 24
Maksimova A.A. 124, 130, 132
Manjanna J. 18
Martinson K. 78
Matsnev M.E. 40, 164
Milyaev M.A. 120
Minin A.S. 36
Mogilenec Yu.A. 14
Morozov I.V. 32
Morozov V.V. 48
Mozzolai A. 50
Mushnikov N.V. 6, 22

Naumov S.P. 6, 20, 22
Nemtsova O.M. 158, 162
Nikolaeva E.D. 108, 110
Nitsenko V.I. 10
Nosov A.P. 64, 116
Novakova A.A. 126
Novikov E.G. 88, 94

Olekhnovich N.M. 92
Oshtrakh M.I. 30, 50, 104, 106, 124, 130, 132, 136, 156
Osinnikov E.V. 52
Ovchinnikov V.V. 74, 84

Panchenko V.L. 80, 90
Panchuk V.V. 150, 168
Panfilov S.I. 126
Pashaev E.M. 64, 116
Pchelina D.I. 28
Pechousek J. 50
Perfiliev Yu.D. 142
Perunov I.V. 58
Petrova E.V. 124, 130
Pokatilov V.S. 24
Ponomarev D.A. 120
Popkov V.I. 78
Popov A.G. 38
Popov V.V. 52
Porsev V.E. 82, 158
Presniakov I.A. 2, 10, 16, 32, 40
Prokopyev D.A. 36
Protasov A.V. 20, 38
Pushkarev A.V. 92
Pyankov V.F. 110

Radyush Yu.V. 92
Raevskii I.P. 92
Romashev L.N. 120
Rusakov V.S. 2, 12, 18, 24, 28, 40, 46, 60, 62, 78, 128, 164
Rybchenko O.G. 12

Sagaradze V.V. 80, 86, 90
Sangaa D. 18, 78, 96
Sarychev D.A. 92, 148, 154
Sedykh V.D. 12, 28, 128
Semenov V.G. 22, 150, 168
Semionkin V.A. 74, 80, 84, 156
Shabashov V.A. 72, 80, 86, 88, 90, 94
Shakhmuratov R.N. 118
Shkolnikov E.N. 48
Silkin I.G. 32
Sipavina L.V. 134
Sivokon D.N. 148, 154
Skuratov V.A. 50
Smirnova E.S. 8
Smrcka D. 50
Snegirev N.I. 14
Sobolev A.V. 2, 10, 16
Sokolov A.Y. 48
Starchikov S.S. 8, 14, 56, 160
Stashkova L.A. 38
Stichleutner S. 50
Stolyar S.V. 108, 110
Strugatsky M.B. 14
Subbotin I.A. 64, 116
Suvorkova E.V. 36

Tagirov L.R. 54
Temerov V.L. 8
Troyan I.A. 68
Tselebrovskiy A.N. 28
Tugarova A.V. 100
Tyapkin P. Yu. 78, 96

Uimin M.A. 36
Ulyanov A.I. 82
Ulyanov A.L. 4, 82, 158
Ushakov M.V. 30
Ustinov V.V. 120
Uyanga E. 96

Vagizov F.G. 112, 118, 152
Valiullin A.A. 54
Varga L.K. 50
Vasiliev A.L. 56
Velikanov D.A. 108, 110
Vondrasek R. 50
Voronin M.V. 134
Voronina E.V. 26, 34, 76

Vorotynov A.M. 108, 110

Yagupov S.V. 14

Zagorskii D.L. 58
Zaitov M.T.R. 166
Zalutskii A.A. 48
Zamatovsky A.E. 80, 86, 88, 90, 94
Zaripova L.D. 54
Zavarzina D.G. 128
Zayakhanov V.A. 8, 56, 160
Zekhtser M.Yu. 148, 154
Zhegallo E.A. 126
Zinnatullin A.L. 112, 118, 152

Авторский индекс

Аббас Р. 79
Абдуллин А.Ф. 27, 35, 77
Авдонин В.В. 127
Агафонов В.Н. 57
Алексеева О.А. 9
Аленькина И.В. 105, 107
Алехина Ю.А. 29
Андреева М.А. 65, 117, 121
Антонова А.В. 129
Аржников А.К. 27, 71, 77
Асландукова А.А. 17

Баулин Р.А. 65, 117, 121
Баюков О.А. 109, 111
Беляев Д.В. 105, 107
Бондаренко И. 161

Вагизов Ф.Г. 113, 119, 153
Валиуллин А.А. 55
Варга Л.К. 51
Васильев А.Л. 57
Великанов Д.А. 109, 111
Вондрасек Р. 51
Воронин М.В. 135
Воронина Е.В. 27, 35, 77
Воротынов А.М. 109, 111

Гавико В.С. 21, 39
Гаврилюк А.Г. 69
Гапочка А.М. 25, 41
Гарбарино Г. 9
Гермов А.Ю. 37
Глазкова Я.С. 11, 17, 41
Голобородский Б.Ю. 37
Головня О.А. 39
Горюнов М.В. 125, 137
Грибов И.В. 65, 117
Григорьева Т.Ф. 97
Губайдулина Т.В. 13, 41
Гудим И.А. 9
Гусейнов М.М. 139
Гущина Н.В. 75

Давыдов В.А. 57
Данилов С.Е. 87
Дебус Б. 169
Дедушенко С.К. 143
Денисов А.Е. 77
Добышева Л.В. 5
Долуденко И.М. 59
Дорофеев Г.А. 159
Дулов Е.Н. 167

Егизбек К. 63

Жаргалан Н. 19
Жегалло Е.А. 127

Заварзина Д.Г. 129
Загорский Д.Л. 59
Заитов М.Т.Р. 167
Залуцкий А.А. 49
Заматовский А.Е. 81, 87, 89, 91, 95
Зарипова Л.Д. 55
Заяханов В.А. 9, 57, 161
Зехцер М.Ю. 149, 155
Зиннатуллин А.Л. 113, 119, 153

Иваненко И.П. 97
Иванова А.Г. 27, 77
Иванцов М.В. 145
Изюров В.В. 65, 117
Исхаков Р.С. 109, 111

Кадыржанов К.К. 61, 63
Казанцева И.С. 5
Калай Сельван Р. 31
Камзин А.С. 55, 103
Камнев А.А. 101
Катаева Н.В. 87, 89, 95
Кирсанов Д.О. 169
Киселева Т.Ю. 19, 79, 97, 129
Китаев В.В. 149
Киш В.К. 105
Кишигдемберел И. 97
Клейнерман Н.М. 7, 21, 23
Клёнов М. 161
Князев Ю.В. 109, 111
Кобаяши С. 19
Ковач К. 101
Козлов А.В. 81, 91
Козлов К.А. 81, 87, 89, 91, 95
Козловский А.Л. 47, 61, 63
Кондратьев О.А. 65, 117
Конев А.С. 37
Коныгин Г.Н. 163
Коурил Л. 51
Кубрин С.П. 93
Кудор М. 51
Кузманн Э. 51, 101, 105, 125, 157
Кулаков В.И. 13
Куликова Л.Ф. 57
Куликова М.В. 145
Курмачёв И.А. 37
Кучешева-Титова В.Р. 9

Лазарева Е.В. 79, 97
Ли О.А. 109, 111
Лукьянова Е.Н. 129
Любутин И.С. 9, 15, 57, 59, 69, 161
Любутина М.В. 57
Ляшков К.А. 89, 95

Макаров Е.В. 75, 85
Макаров Н.А. 151
Макарова А.О. 25
Максимова А.А. 125, 131, 133
Маньяна Д. 19
Мартинсон К.Д. 79
Махала Л. 51
Мацнев М.Е. 41, 165
Миляев М.А. 121
Минин А.С. 37
Могиленец Ю.А. 15
Мозолаи А. 51
Морозов В.В. 49
Морозов И.В. 33
Мушников Н.В. 7, 23

Наумов С.П. 7, 21, 23
Немцова О.М. 159, 163
Николаева Е.Д. 109, 111
Ниценко В.И. 11
Новакова А.А. 127
Новиков Е.Г. 89, 95
Носов А.П. 65, 117

Овчинников В.В. 75, 85
Олехнович Н.М. 93
Осинников Е.В. 53
Оштрах М.И. 31, 51, 105, 107, 125, 131, 133, 137, 157

Панфилов С.И. 127
Панченко В.Л. 81, 91
Панчук В.В. 151, 169
Пашаев Э.М. 65, 117
Перунов И.В. 59
Перфильев Ю.Д. 143
Петрова Е.В. 125, 131
Печусек И. 51
Покатилов В.С. 25
Пономарев Д.А. 121
Попков В.И. 79
Попов А.Г. 39
Попов В.В. 53
Порсев В.Е. 83, 159
Пресняков И.А. 3, 11, 17, 33, 41
Прокопьев Д.А. 37
Протасов А.В. 21, 39
Пушкарев А.В. 93

Пчелина Д.И. 29
Пьянков В.Ф. 111

Раевский И.П. 93
Ромашев Л.Н. 121
Русаков В.С. 3, 13, 19, 25, 29, 41, 47, 61, 63, 79, 129, 165
Рыбченко О.Г. 13
Рядуш Ю.В. 93

Сагарадзе В.В. 81, 87, 91
Сангаа Д. 19, 79, 97
Сарычев Д.А. 93, 149, 155
Седых В.Д. 13, 29, 129
Семенкин В.А. 75, 81, 85, 157
Семенов В.Г. 23, 151, 169
Сивоконь Д.Н. 149, 155
Силкин И.Г. 33
Сипавина Л.В. 135
Скуратов В.А. 51
Смирнова Е.С. 9
Смрчка Д. 51
Снегирёв Н.И. 15
Соболев А.В. 3, 11, 17
Соколов А.Ю. 49
Старчиков С.С. 9, 15, 57, 161
Сташкова Л.А. 39
Столяр С.В. 109, 111
Стругацкий М.Б. 15
Субботин И.А. 65, 117
Суворкова Е.В. 37

Тагиров Л.Р. 55
Темеров В.Л. 9
Троян И.А. 69
Тугарова А.В. 101
Тяпкин П.Ю. 79, 97

Уймин М.А. 37
Ульянов А.И. 83
Ульянов А.Л. 5, 83, 159
Устинов В.В. 121
Ушаков М.В. 31
Уянга Е. 97

Фадеев М.С. 47, 61, 63
Фелнер И. 105, 125, 131
Фролов К.В. 9, 19, 59, 145, 161
Фунтов К.О. 57, 161

Харламова С.А. 9
Херчег Б. 51
Хомоннай З. 51, 125, 157
Христич С.В. 149, 155
Худяков К.Е. 97

Целебровский А.Н. 29

Чаусов Ф.Ф. 5
Чернов М.С. 129
Чистякова Н.И. 29, 129
Чуев М.А. 15, 45, 59
Чукин А.В. 125, 131, 133
Чулкина А.А. 83
Чумаков А. 9
Чумаков Н.К. 57, 59

Шабашов В.А. 73, 81, 87, 89, 91, 95
Шахмуратов Р.Н. 119
Школьников Е.Н. 49
Штихлеутнер Ш. 51

Ягупов С.В. 15

Contents

Section 1 1
«*Hyperfine interactions in solid state physics and magnetism*»

ORBITAL PHYSICS: MÖSSBAUER DIAGNOSTIC 2
I. Presniakov, A. Sobolev, V. Rusakov

THERMAL BEHAVIOR OF TWO MAGNETIC STATES IN SMART ANTI-CORROSION COATINGS 4
F.F. Chausov, A.L. Ulyanov, I.S. Kazantseva, L.V. Dobysheva

MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN 4f-3d INTERMETALLIC COMPOUNDS WITH CUBIC STRUCTURE: MÖSSBAUER STUDY 6
N.V. Mushnikov, N.M. Kleinerman, S.P. Naumov

PHASE TRANSITIONS IN A $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ MULTIFFERROIC AT LOW TEMPERATURES DOWN TO 2.6 K AND HIGH PRESSURES UP TO 72 GPa 8
K.V. Frolov, S.S. Starchikov, E.S. Smirnova, O.A. Alekseeva, I.S. Lyubutin, V.A. Zayakhanov, A. Chumakov, G. Garbarino, S.A. Kharlamova, I.A. Gudim, V.L. Temerov, V.R. Kuchesheva-Titova

PROBE MÖSSBAUER STUDY OF STRUCTURAL AND MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN $BiMn_7O_{12}$ MANGANITE 10
V.I. Nitsenko, A.V. Sobolev, I.S. Glazkova, I.A. Presniakov

CORRELATION BETWEEN Fe ATOM VALENCE AND OXYGEN VACANCIES IN SUBSTITUTED $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ ORTHOFERRITE UNDER HEAT TREATMENT 12
V.D. Sedykh, V.S. Rusakov, T.V. Gubaidulina, O.G. Rybchenko, V.I. Kulakov

HYPERFINE STRUCTURE OF MÖSSBAUER SPECTRA IN SOLID SOLUTIONS $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ 14
N. Snegirev, I. Lyubutin, M. Chuev, S. Starchikov, S. Yagupov, Yu. Mogilenec, M. Strugatsky

MAGNETIC HYPERFINE INTERACTIONS IN THE QUASI-1D ANTIFERROMAGNET $Fe_2O(SeO_3)_2$ 16
A.V. Sobolev, A.A. Aslandukova, I.S. Glazkova, I.A. Presniakov

MAGNETITE CUBES WITH SPIN VORTEX BEHAVIOR INVESTIGATION BY MOSSBAUER SPECTROSCOPY AND FORC 18
T.Yu. Kiseleva, S. Kobayashi, V.S. Rusakov, K.V. Frolov, J. Manjanna, N. Jargalan, D. Sangaa

STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN LOW-NICKEL Fe-Ni ALLOYS PROBED BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 20
N.M. Kleinerman, A.V. Protasov, S.P. Naumov, V.S. Gaviko

HYPERFINE INTERACTIONS IN THE NONSTOICHIOMETRIC $ErFe_2Mn_x$ COMPOUNDS 22
S.P. Naumov, N.V. Mushnikov, N.M. Kleinerman, V.G. Semenov

FEATURES OF SPATIAL SPIN-MODULATED STRUCTURE IN MULTIFERROICS $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-y}$ (x = 0÷0.1) 24
V.S. Pokatilov, V.S. Rusakov, A.M. Gapochka, A.O. Makarova

EFFECT OF HEAT TREATMENT ON THE STRUCTURE AND MAGNETIC STATE OF TERNARY MECHANICALLY SYNTHESIZED $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 at.%) ALLOYS 26
A.G. Ivanova, E.V. Voronina, A.F. Abdullin, A.K. Arzhnikov

RELAXATION PROCESSES OBSERVED IN Ca- AND Sr-DOPED LANTHANUM MANGANITES REVEALED BY ^{57}Fe MÖSSBAUER SPECTROSCOPY AND MAGNETIC MEASUREMENTS 28
D.I. Pchelina, V.D. Sedykh, N.I. Chistyakova, Yu.A. Alekhina, A.N. Tselebrovskiy, V.S. Rusakov

IRON LOCAL MICROENVIRONMENTS IN Ni^{2+}, Cu^{2+} AND Mg^{2+} FERRITES: STUDY USING MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 30
M.V. Ushakov, R. Kalai Selvan, M.I. Oshtrakh

^{57}Fe PROBE MÖSSBAUER STUDY OF MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN BINARY PHOSPHIDES OF TRANSITION METALS 32
I. Silkin, I. Presnyakov, I. Morozov

FIRST PRINCIPLE CALCULATIONS OF THE FORMATION ENERGY AND PARAMETERS OF HYPERFINE INTERACTION OF TERNARY SYSTEMS BASED ON Fe-Al 34
A.F. Abdullin, E.V. Voronina

ANALYSIS OF HYPERFINE FIELDS OF MAGNETIC NANOPARTICLES BASED ON BINARY FeNi ALLOYS 36
A.Yu. Germov, B.Yu. Goloborodskiy, A.S. Konev, D.A. Prokopyev, I.A. Kurmachev, E.V. Suvorkova, A.S. Minin, M.A. Uimin

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ NANOSTRUCTURE RIBBONS IN THE PROCESS OF HEAT TREATMENT 38
A.V. Protasov, O.A. Golovnya, A.G. Popov, L.A. Stashkova, V.S. Gaviko

MAGNETIC STRUCTURE AND HYPERFINE INTERACTIONS IN MULTIFERROICS $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (x = 0.05, 0.10, 0.15) 40
A.M. Gapochka, V.S. Rusakov, I.S. Glazkova, T.V. Gubaidulina, M.E. Matsnev, I.A. Presniakov

Section 2 43
«Surface, thin films and nanostructures»

NON-TRIVIAL SHAPES OF MÖSSBAUER SPECTRA OF MAGNETIC NANOPARTICLES WITH DIFFERENT TYPES OF MAGNETIC ANISOTROPY 44
M.A. Chuev

MÖSSBAUER STUDIES OF Fe_3O_4 AND Fe_3O_4@Au NANOPARTICLES SUBJECTED TO THERMAL ANNEALING 46
V.S. Rusakov, M.S. Fadeev, A.L. Kozlovskiy

PROBE MESSBAUER DIAGNOSTICS DYNAMIC PROPERTIES OF 2D-DIMENSIONAL WATER LAYERS ON THE MONTMORILLONITE SUBSTRATE 48
A.A. Zalutskii, V.V. Morozov, A.Y. Sokolov, E.N. Shkolnikov

ANALYSIS OF MAGNETIC ANISOTROPY IN FINEMET ALLOY BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 50
E. Kuzmann, S. Stichleutner, L. Machala, J. Pechousek, R. Vondrasek, D. Smrcka, L. Kouril, Z. Homonnay, M.I. Oshtrakh, A. Mozzolai, V.A. Skuratov, M. Kudor, B. Herczeg, L.K. Varga

EMISSION NGR SPECTROSCOPY OF GRAIN BOUNDARIES IN COARSE-GRAINED AND ULTRAFINE-GRAINED NIOBIUM 52
V.V. Popov, E.V. Osinnikov

RESEARCHING OF PROPERTIES OF MAGNETIC THIN FILMS FOR HEAT-ASSISTED MAGNETIC RECORDING 54
A.A. Valiullin, A.S. Kamzin, L.R. Tagirov, L.D. Zaripova

SYNTHESIS, STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF CORE@SHELL NANOCOMPOSITES BASED ON IRON CARBIDES AND OXIDES 56
S.S. Starchikov, V.A. Zayakhanov, A.L. Vasiliev, I.S. Lyubutin, K.O. Funtov, M.V. Lyubutina, N.K. Chumakov, L.F. Kulikova, V.N. Agafonov, V.A. Davydov

MAGNETIC AND MOSSBAUER STUDIES OF Fe, Fe_XCo_{1-X} AND Fe_XNi_{1-X} NANOWIRES 58
I.V. Perunov, K.V. Frolov, M.A. Chuev, I.M. Doludenko, D.L. Zagorskii, N.K. Chumakov, I.S. Lyubutin

STUDY OF THE ELECTRON IRRADIATION EFFECT ON α-Fe_2O_3 NANOPARTICLES 60
M.S. Fadeev, A.L. Kozlovskiy, V.S. Rusakov, K.K. Kadyrzhanov

STUDY OF THE EFFECT OF DOPING Au, Gd, Nd ON THE MAGNETIC AND HYPERTHERMAL PROPERTIES OF Fe_3O_4 NANOCOMPOSITES 62
A.L. Kozlovskiy, K. Egizbek, M.S. Fadeev, V.S. Rusakov, K.K. Kadyrzhanov

THICKNESS DEPENDENCE OF NEEL TEMPERATURE FOR ULTRATHIN $YFeO_3$ FILMS 64
V.V. Izyurov, M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.P. Nosov, I.V. Gribov, O.A. Kondratev, I.A. Subbotin, E.M. Pashaev

Section 3
«Promising materials and modern technologies for their production» 67

ACTUAL PROBLEMS OF HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTIVITY AND THE ROLE OF MÖSSBAUER SPECTROSCOPY IN ITS STUDY 68
I.S. Lyubutin, I.A. Troyan, A.G. Gavrilyuk

THE NEURAL NETWORK IN SOLVING PROBLEMS OF CONDENSED MATTER PHYSICS 70
A.K. Arzhnikov

CRITICAL REDISTRIBUTION OF ATOMS IN THE IRON ALLOYS UNDER SEVERE PLASTIC DEFORMATION 72
V.A. Shabashov

MÖSSBAUER STUDY OF PHASE TRANSFORMATIONS IN THE IRON-BASED Fe–Mn ALLOYS UNDER SIMILAR CONDITIONS OF HEATING WITH A 15-keV ACCELERATED Ar^+ ION BEAM AND AN IR HEATER 74
V.V. Ovchinnikov, E.V. Makarov, V.A. Semionkin, N.V. Gushchina

SOME ASPECTS OF THE SYNTHESIS OF THE Fe-Al-Sn INTERMETALLIC COMPOUND FROM MATERIALS PRODUCED BY MECHANICAL ALLOYING 76
E.V. Voronina, A.G. Ivanova, A.F. Abdullin, A.E. Denisov, A.K. Arzhnikov

MOSSBAUER STUDY OF MAGNETIC STRUCTURE FORMATION IN YTTRIUM FERRITE GARNET PARTICLES IN DIFFERENT REGIMES OF COMBUSTION SYNTHESIS 78
T.Yu. Kiseleva, V.S. Rusakov, R. Abbas, E.V. Lazareva, P.Yu. Tyapkin, K. Martinson, D. Sangaa, V.I. Popkov

THE EFFECT OF A HIGH-DOSE NEUTRON IRRADIATION ON THE STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN THE INDUSTRIAL STEEL EP823 80
K.A. Kozlov, V.A. Shabashov, V.V. Sagaradze, A.E. Zamatovsky, V.A. Semionkin, A.V. Kozlov, V.L. Panchenko

MÖSSBAUER STUDIES OF PHASE AND MAGNETIC STATE OF $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ NANOCOMPOSITE AFTER MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS AND SUBSEQUENT ANNEALING 82
A.A. Chulkina, A.I. Ulyanov, A.L. Ulyanov, V.E. Porsev

MÖSSBAUER STUDY OF LONG-RANGE ATOMIC ORDER IN Fe–6.25 AT. % Si ALLOY 84
E.V. Makarov, V.V. Ovchinnikov, V.A. Semionkin

CONCENTRATION HETEROGENEITY AND THERMAL EXPANSION COEFFICIENT IN THE METASTABLE Fe–Ni INVARS 86
V.A. Shabashov, V.V. Sagaradze, A.E. Zamatovsky, K.A. Kozlov, N.V. Kataeva, S.E. Danilov

HEAT OF NITRIDE FORMATION AND MECHANICAL SYNTHESIS OF STEELS STRENGTHENED BY DISPERSED TITANIUM NITRIDES 88
V.A. Shabashov, K.A. Lyashkov, A.E. Zamatovsky, K.A. Kozlov, N.V. Kataeva, E.G. Novikov

THE EFFECT OF MECHANICAL STRESSES ON THE STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN THE INDUSTRIAL EP823 AND EP823-ODS STEELS UNDER HIGH-DOSE NEUTRON IRRADIATION 90
K.A. Kozlov, V.A. Shabashov, V.V. Sagaradze, A.E. Zamatovsky, A.V. Kozlov, V.L. Panchenko

MÖSSBAUER STUDY OF $PbSnO_3$ 92
S.P. Kubrin, I.P. Raevskii, D.A. Sarychev, N.M. Olekhnovich, A.V. Pushkarev, Yu.V. Radyush

SOLID-PHASE MECHANICAL SYNTHESIS OF HIGH-NITROGEN CHROMIUM-MANGANESE AUSTENITE 94
K.A. Lyashkov, V.A. Shabashov, A.E. Zamatovsky, K.A. Kozlov, N.V. Kataeva, E.G. Novikov

MOSSBAUER AND RAMAN SPECTROSCOPY STUDY OF ALUMINIUM INFLUENCE ON THE MAGNETOCALORICS OF SUBMICRON $MgFe_{2-X}Al_XO_4$ PARTICLES 96
K.E. Khudyakov, E.V. Lazareva, I. Khishigdemberel, P.Yu. Tyapkin, T.F. Grigoreva, I.P.Ivanenko, T.Yu. Kiseleva, E. Uyanga, D. Sangaa

Section 4 99
«Biological and medical applications»

MOLECULAR SPECTROSCOPIC MONITORING OF STRUCTURAL AND REDOX TRANSFORMATIONS IN BACTERIAL CELLS UPON DRYING 100
A.A. Kamnev, A.V. Tugarova, K. Kovács, E. Kuzmann

BIOMEDICAL APPLICATIONS OF GrO-FERRITE NANOCOMPOSITES AND CORE/SHELL NANOSTRUCTURES: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATIONS 102
A.S. Kamzin

NANOSIZED IRON CORES IN FERRITIN AND ITS PHARMACEUTICAL ANALOGUES: OBSERVATION OF THE UNUSUAL TEMPERATURE DEPENDENCIES OF MÖSSBAUER PARAMETERS 104
I.V. Alenkina, E. Kuzmann, I. Felner, V.K. Kis, D.V. Belyaev, M.I. Oshtrakh

TESTING OF THE IRON STATE IN OUTDATED PHARMACEUTICALS USING MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 106
D.V. Belyaev, I.V. Alenkina, M.I. Oshtrakh

A NEW METHOD OF MAGNETIC HYPERTHERMIA BASED ON FERROMAGNETIC RESONANCE 108
S.V. Stolyar, O.A. Li, E.D. Nikolaeva, A.M. Vorotynov, D.A. Velikanov, Yu.V. Knyazev, O.A. Bayukov, R.S. Iskhakov

STATIC AND DYNAMIC MAGNETIC PROPERTIES OF $CoFe_2O_4$ NANOPARTICLES 110
S.V. Stolyar, O.A. Li, E.D. Nikolaeva, A.M. Vorotynov, D.A. Velikanov, Yu.V. Knyazev, O.A. Bayukov, R.S. Iskhakov, V.F. Pyankov

MÖSSBAUER SPECTROSCOPY STUDIES OF SOME DIETARY SUPPLEMENTS CONTAINING FERROUS BIS-GLYCINATE 112
A.L. Zinnatullin, F.G. Vagizov

Section 5 115
«Synchrotron radiation and gamma optics»

MÖSSBAUER REFLECTIVITY SPECTRA IN INVESTIGATION OF ULTRATHIN $YFeO_3$ FILMS AT ESRF 116
M.A. Andreeva, R.A. Baulin, A.P. Nosov, I.V. Gribov, V.V. Izyurov, O.A. Kondratev, I.A. Subbotin, E.M. Pashaev

APPLICATION OF MÖSSBAUER SPECTROSCOPY TO STUDY ULTRASOUND VIBRATION OF WET GRANULAR MATERIALS 118
R.N. Shakhmuratov, A.L. Zinnatullin, F.G. Vagizov

MÖSSBAUER REFLECTIVITY WITH POLARIZATION ANALYSIS FOR INTERPRETATION OF POORLY RESOLVED SPECTRA 120
R.A. Baulin, M.A. Andreeva, M.A. Milyaev, D.A. Ponomarev, L.N. Romashev, V.V. Ustinov

Section 6 123
«Mineralogy, Earth sciences, ecology and cultural heritage»

X-RAY DIFFRACTION, MAGNETIZATION MEASUREMENTS AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF IRON-BEARING PHASES IN SOME UNDIFFERENTIATED AND DIFFERENTIATED METEORITES 124
A.A. Maksimova, E.V. Petrova, M.V. Goryunov, I. Felner, A.V. Chukin, E. Kuzmann, Z. Homonnay, M.I. Oshtrakh

STUDY OF FERROMANGANESE CRUSTS MORPHOLOGY AND PHASE COMPOSITION 126
A.A. Novakova, S.I. Panfilov, V.V. Avdonin, E.A. Zhegallo

COMPARATIVE INVESTIGATIONS OF SIDERITES ASSOCIATED WITH HYDROTHERMAL, SEDIMENTARY AND MICROBIOLOGICAL PROCESSES 128
N.I. Chistyakova, A.V. Antonova, D.G. Zavarzina, T.Yu. Kiseleva, M.S. Chernov, E.N. Lukyanova, V.D. Sedykh, V.S. Rusakov

X-RAY DIFFRACTION, MAGNETIZATION MEASUREMENTS AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF BULK INTERIOR AND FUSION CRUST IN KEMER L4 ORDINARY CHONDRITE 130
E.V. Petrova, A.A. Maksimova, I. Felner, A.V. Chukin, M.I. Oshtrakh

X-RAY DIFFRACTION AND MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF IRON-BEARING MINERALS IN JÄNISJÄRVI IMPACTITE 132
A.A. Maksimova, A.V. Chukin, M.I. Oshtrakh

MÖSSBAUER SPECTROSCOPY OF HEAT-TREATED TOURMALINE FROM MINISTERSKAYA PIT (MIDDLE URAL) 134
M.V. Voronin, L.V. Sipavina

^{57}Fe HYPERFINE PARAMETERS IN Fe-Ni ALLOY FROM VARIOUS METEORITES 136
M.V. Goryunov, M.I. Oshtrakh

GAMMA-RESONANCE STUDIES OF ROCKS OF THE MIDDLE EAST (Kingdom of Saudi Arabia, Turkey) 138
M.M. Huseynov

Section 7 141
«Chemistry, petrochemistry, catalysis, structure and communication »

A NEW APPROACH TO THE INTERPRETATION OF THE ^{57}Fe MÖSSBAUER ISOMER SHIFTS 142
S.K. Dedushenko, Yu.D. Perfiliev

MÖSSBAUER STUDY OF THE IRON-BASED NANOCATALYSTS FOR THE FISCHER-TROPSCH SYNTHESIS 144
K.V. Frolov, M.I. Ivantsov, M.V. Kulikova

Section 8 147
«Experimental technique and methodology»

NEW MODEL OF MOSSBAUER SPECTROMETER MS-2020 148
D.A. Sarychev, D.N. Sivokon, M.Yu. Zekhtser, S.V. Khristich, V.V. Kitaev

DOPPLER MODULATOR: PRINCIPLES OF CONSTRUCTION AND PROSPECTS OF DEVELOPMENT 150
V.G. Semenov, V.V. Panchuk, N.A. Makarov

GAMMA RESONANCE METHOD FOR SIMULTANEOUS MEASUREMENT OF THE AMPLITUDE OF NUCLEI OSCILLATIONS ON THE SURFACE AND IN THE VOLUME OF A SAMPLE UNDER ACOUSTIC EXCITATION 152
A.L. Zinnatullin, F.G. Vagizov

MÖSSBAUER SPECTROMETER WITH A MOVABLE RESONANCE DETECTOR AND SYNCHRONOUS DOPPLER MODULATION SYSTEM 154
D.A. Sarychev, D.N. Sivokon, M.Yu. Zekhtser, S.V. Khristich

THE DIFFERENTIAL NONLINEARITY TESTING FOR THE VELOCITY DRIVING SYSTEMS IN MÖSSBAUER SPECTROMETERS USING REFERENCE ABSORBER α-Fe FOIL 156
V.A. Semionkin, E. Kuzmann, Z. Homonnay, M.I. Oshtrakh

ON GRAIN BOUNDARY SEGREGATIONS AND RELATED PHENOMENA IN NANOCRYSTALLINE ALLOYS BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 158
G.A. Dorofeev, V.E. Porsev, A.L. Ulyanov, O.M. Nemtsova

UPGRADE OF THE CLOSED-CYCLE CRYOSTAT FOR MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 160
V.A. Zayakhanov, S.S. Starchikov, K.O. Funtov, M. Klenov, I. Bondarenko, K.V. Frolov, I.S. Lyubutin

EXCLUSIVE CAPABILITIES OF THE REGULARIZATION METHOD IN APPLICATION TO MÖSSBAUER SPECTROSCOPY 162
O.M. Nemtsova, G.N. Konygin

CREATING COMPLEX MODELS OF MOSSBAUER SPECTRA WITH MULTIPLE COMPONENTS IN SpectrRelax 164
M.E. Matsnev, V.S. Rusakov

TRANSFORMING THE LORENTZ LINESHAPE INTO ANOTHER ONE 166
E.N. Dulov, M.T.R. Zaitov

MULTIVARIATE CURVE RESOLUTION FOR MOSSBAUER SPECTRA PROCESSING 168
V.V. Panchuk, B. Debus, D.O. Kirsanov, V.G. Semenov

Authors 170

Оглавление

Секция 1 1
«*Сверхтонкие взаимодействия в физике твердого тела и магнетизме*»

ОРБИТАЛЬНАЯ ФИЗИКА: МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА 3
И.А. Пресняков, А.В. Соболев, В.С. Русаков

ПОВЕДЕНИЕ ДВУХ МАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ С ТЕМПЕРАТУРОЙ В “УМНЫХ” АНТИКОРРОЗИОННЫХ ПОКРЫТИЯХ 5
Ф.Ф. Чаусов, А.Л. Ульянов, И.С. Казанцева, Л.В. Добышева

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В 4f-3d ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ С КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ: МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ 7
Н.В. Мушников, Н.М. Клейнерман, С.П. Наумов

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКЕ $Gd^{57}Fe_3(BO_3)_4$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ДО 2.6 К И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 72 ГПа 9
К.В. Фролов, С.С. Старчиков, Е.С. Смирнова, О.А. Алексеева, И.С. Любутин, В.А. Заяханов, А. Чумаков, Г. Гарбарино, С.А. Харламова, И.А. Гудим, В.Л. Темеров, В.Р. Кучешева-Титова

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МАНГАНИТЕ $BiMn_7O_{12}$ 11
В.И. Ниценко, А.В. Соболев, Я.С. Глазкова, И.А. Пресняков

ВЗАИМОСВЯЗЬ ВАЛЕНТНОСТИ АТОМОВ Fe И КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В ЗАМЕЩЕННОМ ОРТОФЕРРИТЕ $La_{0.67}Sr_{0.33}FeO_{3-\gamma}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМООБРАБОТКИ 13
В.Д. Седых, В.С. Русаков, Т.В. Губайдулина, О.Г. Рыбченко, В.И. Кулаков

СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА В МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Fe_{1-x}Ga_xBO_3$ 15
Н.И. Снегирёв, И.С. Любутин, М.А. Чуев, С.С. Старчиков, С.В. Ягупов, Ю.А. Могиленец, М.Б. Стругацкий

СВЕРХТОНКИЕ МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $Fe_2O(SeO_3)_2$ 17
А.В. Соболев, А.А. Асландукова, Я.С. Глазкова, И.А. Пресняков

ИССЛЕДОВАНИЕ КУБИКОВ МАГНЕТИТА СО СПИН-ВОРТЕКСНЫМ ПОВЕДЕНИЕМ МЕТОДАМИ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И FORC 19
Т.Ю. Киселева, С. Кобаяши, В.С. Русаков, К.В. Фролов, Д. Маньяна, Н. Жаргалан, Д.Сангаа

МЁССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВАХ Fe-Ni С НИЗКИМ СОДЕРЖАНИЕМ НИКЕЛЯ 21
Н.М. Клейнерман, А.В. Протасов, С.П. Наумов, В.С. Гавико

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ $ErFe_2Mn_x$ 23
С.П. Наумов, Н.В. Мушников, Н.М. Клейнерман, В.Г. Семёнов

ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СПИН-МОДУЛИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $Bi_{1-x}Sr_xFeO_{3-y}$ (x = 0÷0.1) 25
В.С. Покатилов, В.С. Русаков, А.М. Гапочка, А.О. Макарова

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МАГНИТНОЕ СОСТОЯНИЕ ТРОЙНЫХ МЕХАНОСИНТЕЗИРОВАННЫХ СПЛАВОВ $Fe_{65}Al_{35-x}B_x$ (x = 5, 10 ат. %) 27
А.Г. Иванова, Е.В. Воронина, А.Ф. Абдуллин, А.К. Аржников

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ, ВЫЯВЛЕННЫЕ В Ca- И Sr-ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТАХ ЛАНТАНА МЕТОДАМИ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И МАГНИТНЫМИ ИЗМЕРЕНИЯМИ 29
Д.И. Пчелина, В.Д. Седых, Н.И. Чистякова, Ю.А. Алехина, А.Н. Целебровский, В.С. Русаков

ЛОКАЛЬНОЕ ОКРУЖЕНИЕ КАТИОНОВ ЖЕЛЕЗА В Ni^{2+}, Cu^{2+} И Mg^{2+} ФЕРРИТАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 31
М.В. Ушаков, Р. Калай Сельван, М.И. Оштрах

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА НА ЯДРАХ ^{57}Fe МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БИНАРНЫХ ФОСФИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ 33
И.Г. Силкин, И.А. Пресняков, И.В. Морозов

ЭНЕРГИЯ ОБРАЗОВАНИЯ И ПАРАМЕТРЫ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРОЙНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ Fe-Al. РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ 35
А.Ф. Абдуллин, Е.В. Воронина

АНАЛИЗ СВЕРХТОНКИХ ПОЛЕЙ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ FeNi 37
А.Ю. Гермов, Б.Ю. Голобородский, А.С. Конев, Д.А. Прокопьев, И.А. Курмачёв, Е.В. Суворкова, А.С. Минин, М.А. Уймин

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ЛЕНТ СПЛАВА $Sm_{0.8}Zr_{0.2}(Fe_{0.92}Ti_{0.08})_{10}$ В ПРОЦЕССЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКИ 39
А.В. Протасов, О.А. Головня, А.Г. Попов, Л.А. Сташкова, В.С. Гавико

МАГНИТНАЯ СТУРКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ $BiFe_{1-x}Co_xO_3$ (x = 0.05, 0.10, 0.15) 41
А.М. Гапочка, В.С. Русаков, Я.С. Глазкова, Т.В. Губайдулина, М.Е. Мацнев, И.А. Пресняков

Секция 2 43
«Поверхность, тонкие пленки и наноструктуры»

НЕТРИВИАЛЬНЫЕ ФОРМЫ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ С РАЗНЫМИ ФОРМАМИ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ 45
М.А. Чуев

МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ Fe_3O_4 И Fe_3O_4@Au НАНОЧАСТИЦ, ПОДВЕРГНУТЫХ ТЕРМИЧЕСКОМУ ОТЖИГУ 47
В.С. Русаков, М.С. Фадеев, А.Л. Козловский

ЗОНДОВАЯ МЕССБАУЭРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 2D-РАЗМЕРНЫХ СЛОЕВ ВОДЫ НА ПОДЛОЖКЕ МОНТМОРИЛЛОНИТА 49
А.А. Залуцкий, В.В. Морозов, А.Ю. Соколов, Е.Н. Школьников

АНАЛИЗ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ В СПЛАВАХ FINEMET МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 51
Э. Кузманн, Ш. Штихлеутнер, Л. Махала, И. Печусек, Р. Вондрасек, Д. Смрчка, Л. Коурил, З. Хомоннай, М.И. Оштрах, А. Мозолаи, В.А. Скуратов, М. Кудор, Б. Херчег, Л.К. Варга

ЭМИССИОННАЯ ЯГР СПЕКТРОСКОПИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО НИОБИЯ 53
В.В. Попов, Е.В. Осинников

ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДЛЯ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ЗАПИСИ ИНФОРМАЦИИ 55
А.А. Валиуллин, А.С. Камзин, Л.Р. Тагиров, Л.Д. Зарипова

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТОВ ТИПА ЯДРО@ОБОЛОЧКА НА ОСНОВЕ КАРБИДОВ И ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА 57
С.С. Старчиков, В.А. Заяханов, А.Л. Васильев, И.С. Любутин, К.О. Фунтов, М.В. Любутина, Н.К. Чумаков, Л.Ф. Куликова, В.Н. Агафонов, В.А. Давыдов

МАГНИТНЫЕ И МЕССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОПРОВОЛОК ИЗ Fe, Fe_XCo_{1-X} И Fe_XNi_{1-X} 59
И.В. Перунов, К.В. Фролов, М.А. Чуев, И.М. Долуденко, Д.Л. Загорский, Н.К. Чумаков, И.С. Любутин

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА НАНОЧАСТИЦЫ α-Fe_2O_3 61
М.С. Фадеев, А.Л. Козловский, В.С. Русаков, К.К. Кадыржанов

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОПИРОВАНИЯ Au, Gd, Nd НА МАГНИТНЫЕ И ГИПЕРТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Fe_3O_4 НАНОКОМПОЗИТОВ 63
А.Л. Козловский, К. Егизбек, М.С. Фадеев, В.С. Русаков, К.К. Кадыржанов

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЕЛЯ ОТ ТОЛЩИНЫ ДЛЯ СВЕРХТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$ 65
В.В. Изюров, М.А. Андреева, Р.А. Баулин, А.П. Носов, И.В. Грибов, О.А. Кондратьев, И.А. Субботин, Э.М. Пашаев

Секция 3 67
«Перспективные материалы и современные технологии их получения»

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И РОЛЬ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ЕЁ ИССЛЕДОВАНИИ 69
И.С. Любутин, И.А. Троян, А.Г. Гаврилюк

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ 71
А.К. Аржников

КРИТИЧЕСКОЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ СВЕРХВЫСОКОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ 73
В.А. Шабашов

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В БОГАТЫХ ЖЕЛЕЗОМ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Fe-Mn В АНАЛОГИЧНЫХ УСЛОВИЯХ НАГРЕВА ПУЧКОМ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ Ar^+ ЭНЕРГИЕЙ 15 кэВ И БЕСКОНТАКТНЫМНАГРЕВАТЕЛЕМ 75
В.В. Овчинников, Е.В. Макаров, В.А. Семенкин, Н.В. Гущина

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ Fe-Al-Sn ИЗ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МЕХАНИЧЕСКОГО СПЛАВЛЕНИЯ 77
Е.В. Воронина, А.Г. Иванова, А.Ф. Абдуллин, А.Е. Денисов, А.К. Аржников

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЧАСТИЦ ИТТРИЕВОГО ФЕРРИТА ГРАНАТА В РЕЖИМАХ ГОРЕНИЯ 79
Т.Ю. Киселева, В.С. Русаков, Р. Аббас, Е.В. Лазарева, П.Ю. Тяпкин, К.Д. Мартинсон, Д. Сангаа, В.И. Попков

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОДОЗНОГО НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ИНДУСТРИАЛЬНОЙ СТАЛИ ЭП823 81
К.А. Козлов, В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, В.А. Семенкин, А.В. Козлов, В.Л. Панченко

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО И МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ НАНОКОМПОЗИТА СОСТАВА $(Fe_{0.85}Mn_{0.10}Ni_{0.05})_{83}C_{17}$ ПОСЛЕ МЕХАНОХИМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА И ПОСЛЕДУЮЩИХ ОТЖИГОВ 83
А.А. Чулкина, А.И. Ульянов, А.Л. Ульянов, В.Е. Порсев

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДАЛЬНЕГО АТОМНОГО ПОРЯДКА В СПЛАВЕ Fe-6,25 AT.% Si 85
Е.В. Макаров, В.В. Овчинников, В.А. Семенкин

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ В МЕТАСТАБИЛЬНЫХ Fe–Ni ИНВАРАХ 87
В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, С.Е. Данилов

ТЕПЛОТА ОБРАЗОВАНИЯ НИТРИДОВ И МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ СТАЛЕЙ, УПРОЧНЯЕМЫХ ДИСПЕРСНЫМИ НИТРИДАМИ ТИТАНА 89
В.А. Шабашов, К.А. Ляшков, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, Е.Г. Новиков

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ИНДУСТРИАЛЬНЫХ СТАЛЯХ ЭП823 И ЭП823-ДУО ПРИ ВЫСОКОДОЗНОМ НЕЙТРОННОМ ОБЛУЧЕНИИ 91
К.А. Козлов, В.А. Шабашов, В.В. Сагарадзе, А.Е. Заматовский, А.В. Козлов, В.Л. Панченко

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ $PbSnO_3$ 93
С.П. Кубрин, И.П. Раевский, Д.А. Сарычев, Н.М. Олехнович, А.В. Пушкарев, Ю.В. Рядуш

ТВЕРДОФАЗНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ВЫСОКОАЗОТИСТОГО ХРОМОМАРГАНЦЕВОГО АУСТЕНИТА 95
К.А. Ляшков, В.А. Шабашов, А.Е. Заматовский, К.А. Козлов, Н.В. Катаева, Е.Г. Новиков

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ВЛИЯНИЯ АЛЮМИНИЯ НА МАГНИТНЫЕ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СУБМИКРОННЫХ ЧАСТИЦ $MgFe_{2-X}Al_XO_4$ 97
К.Е. Худяков, Е.В. Лазарева, И. Кишигдемберел, П.Ю. Тяпкин, Т.Ф. Григорьева, И.П. Иваненко, Т.Ю. Киселева, Е. Уянга, Д. Сангаа

Секция 4 99
«Биологические и медицинские применения»

МОЛЕКУЛЯРНО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ И ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КЛЕТКАХ БАКТЕРИЙ ПРИ ВЫСУШИВАНИИ 101
А.А. Камнев, А.В. Тугарова, К. Ковач, Э. Кузманн

БИОМЕДИЦИНСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ GrO-ФЕРРИТ И НАНОСТРУКТУР ТИПА ЯДРО/ОБОЛОЧКА: СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКИ 103
А.С. Камзин

НАНОРАЗМЕРНЫЕ «ЖЕЛЕЗНЫЕ ЯДРА» ФЕРРИТИНА И ЕГО ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ: ВЫЯВЛЕНИЕ АНОМАЛЬНЫХ ТЕМПЕАРТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ ПАРАМЕТРОВ 105
И.В. Аленькина, Э. Кузманн, И. Фелнер, В.К. Киш, Д.В. Беляев, М.И. Оштрах

ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ С ИСТЕКШИМ СРОКОМ ГОДНОСТИ ПО ДАННЫМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 107
Д.В. Беляев, И.В. Аленькина, М.И. Оштрах

НОВЫЙ МЕТОД МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ НА ОСНОВЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА 109
С.В. Столяр, О.А. Ли, Е.Д. Николаева, А.М. Воротынов, Д.А. Великанов, Ю.В. Князев, О.А. Баюков, Р.С. Исхаков

СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ $CoFe_2O_4$ 111
С.В. Столяр, О.А. Ли, Е.Д. Николаева, А.М. Воротынов, Д.А. Великанов, Ю.В. Князев, О.А. Баюков, Р.С. Исхаков, В.Ф. Пьянков

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК НА ОСНОВЕ БИСГЛИЦИНАТА ЖЕЛЕЗА 113
А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов

Секция 5 115
«Синхротронное излучение и гамма-оптика»

МЁССБАУЭРОВСКИЕ СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК $YFeO_3$ НА ESRF 117
М.А. Андреева, Р.А. Баулин, А.П. Носов, В.В. Изюров, И.В. Грибов, О.А. Кондратьев, И.А. Субботин, Э.М. Пашаев

ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТА МЁССБАУЭРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ ВЛАЖНЫХ ГРАНУЛЯРНЫХ СРЕД 119
Р.Н. Шахмуратов, А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов

МЁССБАУЭРОВСКАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО АНАЛИЗА ДЛЯ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ПЛОХОРАЗРЕШЕННЫХ СПЕКТРОВ 121
Р.А. Баулин, М.А. Андреева, М.А. Миляев, Д.А. Пономарев, Л.Н. Ромашев, В.В. Устинов

Секция 6 123
«*Минералогия, науки о Земле, экология и культурное наследие»*

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ФАЗ НЕКОТОРЫХ ДИФФЕРЕНЦИИРОВАННЫХ И НЕДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫХ МЕТЕОРИТОВ 125
А.А. Максимова, Е.В. Петрова, М.В. Горюнов, И. Фелнер, А.В. Чукин, Э. Кузманн, З. Хомоннай, М.И. Оштрах

ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ЖЕЛЕЗОМАРГАНЦЕВЫХ КОРОК 127
А.А. Новакова, С.И. Панфилов, В.В. Авдонин, Е.А. Жегалло

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СИДЕРИТОВ ГИДРОТЕРМАЛЬНОГО, ОСАДОЧНОГО И МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ 129
Н.И. Чистякова, А.В. Антонова, Д.Г. Заварзина, Т.Ю. Киселева, М.С. Чернов, Е.Н. Лукьянова, В.Д. Седых, В.С. Русаков

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, МАГНИТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДЛЯ ВЕЩЕСТВА ОБЫКНОВЕННОГО ХОНДРИТА KEMER L4 И КОРЫ ПЛАВЛЕНИЯ 131
Е.В. Петрова, А.А. Максимова, И. Фелнер, А.В. Чукин, М.И. Оштрах

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ И МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ МИНЕРАЛОВ В ИМПАКТИТЕ ЯНИСЪЯРВИ 133
А.А. Максимова, А.В. Чукин, М.И. Оштрах

МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТЕРМООБРАБОТАННОГО ТУРМАЛИНА ИЗ КОПИ МИНИСТЕРСКАЯ (СРЕДНИЙ УРАЛ) 135
М.В. Воронин, Л.В. Сипавина

СВЕРХТОНКИЕ ПАРАМЕТРЫ ^{57}Fe В СПЛАВЕ Fe-Ni РАЗЛИЧНЫХ МЕТЕОРИТОВ 137
М.В. Горюнов, М.И. Оштрах

ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГОРНЫХ ПОРОД БЛИЖНЕГО ВОСТОКА (Королевство Саудовская Аравия, Турция) 139
М.М. Гусейнов

Секция 7 141
«Химия, нефтехимия, катализ, структура и связь»

НОВЫЙ ПОДХОД К ИНТЕРПРЕТАЦИИ МЕССБАУЭРОВСКИХ ИЗОМЕРНЫХ СДВИГОВ ЖЕЛЕЗА 143
С.К. Дедушенко, Ю.Д. Перфильев

МЕССБАУЭРОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА ДЛЯ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША 145
К.В. Фролов, М.В. Иванцов, М.В. Куликова

Секция 8 147
«*Техника эксперимента и методология»*

НОВАЯ МОДЕЛЬ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРОМЕТРА MS-2020 149
Д.А. Сарычев, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич, В.В. Китаев

ДОПЛЕРОВСКИЙ МОДУЛЯТОР: ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ 151
В.Г. Семенов, В.В. Панчук, Н.А. Макаров

ГАММА-РЕЗОНАНСНЫЙ МЕТОД ОДНОВРЕМЕННОГО ИЗМЕРЕНИЯ АМПЛИТУДЫ КОЛЕБАНИЙ ЯДЕР НА ПОВЕРХНОСТИ И В ОБЪЕМЕ ОБРАЗЦА ПРИ АКУСТИЧЕСКОМ ВОЗБУЖДЕНИИ 153
А.Л. Зиннатуллин, Ф.Г. Вагизов

МЁССБАУЭРОВСКИЙ СПЕКТРОМЕТР С ПОДВИЖНЫМ РЕЗОНАНСНЫМ ДЕТЕКТОРОМ И СИНХРОННОЙ СИСТЕМОЙ ДОПЛЕРОВСКОЙ МОДУЛЯЦИИ 155
Д.А. Сарычев, Д.Н. Сивоконь, М.Ю. Зехцер, С.В. Христич

ОЦЕНКА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ СИСТЕМЫ ДВИЖЕНИЯ В МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОМЕТРАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭТАЛОННОГО ПОГЛОТИТЕЛЯ ФОЛЬГИ α-Fe 157
В.А. Семенкин, Э. Кузманн, З. Хомоннай, М.И. Оштрах

О ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ СЕГРЕГАЦИЯХ И СОПУТСТВУЮЩИХ ЯВЛЕНИЯХ В МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ 159
Г.А. Дорофеев, В.Е. Порсев, А.Л. Ульянов, О.М. Немцова

МОДЕРНИЗАЦИЯ КРИОСТАТА ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА ДЛЯ МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 161
В.А. Заяханов, С.С. Старчиков, К.О. Фунтов, М. Клёнов, И. Бондаренко, К.В. Фролов, И.С. Любутин

УНИКАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ В ПРИЛОЖЕНИИ К МЁССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ 163
О.М. Немцова, Г.Н. Коныгин

СОЗДАНИЕ СЛОЖНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ В ПРОГРАММЕ SpectrRelax 165
М.Е. Мацнев, В.С. Русаков

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФОРМЫ ЛИНИИ МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА 167
Е.Н. Дулов, М.Т.Р. Заитов

МНОГОМЕРНОЕ РАЗРЕШЕНИЕ КРИВЫХ ДЛЯ ОБРАБОТКИ МЕССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ 169
В.В. Панчук, Б. Дебус, Д.О. Кирсанов, В.Г. Семенов

Авторский индекс 173

Сборник материалов

XVI Международной конференции

МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЯ XVI ICMSA

Екатеринбург, 4 – 9 сентября 2022 г.

Тексты тезисов приведены в авторской редакции

Иллюстрация на обложке: А.Ф. Агзамов

Оформление: А.Е. Заматовский, К.А. Козлов

Верстка: А.Е. Заматовский

Ответственный за выпуск: В.А. Шабашов

ISBN 978-5-6045774-5-5

9 785604 577455

Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН, тираж 80 экз.

620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

XVI ICMSA

2022

September, 4–9, Ekaterinburg, Russia