

Программа (план) научных исследований «Физико-технологического инфраструктурного комплекса» (ФТИК ИФМ УрО РАН)

С целью реализации новых приоритетов научно-технологического развития России в направлениях, определенных Стратегией научно-технологического развития Российской Федерации (утверждена Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации») возникла необходимость создания инфраструктурного комплекса «Физико-технологический инфраструктурный комплекс» (ФТИК ИФМ УрО РАН), в который вошли ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» (ИЦ НПМ), Уникальная научная установка «Нейтронный материаловедческий комплекс ИФМ УрО РАН на реакторе ИВВ-2М» (УНУ НМК ИФМ), «Центр технологий новых магнитных материалов» (ЦТ НММ) и Суперкомпьютерный центр дизайна перспективных материалов (СКЦ).

Такое объединение, в которое вошли

- ЦКП исследовательского (аналитического) типа с набором современного исследовательского (измерительного) оборудования;
- УНУ, которая по действующей классификации относится к группе «Ядерные и термоядерные комплексы (установки)» и позволяет проводить исследования по актуальным направлениям физики конденсированного состояния вещества с использованием потоков как быстрых, так и медленных нейтронов, включая изучение транспортных, магнитных, структурных

или сверхпроводящих свойств новых материалов, в том числе, радиоактивных;

- технологический кластер новых магнитных материалов с современным технологическим оборудованием и чистыми помещениями;

- суперкомпьютерный центр, обеспечивающий проведение расчетов с использованием пакетов AMULET и Yeti на высокопроизводительном вычислительном кластере,

позволит комплексно решать научные и научно-технологические задачи по большинству приоритетных направлений научно-технологического развития РФ, включая переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, созданию систем обработки больших объемов данных, машинному обучению и искусственному интеллекту и др.

ЦКП ИЦ НПМ и УНУ НМК ИФМ УрО РАН зарегистрированы на сайте <http://www.ckp-rf.ru> и с 2011 года представляют информацию в рамках ежегодного мониторинга доступности и результативности деятельности центров коллективного пользования научным оборудованием и уникальных научных установок.

Программа (план) исследований ФТИК ИФМ УрО РАН составлена с учетом приоритетных направлений фундаментальных и прикладных исследований в области физических свойств материалов, в первую очередь твердых тел, металлов, сплавов, наноматериалов и наноструктур.

1. Разработка физических основ технологического дизайна многослойных металлических магнитных наноструктур для спинтроники, обеспечивающего заданное сочетание гигантского магнитосопротивления и важнейших функциональных характеристик базовых элементов магнитной сенсорики

1.1 Синтез и исследование спин-транспортных свойств сверхрешеток, содержащих магнитные нанослои из сплавов системы Co-Fe и немагнитные слои Cu, которые обладают рекордными значениями магнитосопротивления от 75 до 85 % при комнатной температуре в сочетании с линейным изменением сопротивления в магнитных полях до 10 кЭ и вследствие этого являются перспективными для разработки на их основе датчиков тока для электроэнергетики высоких мощностей.

1.2 Синтез и исследование магнитотранспортных свойств сверхрешеток на основе тройных сплавов Co-Fe-Ni и меди с целью поиска механизмов систематического уменьшения магнитного гистерезиса и получения связанных с магнитным гистерезисом функциональных характеристик, превышающих зарубежные аналоги.

1.3 Синтез и исследование новых многослойных наногетероструктур типа «спиновый клапан» на основе меди и ее сплавов с легкоплавкими элементами с использованием технологии сюрфактантов для получения магнитных наносенсоров с предельно малым гистерезисом и рекордно высокой чувствительностью.

1.4 Разработка магнетронной технологии получения и исследование новых многослойных наногетероструктур типа «спиновый клапан» с синтетическими антиферромагнетиками.

1.5 Разработка магниточувствительных микромасштабных сенсоров на основе наноструктур с туннельным магнетосопротивлением.

1.6 Разработка магниточувствительных матричных сенсоров на основе наноструктур с гигантским и туннельным магнетосопротивлением для применения в приборах и устройствах неразрушающего контроля металлических материалов и изделий.

2 Исследование неустойчивости магнитного состояния в интерметаллидах с фрустрированной редкоземельной подсистемой

2.1 Приготовление ряда редкоземельных интерметаллических соединений типа RMn_2Si_2 , RMn_6Sn_6 и R_2Fe_{17} (R – редкоземельный элемент).

2.2 Анализ структуры. Измерения магнитных свойств. Изучение магнитных структур нейтронографическими методами. Построение магнитных фазовых диаграмм. Изучение аномалий магнитных, магнитотепловых, магнитоупругих и магниторезистивных свойств при спонтанных и индуцированных магнитным полем фазовых переходах, а также под внешним гидростатическим давлением.

2.3 Разработка новых материалов, перспективных для использования в магнитотепловых и магнитострикционных устройствах.

3 Прогнозирование радиационно-индуцированных процессов набухания и ползучести в оболочках ТВЭЛов из аустенитных и ферритно-мартенситных сталей реакторов БН. Оценка предельного ресурса элементов внутриреакторных конструкций, определение путей (методов) его повышения.

3.1 Определение характеристик структурного состояния материалов после эксплуатации в реакторах на быстрых нейтронах (БН), с использованием методов просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа, методов нейтронного рассеяния, мессбауэровской спектроскопии, магнитометрии.

3.2 Разработка и верификация моделей радиационно-индуцированных процессов структурно-фазовых превращений, набухания и радиационной ползучести в материалах внутриреакторных конструкций.

4 Исследование механизмов радиационной чувствительности кристаллов Al_2O_3 (3- δ), прогнозирование радиационно-метрических свойств кристаллов при целенаправленном воздействии на подсистему дефектов кристаллической структуры, повышение радиационной стойкости и радиационной чувствительности.

4.1 Разработка технологии термооптического модифицирования радиационно-оптических и магнитных свойств кристаллов анионодефицитного корунда и создание на их основе одного из самых чувствительных люминесцентных детекторов ионизирующих излучений типа ТЛД-500.

4.2 Исследование с целью выяснения природы дефектов, возникающих при предельных режимах термооптической обработки и способствующих полной потере функциональных свойств детекторов ТЛД-500 методами рентгеновской, нейтронной, электронной дифракции, магнитометрии, ЭПР и люминесцентно-оптической спектроскопии. Изучение возможности многократного восстановления детекторов, в том числе в тонких слоях толщиной до 1 мкм.

4.3 Адаптация полученной технологии термооптического модифицирования к другим оксидным и неоксидным системам, применяемым не только в радиационной дозиметрии и спектрометрии, но и в качестве и радиационно-стойких материалов, материалов для спинтроники, материалов с заданной и регулируемой магнитной восприимчивостью. Создания материалов с градиентным или послойным изменением свойств, используя в указанной технологии для нагрева систем лазерное излучение, мощные наносекундные электронные и ионные пучки с варьируемой энергией.

4.4 Исследование структуры радиационно-чувствительных образцов, в т.ч. легированных магнитоактивными примесями (Ti, Cr и др.) методами электронной микроскопии, дифракции рентгеновских лучей и нейтронов. Измерение магнитной восприимчивости при охлаждении от комнатой до низких температур, при нагревании в области низких температур в магнитном поле и без поля, снятие полевых зависимостей – кривых намагничивания и перемангничивания – при гелиевой температуре (с учётом кристаллографической анизотропии) для образцов, легированных магнитоактивными ионами.

4.5 Разработка принципов и создание образцов люминесцентных покрытий солнечных элементов, смещающих непроизводительные участки спектра солнечного света в область максимальной чувствительности полупроводникового преобразователя (ближняя ИК область), с возможностью сохранения работоспособности покрытия в темноте за счет люминесценции солнечного элемента при взаимодействии с заряженными частицами космического пространства.

5 Создание новейших технологий получения функциональных материалов, обладающих микро-, субмикро- и нанокристаллической структурой с уникальными электрическими, магнитными, механическими, ресурсными и другими характеристиками за счет динамических эффектов при каскадообразующем облучении и распространении мощных упругих и ударных волн, инициирующих структурные и фазовые превращения в среде

5.1 Выплавка сплавов, выбор чистых металлов (Nb, Ti, Al и др.) и функциональных промышленных материалов с особыми механическими, электрическими, магнитными, ресурсными характеристиками, в том числе реакторных материалов (более 30 различных объектов на основе Fe, Ti, Al) для фундаментальных исследований и разработки уникальных ионно-пучковых технологий модификации свойств материалов.

5.2 Формирование как равновесных, так и сильнонеравновесных (метастабильных) состояний металлов и сплавов с использованием ИПД (сдвига

под давлением), холодной пластической деформации, закалки из расплава и закалки от повышенных температур.

5.3 Модификация стабильных и метастабильных металлов и сплавов мощными непрерывными пучками ионов тяжелых инертных газов (Ar^+ , Kr^+ , Xe^+ ; $E=5-50$ кэВ) с использованием ударно-волновых эффектов (связанных с распространением мощных посткаскадных упругих и ударных волн).

6 Исследование закономерностей формирования структуры и свойств новых мультифазных жаропрочных и износостойких сталей и сплавов на основе аномальных деформационно-индуцированных диффузионных превращений

6.1 Атомистическое моделирование методом молекулярной динамики деформационно- индуцированных низкотемпературных процессов растворения (выделения) дисперсных частиц (оксидов, интерметаллидов и др.) в матрице сплавов на основе железа.

6.2 Экспериментальные исследования методами электронной микроскопии, мессбауэровской спектроскопии, нейтронографии и атомно-зондовой томографии механизма аномальных деформационно-индуцированных диффузионных превращений в сплавах железа при разных температурах, связанных с низкотемпературным растворением дисперсных фаз, в частности поверхностных оксидов для разработки физических основ создания новых дисперсно-упрочненных оксидами сталей с рекордными характеристиками по жаропрочности и радиационной стойкости.

6.3 Анализ механизма и кинетики аномального поверхностного деформационно-индуцированного (механического) легирования сталей элементами внедрения с использованием уникальной технологии ультразвукового наноструктурирования в средах, содержащих углерод и азот.

7 Исследование структурно-фазовых превращений при лазерном синтезе покрытий, термомеханической тренировке. Триботехнические свойства покрытий при эксплуатации в условиях сухого граничного трения и трения со смазкой

7.1 Исследование структурно-фазовых превращений при износе сверхтвердых покрытий со сверхнизким коэффициентом трения на основе композитов B₄C-BN-C.

8 Исследование нестехиометрии и структуры функциональных неорганических наночастиц с высокой степенью атомного беспорядка методами дифракции, малоуглового рассеяния и просвечивающей электронной микроскопии

8.1 Синтез нестехиометрических неорганических наночастиц оксидов, карбидов и сульфидов химическими и физическими методами.

8.2 Исследования нестехиометрии и структуры неорганических наночастиц оксидов, карбидов и сульфидов методами нейтронной дифракции и рассеяния нейтронов под малыми углами.

8.3 Визуальное исследование наночастиц и изучение атомного разупорядочения методами электронной микроскопии высокого разрешения (ПЭМТecnai G2 30 Twin).

9 Исследование физико-химических принципов разработки и создания оксидных материалов с высокой протонной проводимостью

9.1 Исследование кристаллической структуры, неоднородностей кристаллической структуры, микронапряжений, локализации протонов и кислородных вакансий в протонпроводящих оксидах (ПО) с различным допированием;

9.2 Моделирование электронной структуры ПО с помощью метода функционала электронной плотности, определение энергий образования ионных дефектов (протонов, кислородных вакансий) и уровней различных состояний в запрещенной зоне (глубоких акцепторных центров, F-центров и др.).

10 Исследование структуры, морфологии, полупроводниковых и магнитных свойств оксидных функциональных материалов

11 Теоретическое изучение свойств сплавов и нестехиометрических соединений в зависимости от концентрации, типа, количества и расположения примесей и вакансий для сопровождения спектроскопических и магнитных экспериментов. Описание, объяснение и предсказание электронных и магнитных свойств соединений в ферро-, антиферро- и парамагнитной фазах в зависимости от температуры

11.1 DFT+DMFT расчеты магнитных, электронных и структурных свойств как в парамагнитном, так и магнитно упорядоченном состоянии.

11.2 Исследования электронной структуры и магнитных (включая парамагнитные) свойств соединений, сплавов и/или нестехиометрических твердых растворов с наличием неупорядоченных примесей в рамках CPA+U+SO

формализма (наличие примесей – в рамках приближения когерентного потенциала, корреляции – статические, учет спин-орбитального взаимодействия).

11.3. Расчет обменного магнитного взаимодействия (гайзенберговский обмен). Описание и объяснение структурных фазовых переходов и фазовых переходов металл-диэлектрик в зависимости от температуры и давления.

Врио директора Института,
руководитель ФТИК ИФМ УрО РАН
д-р физ.-мат. наук



А.П. Носов