



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова  
Российской академии наук



# ИК РАН 1943-2013





# Вехи развития кристаллографии



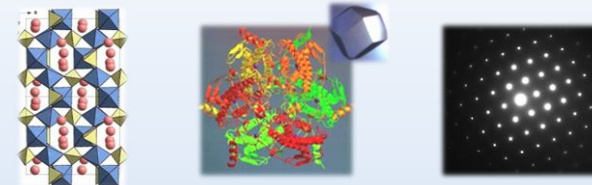
40-е - 60-е годы

Копирование природы  
Промышленные технологии роста кристаллов



60-е - 90-е годы

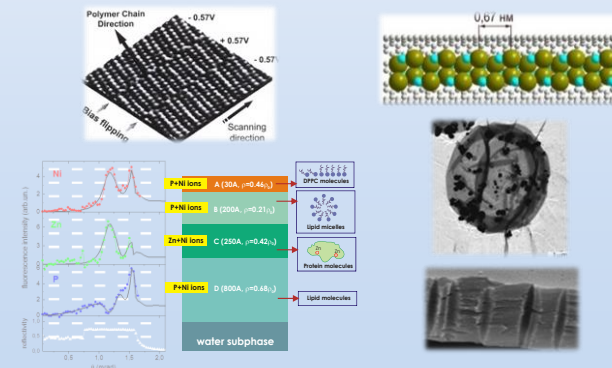
Структура кристаллов  
Дифракционные методы  
Переход к изучению биоорганических кристаллов  
Развитие аналитических подходов



с 90-х годов

Качественный переход:

- от кристаллов к неструктурированным средам и живым системам
- от макрообъектов к микро- и нанообъектам
- от трехмерных к двумерным и одномерным объектам
- от дифрактометрии к недифракционным методам
- от специализации к междисциплинарным исследованиям
- от подражания природе к конструированию объектов, не имеющих аналогов в природе
- от анализа к синтезу





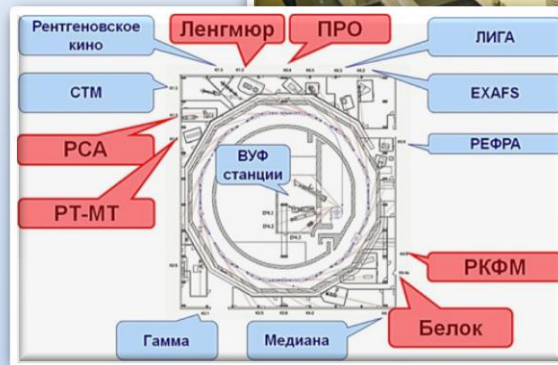
*Основные направления научных исследований  
ИК РАН*

1. Нано- и биоорганические материалы: получение, синтез, структура и свойства, методы диагностики на основе рентгеновского и синхротронного излучения, электронов, нейтронов и атомно-силовой микроскопии
2. Фундаментальные аспекты образования кристаллических материалов и наносистем, их реальная структура и свойства
3. Новые кристаллические и функциональные материалы



### Лаборатория рентгеновской оптики и синхротронного излучения

На источнике синхротронного излучения КЦСИиНТ введена в эксплуатацию станция «Ленгмюр» - единственная в России синхротронная станция, предназначенная для исследования органических и биоорганических слоистых систем на поверхности жидкости.





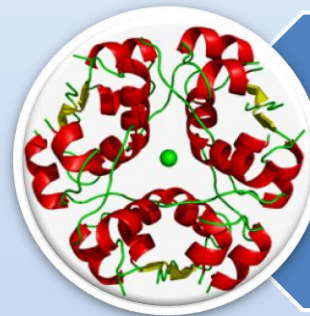


### Космическое материаловедение

Выращены кристаллы сialiрованного инсулина, кристаллы азидного комплекса формиатдегидрогеназы (ФДГ) *Arabidopsis thaliana*, а также кристаллы белков пирофосфатазы холеры *V.cholerae* и туберкулёзной пирофосфатазы *M.tuberculosis*.



Гексамерная  
молекула  
генноинженерного  
инсулина  
человека

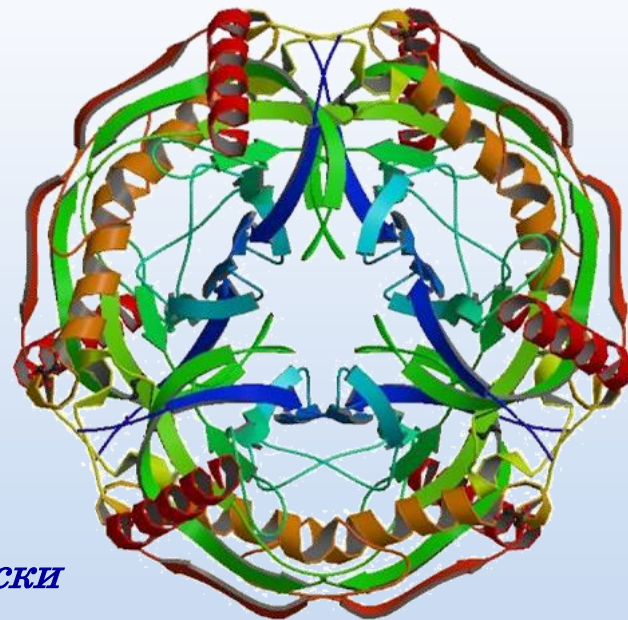


Вторичная  
структура  
субъединицы  
пирофосфатазы  
*M.Tuberculosis*



### *Космическое материаловедение*

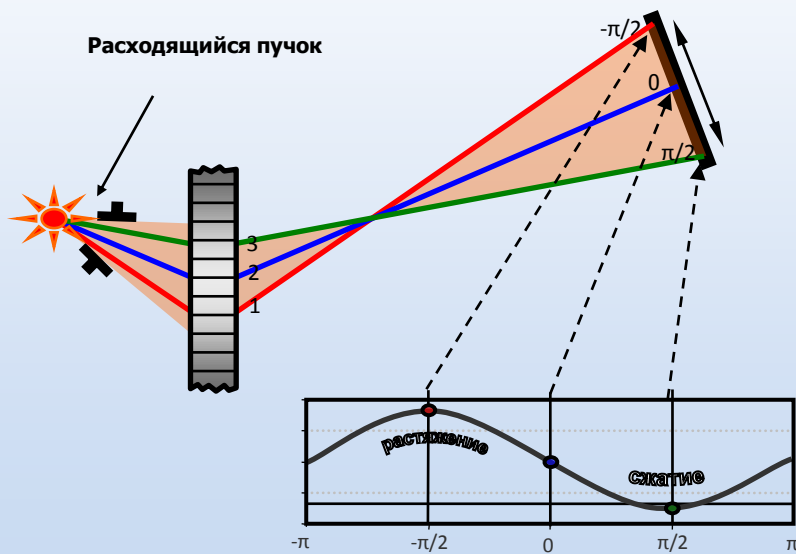
Проведены рентгенодифракционные исследования полученных кристаллов. Данные переданы в Международный банк белковых структур (PDB).



*Гексамер – биологически  
активная единица  
пиروفосфатазы *M.tuberculosis**



### Лаборатория акустооптики и акустоэлектроники



Разработаны методы и устройство (градиентные рентгеноакустические резонаторы) для управления структурой рентгеновского пучка: фокусировкой, коллимацией и расходимостью за счет создаваемого ультразвуковым градиента параметра кристаллической решетки.

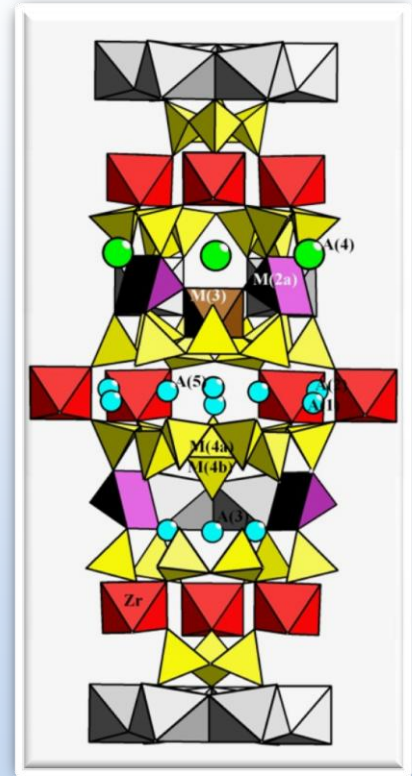
*Схема управления пространственным положением рентгеновского пучка*



### Лаборатория рентгеноструктурного анализа

Выполнено рентгеноструктурное исследование 7 цеолитоподобных минералов, принадлежащих группам цирконосиликата эвдиалита (Кольский п-в), бериллофосфата рошерита (Бразилия, Минас-Жераис) и алюмосиликата канкринита (Сакрофано, Италия, Прибайкалье).

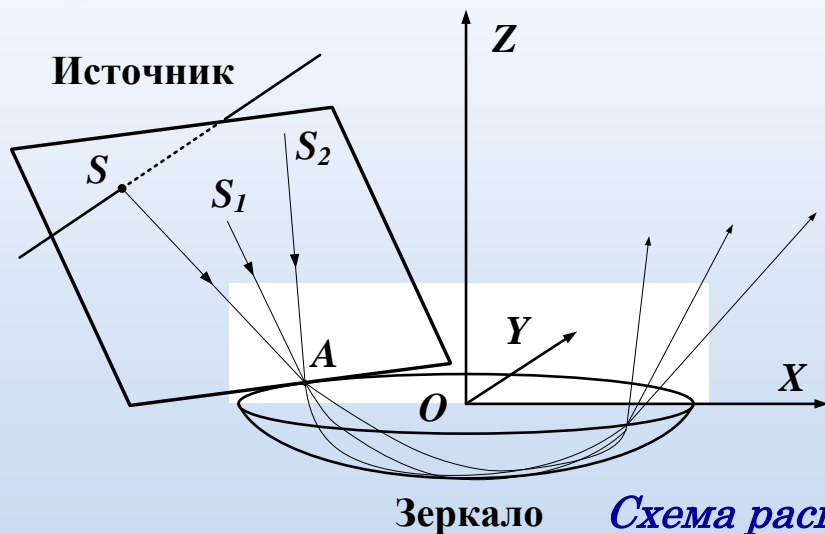
*Структура минерала группы  
эвдиалита – андриановита*







### Сектор нейтронографии и рентгеновской рефлектометрии



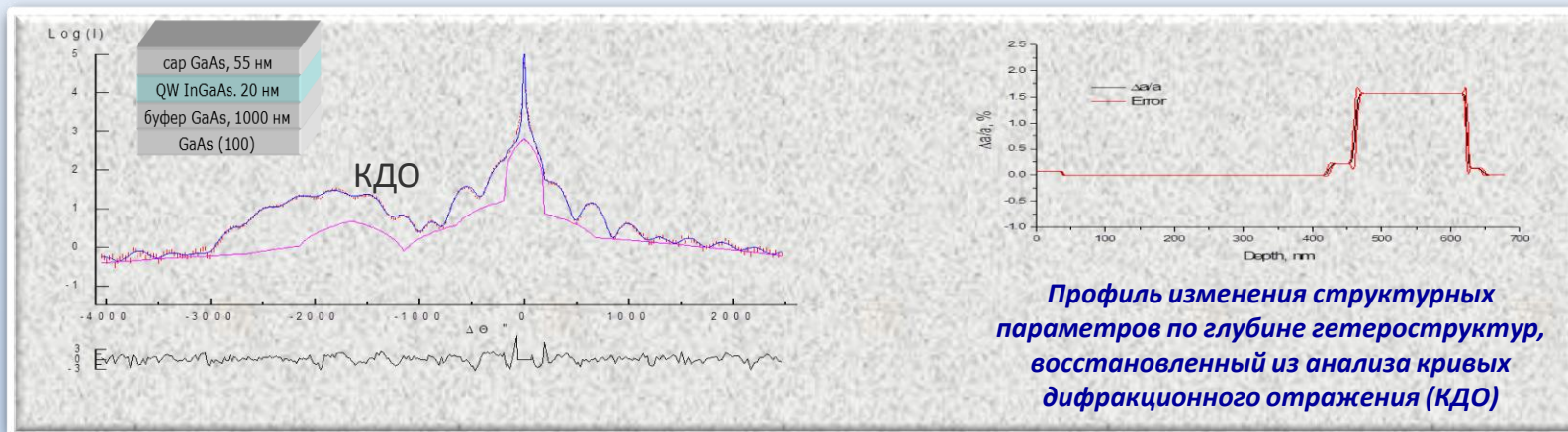
Впервые удалось экспериментально и теоретически описать эффект шепчущей галереи на вогнутых сферических поверхностях в жёстком диапазоне рентгеновских длин волн (0.15 – 0.3 нм). Успешные результаты данного исследования являются важной предпосылкой для создания метода измерения шероховатостей вогнутых поверхностей.

*Схема распространения лучей, падающих на вогнутую осесимметричную поверхность в режиме шепчущей галереи.*



### Лаборатория дифрактометрии кристаллических слоев

Развиты рентгеновские методы диагностики многослойных систем с наноразмерными слоями. Показано, что использование совокупности экспериментальных данных различных рентгеновских методов позволяет восстановить параметры структуры отдельных слоев многослойной системы с меньшими среднеквадратичными отклонениями.

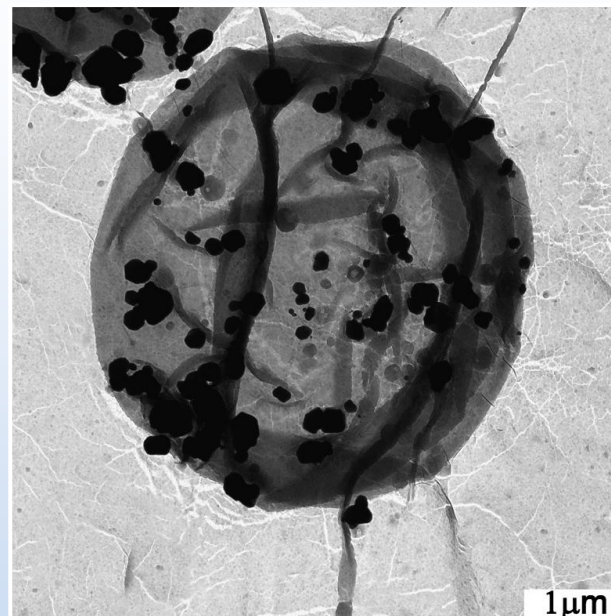


**Профиль изменения структурных параметров по глубине гетероструктур, восстановленный из анализа кривых дифракционного отражения (КДО)**



### Лаборатория малоуглового рассеяния

Достигнуто управление количеством, размерами и взаимным расположением наночастиц серебра, синтезируемых в оболочке полиэлектролитных капсул, с помощью изменения условий реакции серебряного зеркала. Созданы капсулы, перемещающиеся под действием внешнего магнитного поля, содержащие магнитные наночастицы оксидов железа.

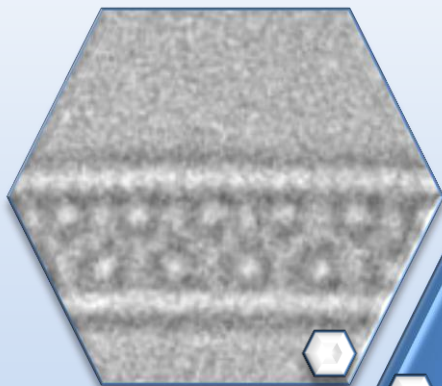


*Электронномикроскопическое изображение полиэлектролитной капсулы с наночастицами серебра, полученными с помощью реакции серебряного зеркала.*



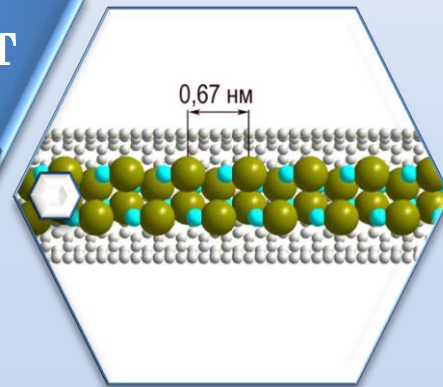
Лаборатория  
электронной  
микроскопии

Методом высокоразрешающей электронной микроскопии исследована структура квазиодномерных (1D) кристаллов, закристаллизованных во внутреннем канале одностенных углеродных нанотрубок (ОСНТ). Построены атомные модели нанокристаллов  $1\text{DCuI@OSNT}$ ,  $\text{CuBr@OSNT}$ ,  $\text{AgBr@OSNT}$ .



Электронно-  
микроскопи-  
ческое  
изображение

Модель  
композиита  
 $1\text{DCuI@OSNT}$



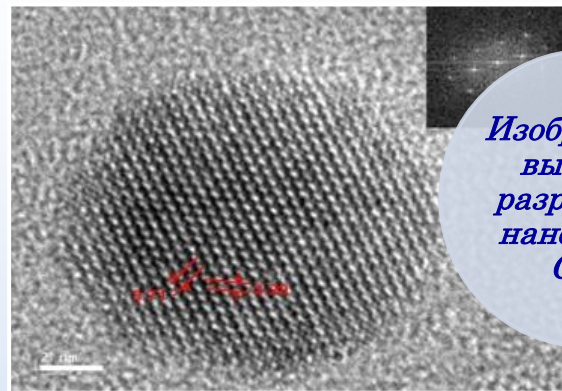




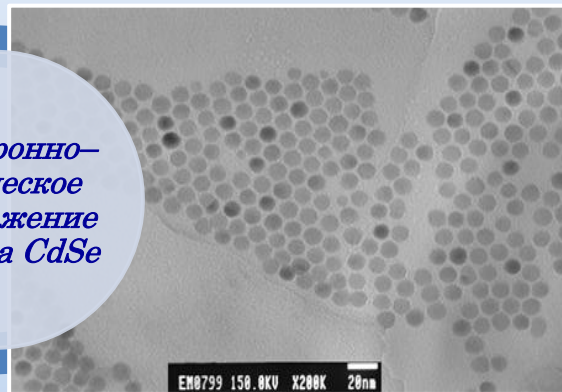
### Сектор электронной дифрактометрии

Впервые применен комплексный подход с использованием взаимно дополняющих методов к исследованию размеров, морфологии и кристаллической структуры металлсодержащих наночастиц.

Полученные структурные данные были использованы при разработке новых способов синтеза кобальтсодержащих наночастиц, наночастиц CdS и CdSe и наночастиц нестехиометрических фторидов.



*Изображение  
высокого  
разрешения  
наночастиц  
CdSe*



*Электронно-  
оптическое  
изображение  
образца CdSe*

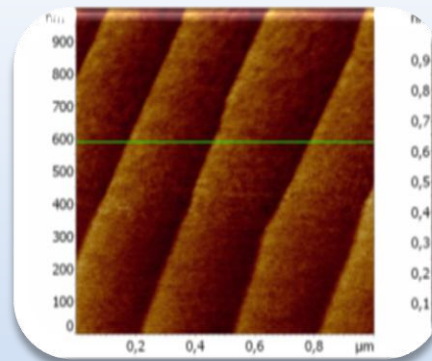
*Наночастицы  
имеют очень узкое  
распределение по  
размерам,  
благодаря чему  
«самоорганизуются»*



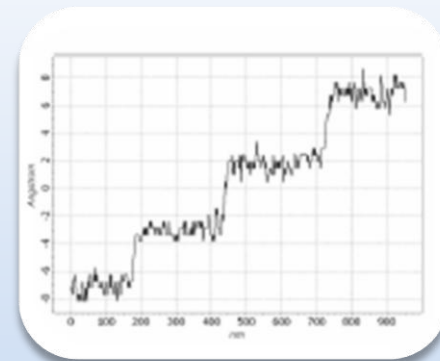
### Лаборатория поисковых ростовых исследований

В ходе технологических работ по получению сапфировых пластин со сверхгладкой поверхностью и исследований ее модификации при термической обработке найдены условия формирования на поверхности пластин наноразмерных террасно-ступенчатых структур.

АСМ-изображение (А) и профиль сечения (Б) поверхности тестового образца из сапфировой пластины с разориентацией  $0.1^\circ$  относительно плоскости (0001).



А



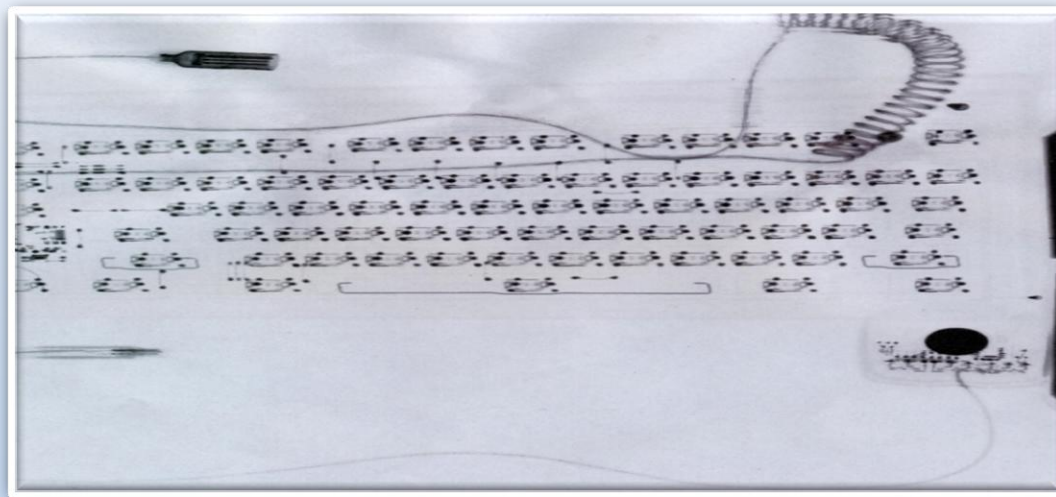
Б



### Группа полупроводниковых материалов

Модифицированным методом Обреимова – Шубникова получены монокристаллы CdTe и CdZnTe диаметром до 120 мм. Впервые в России посредством изготовленных многоэлементных детекторов получено цифровое рентгеновское изображение высокого качества.

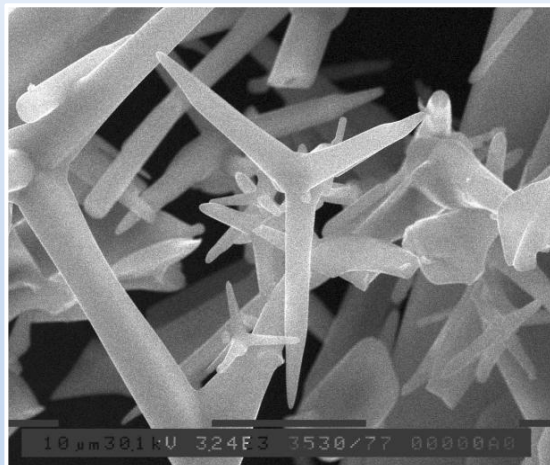
Пример  
полученного  
цифрового  
рентгеновского  
изображения:  
компьютерная  
клавиатура



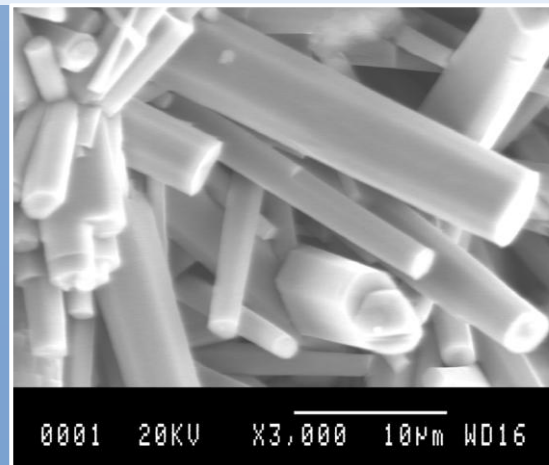


*Отдел  
кристаллизации  
из растворов*

Установлена чёткая взаимосвязь между морфологическими особенностями кристаллитов и спектрально-генерационными характеристиками лазерного излучения нано- и микрокристаллических объектов ZnO



*Микрофотографии  
кристаллитов ZnO,  
полученных методами  
высокотемпературного  
пиролиза и  
гидротермального синтеза*



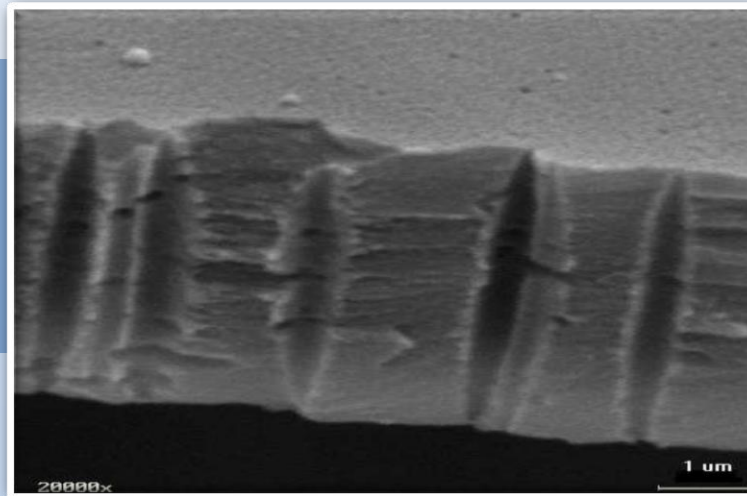




### Отдел мембранных технологий

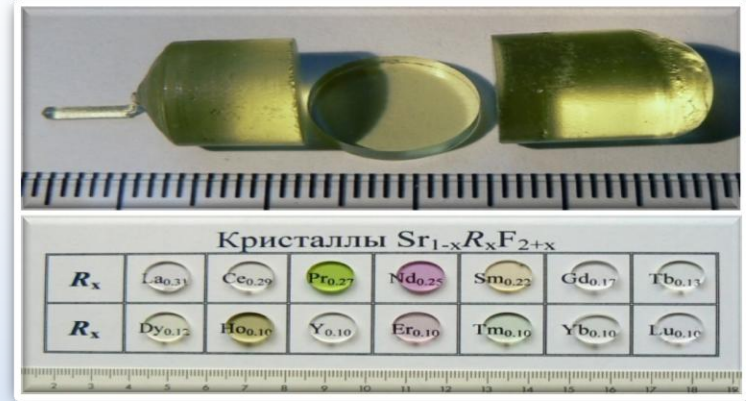
Разработаны основы получения асимметричных трековых мембран с селективным диаметром пор 30 нм, обладающих повышенной производительностью в процессах фильтрации жидких и газообразных смесей.

*Микрофотография  
скола  
асимметричной  
трековой мембраны*





Лаборатория  
фторидных  
материалов



Открыт эффект снятия механических напряжений в кристаллах  $\text{SrF}_2$  при изоморфном введении ионов РЗЭ.

Показано, что новые кристаллы представляют интерес как оптические среды, прозрачные в широком диапазоне спектра, с улучшенными механическими характеристиками и суперионной проводимостью.



Лаборатория  
фторидных  
материалов

Разработана методика выращивания кристаллов  $\text{LiYbF}_4:\text{Ce}^{3+}$  высокого оптического качества диаметром до 50 мм методом вертикальной кристаллизации.

Показана перспективность их использование в качестве фильтрующих оптических элементов для выделения спектра  $16^{\text{ого}}$  диапазона 0.25 – 0.29 мкм.

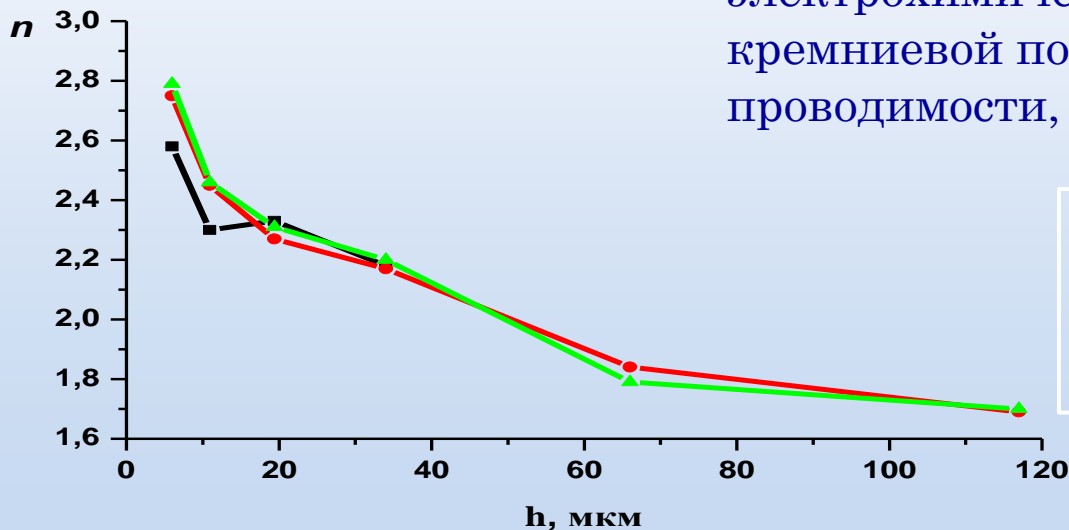


*Внешний вид кристалла  $\text{LiYbF}_4$ ,  
легированного ионами  $\text{Ce}^{3+}$*



### Лаборатория кристаллооптики

Проведено исследование влияния условий приготовления на оптические свойства слоев пористого кремния разной толщины, изготовленных путем электрохимического травления кремниевой подложки n-типа проводимости, легированной сурьмой.



*Зависимости показателей преломления от толщины пористых слоев, рассчитанные разными способами*

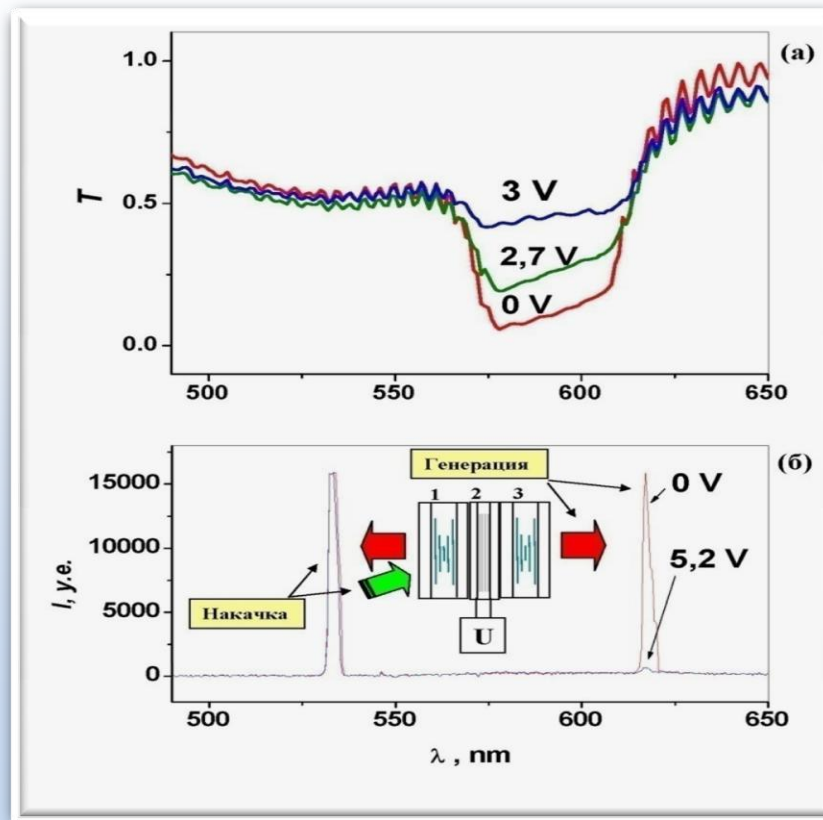


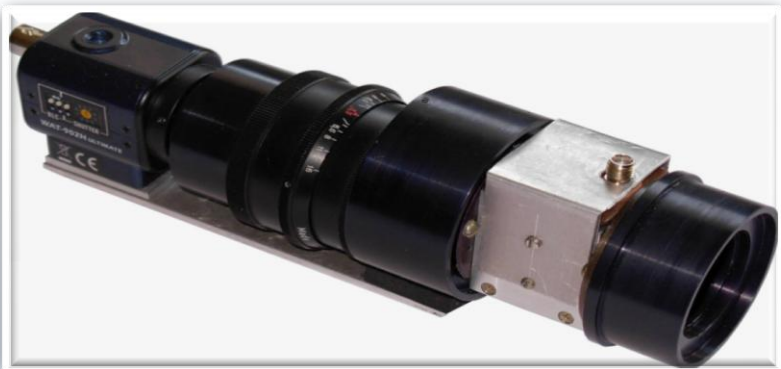


### Лаборатория жидких кристаллов

Созданы экспериментальные образцы трехслойных фотонных структур с управляемой интенсивностью лазерной генерации. Подобные жидко-кристаллические элементы, выполненные на микроуровне, могут составить основу для создания информационных лазерных панелей на основе жидких кристаллов.

*Спектры пропускания трехслойной фотонной структуры в зависимости от напряжения на управляющем слое (а). Спектры оптической накачки (532 нм) и лазерной генерации (617 нм) при различных управляющих напряжениях (б).*





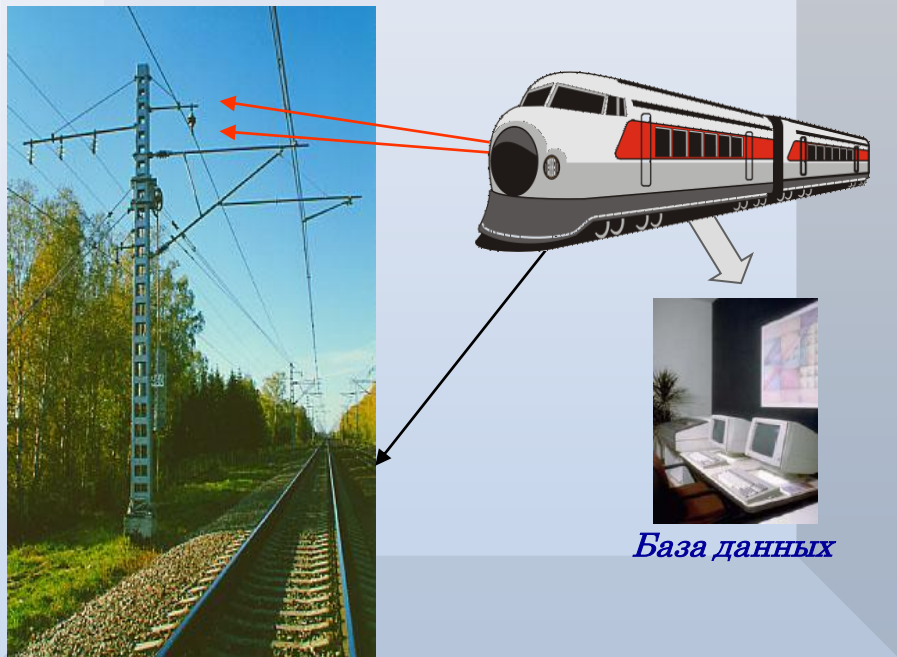
Прибор контроля распределения температур в высокотемпературных системах и расплавах (многоточечный мультиспектральный пирометр)

Авторы - член-корреспондент РАН Ковальчук М.В., д.ф.-м.н. Писаревский Ю.В., к.х.н. Ломонов В.А., Виноградов А.В., Першин Ю.А.

В рамках Программы РАН «Научное приборостроение» на основе кристаллов *парателлури́та* разработан многоточечный мультиспектральный пирометр для контроля распределения температур в высокотемпературных системах и расплавах.



### Схема работы системы мониторинга железнодорожных линий электропередач



### Прибор диагностики электрического коронного разряда «Корона»

Авторы: ИК РАН, к.ф.-м.н. Волошин А.Э.  
совместно с ЗАО «НТЦ Реагент»

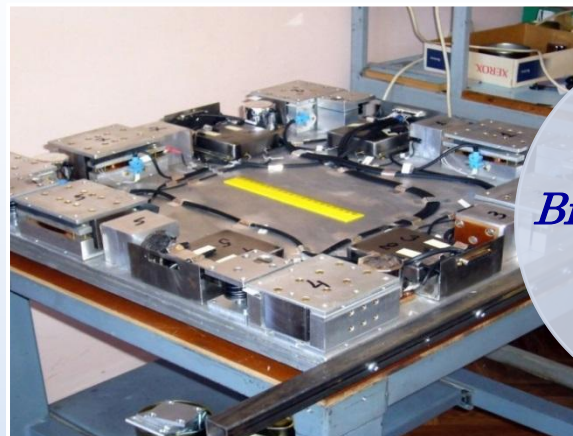
- Система обнаруживает коронный разряд
- Дает количественную оценку его величины
- Проводит гиперспектральный анализ повреждений
- На основе сопоставления информации с базой данных (предыдущее техническое состояние) дает обоснованную рекомендацию о замене или ремонте поврежденных элементов



### НИЦ «Космическое материаловедение» ИК РАН

Изготовлен экспериментальный образец виброзащитной панели для защиты точной аналитической и технологической аппаратуры в области нанотехнологий, наномеханики, наноэлектроники, выращивания биокристаллов.

Использование нового принципа раздельного управления шестью модами колебания панели и цепей компенсации паразитного сигнала наклона акселерометров, обеспечивает десятикратное понижение границы активного диапазона (от 2 Гц до 0,2 Гц) и максимальный коэффициент подавления колебаний 60 дБ при 10 Гц.



*Виброзащитная  
панель*

НИЦ «Космическое материаловедение» ИК РАН,  
д.ф.-м.н. Мелик-Шахназаров В.А., д.т.н. Захаров Б.Г

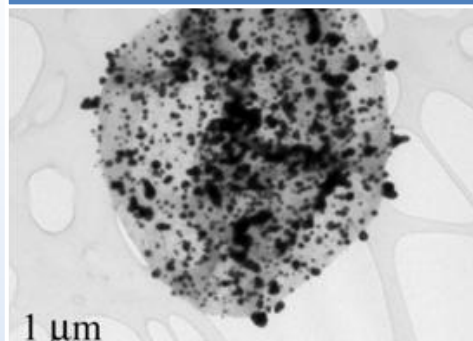


### Лаборатория малоуглового рассеяния

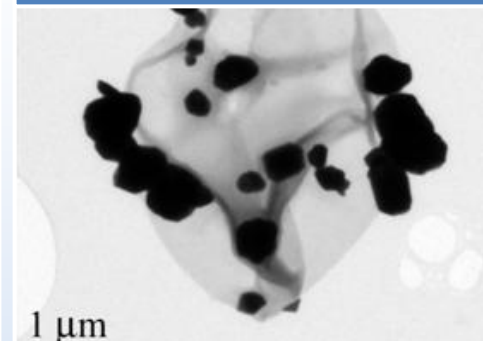
Получены полиэлектролитные капсулы с использованием мезопористых субмикрочастиц диоксида титана в качестве ядер. Разработаны способы модификации полиэлектролитных оболочек флуоресцентными красителями.

Осуществлена модификация полиалкилцианоакрилатных контейнеров наночастицами магнетита, позволяющими детектировать положение капсул, транспортировать и концентрировать закапсулированное вещество под действием магнитного поля.

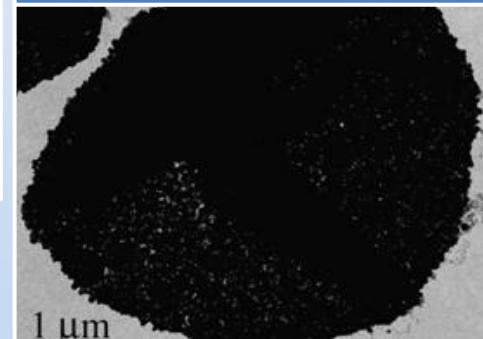
10 мин 25°C



60 мин 25°C



3 мин 50° C



Нанокompозитные  
полиэлектролитные  
капсулы





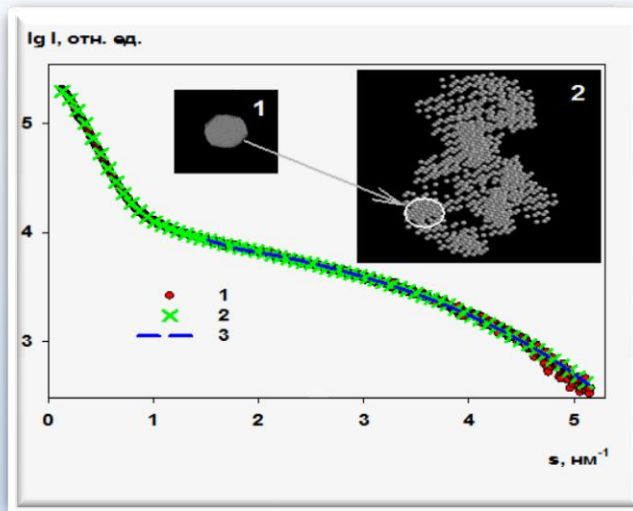
### Лаборатория малоуглового рассеяния

Получены аналитические выражения для интенсивности малоуглового рассеяния от систем полидисперсных частиц с формфактором эллипсоида вращения.

Предложен метод формального определения ряда важнейших параметров слоистых сред – толщин характерных ("проблемных") электронных областей в поперечном сечении по нормали к образцу, а также числа этих областей.

Методом малоуглового рентгеновского рассеяния исследован процесс образования в среде сверхкритического  $\text{CO}_2$  наночастиц серебра, платины и палладия в различных полимерных матрицах.

### Развитие и применение метода малоуглового рентгеновского рассеяния



Восстановленные формы индивидуальных наночастиц серебра и их агрегатов в матрицах ПВП:

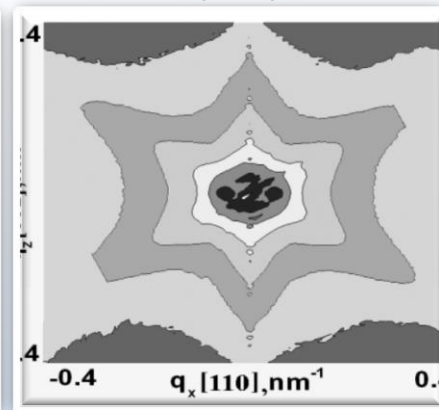
- 1 – экспериментальная кривая МУР;
  - 2 – кривая рассеяния от ab initio модели для агрегатов наночастиц серебра;
  - 3 – кривая рассеяния от ab initio модели для индивидуальных наночастиц серебра.
- На врезке сверху:
- 1 - пространственная модель индивидуальных наночастиц серебра;
  - 2 - пространственная модель агрегатов наночастиц.

### Рентгенодифракционные исследования гетероструктур

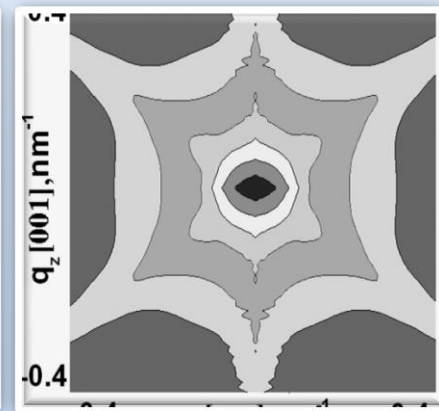
Лаборатория  
дифрактометрии  
кристаллических слоёв

- Рентгенодифракционными методами исследована взаимосвязь параметров гетероструктур  $\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As} / \text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As} / \text{InP}$  и их электронных транспортных свойств.
- Установлено, что при возрастании мольной доли InAs в квантовой яме улучшается качество реальной структуры образцов и увеличивается холловская подвижность и концентрация электронов.

Карта двумерного распределения интенсивности дифракционного отражения (ДРИДО) от многослойной структуры.



Фотолюминесценция бислоев, сформированных на подложке InP(001) при 4К

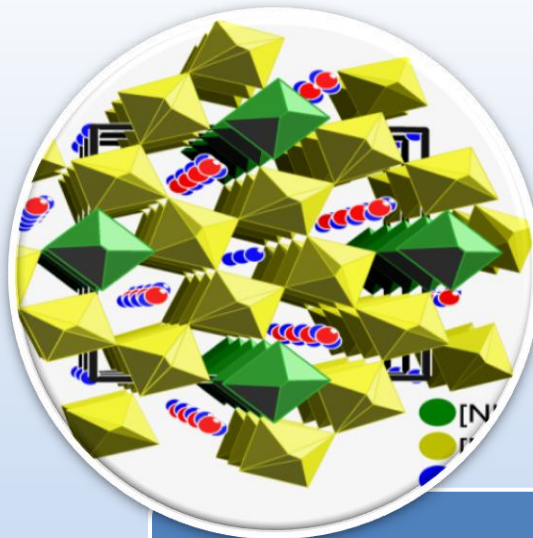




### Лаборатория рентгеноструктурного анализа

### Рентгеноструктурный анализ функциональных материалов

Для ряда кристаллов  $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$  ( $0,32 \leq x \leq 0,82$ ) установлены закономерные связи между химическим составом, атомной структурой и физическими свойствами, позволяющие целенаправленно управлять в определенных пределах физическими свойствами кристаллов путем изменения соотношения стронция и бария. Это избавляет от затратного метода проб и ошибок при синтезе кристаллов с требуемыми параметрами. Данные нелинейные кристаллы обладают важными для практических применений пьезоэлектрическими, электрооптическими и пироэлектрическими свойствами.



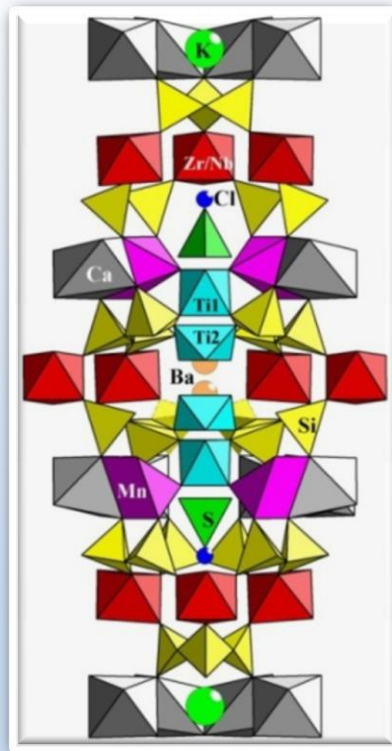
Атомная структура  
кристаллов  $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$



### Лаборатория рентгеноструктурного анализа

### Рентгеноструктурный анализ минералов

Впервые предложена кристаллохимическая систематика минералов группы эвдиалита, в рамках которой классифицированы все 25 утвержденных минеральных вида и 50 структурно изученных разновидностей. Материал с описанием этого минерала направлен в Международную комиссию по новым минералам и их названиям (CNMNC IMA).

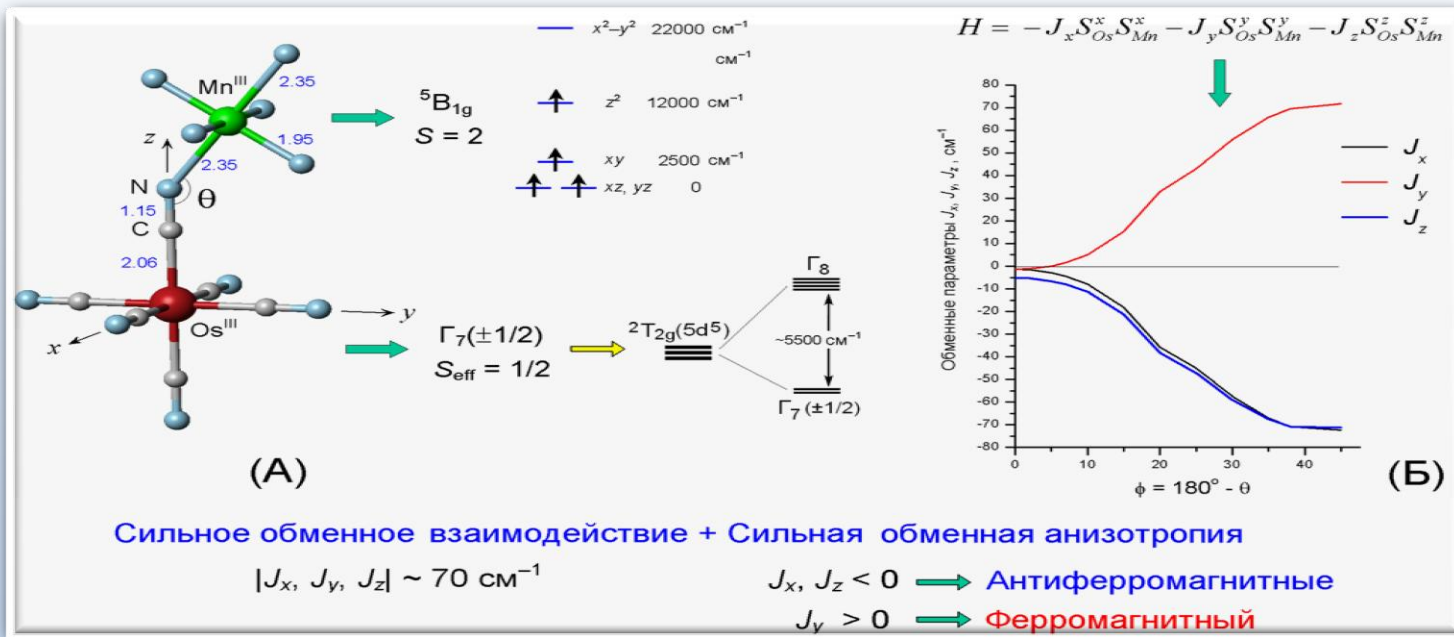


Структура природного цирконо-  
ниобосиликата с Ti-  
центрированными кольцами  
 $Si_9O_{27}$  - нового представителя  
группы эвдиалита



Лаборатория  
рентгеноструктурного  
анализа

### Теоретические исследования по проблеме высокотемпературных мономолекулярных наноманитов



Сильное обменное взаимодействие + Сильная обменная анизотропия

$$|J_x, J_y, J_z| \sim 70 \text{ cm}^{-1}$$

$J_x, J_z < 0$  → Антиферромагнитные

$J_y > 0$  → Ферромагнитный

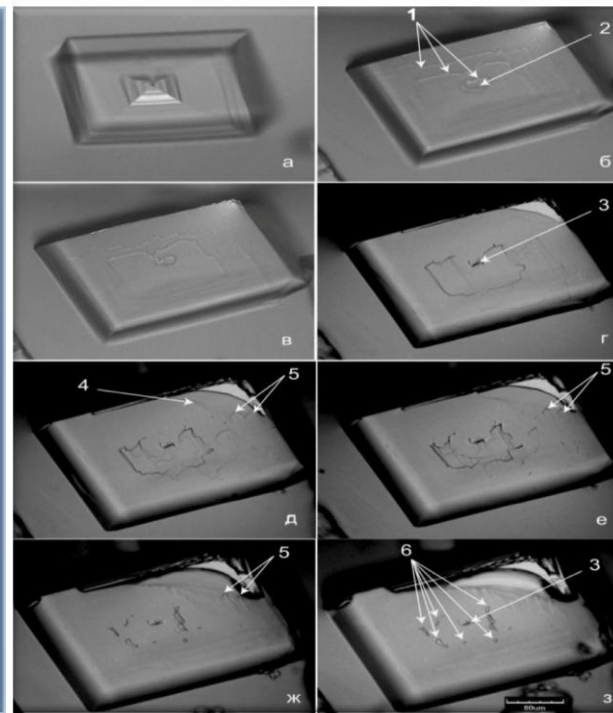




### Лаборатория рентгеновской топографии

Проведено *in situ* наблюдение кристаллизации эпитаксиальных слоев из водных растворов в системах  $K_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O / K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$  (KNSH/KCSH) и  $(NH_4)_2Ni(SO_4)_2 \cdot 6H_2O / (NH_4)_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$  (ANSH/ACSH). Обнаружено, что неоднородное распределение упругих напряжений по поверхности макроступени приводит к искривлению их краев и захвату включений раствора.

Рис. Кристаллизация слоев KCSH на грани (001) кристалла KNSH: а – исходный кристалл KNSH, б-з – поверхность образца после контакта исходного кристалла с раствором KCSH (б – через 4 сек, в – через 12 сек, г – через 52 сек, д – через 1 мин 45 сек, е – через 2 мин 08 сек, ж – через 4 мин 48 сек, з – через 5 мин 58 сек). 1-4 – макроступени, 5, 6 – включения.



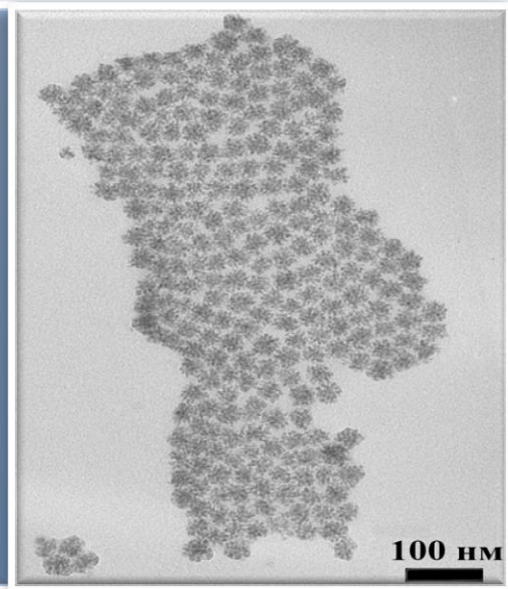


### Сектор электронной дифрактометрии

### Упорядоченные структуры на основе самоорганизации наночастиц CdSe и Au.

Впервые комплексом структурных методов (электронная и рентгеновская дифракции, просвечивающая электронная микроскопия и малоугловое рассеяние рентгеновских лучей) изучено явление самоорганизации наночастиц CdSe и Au в так называемые «сверхрешетки», в которых наночастицы упорядочены строго определенным образом.

ПЭМ-  
изображение  
2D-структуры  
ассоциатов  
наночасти  
CdSe

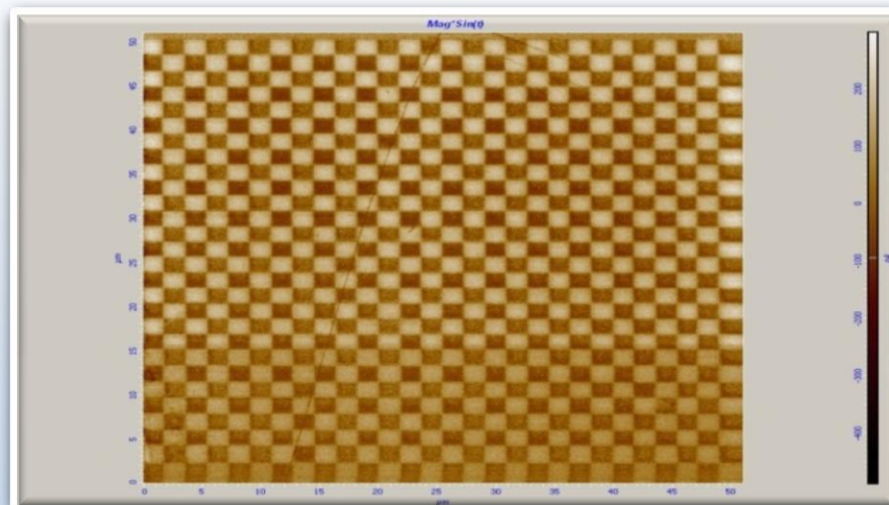




Лаборатория оптики  
нелинейных материалов,  
сектор сканирующей  
зондовой микроскопии

### *Двумерные сегнетоэлектрические нано- и субмикродоменные структуры с заданным дизайном*

Впервые в сегнетоэлектрических кристаллах твердых растворов ниобата бария-стронция (НБС) обнаружена возможность выполнения методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) записи двумерных (2D-) сегнетоэлектрических нано- и субмикродоменных структур с заданным дизайном.



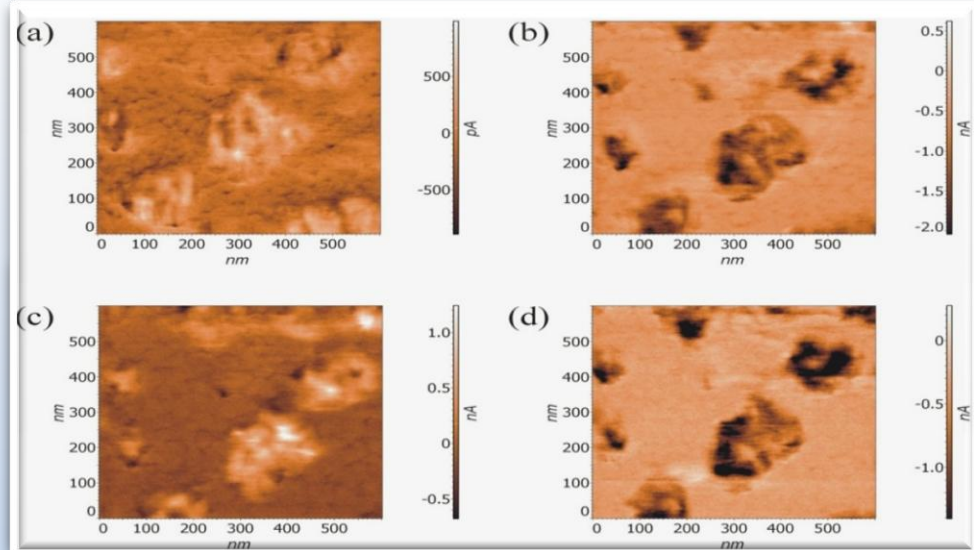
«Шахматная доска», состоящая из квадратных доменов противоположного знака, записанная в кристалле НБС методом точечной литографии при приложении к зонду АСМ потенциала  $\pm 10$  В (время экспозиции 10 мсек). Период структуры рассчитан для преобразования спектра  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Ti-лазера.



Лаборатория оптики  
нелинейных материалов,  
сектор сканирующей  
зондовой микроскопии

- Методом АСМ в режиме пьезоэлектрического отклика впервые исследована кинетика переключения отдельных сегнетоэлектрических нанокристаллов, полученных из пленок Ленгмюра-Блоджетт сополимера состава 70% поливинилен-фторида и 30% трифторэтилена (ПВДФ).
- Предложена модель роста сегнетоэлектрических нанокристаллов, расчеты по которой хорошо воспроизводят временные зависимости размерных параметров кристаллов.

### Исследование кинетики переключения сегнетоэлектрических нанокристаллов



a – исходное изображение нанокристаллов ПВДФ;  
b – после приложения к нанокристаллу постоянного напряжения -10 В;  
c – после приложения к нанокристаллу постоянного напряжения +10 В;  
d – после повторного приложения к нанокристаллу постоянного напряжения -10 В.

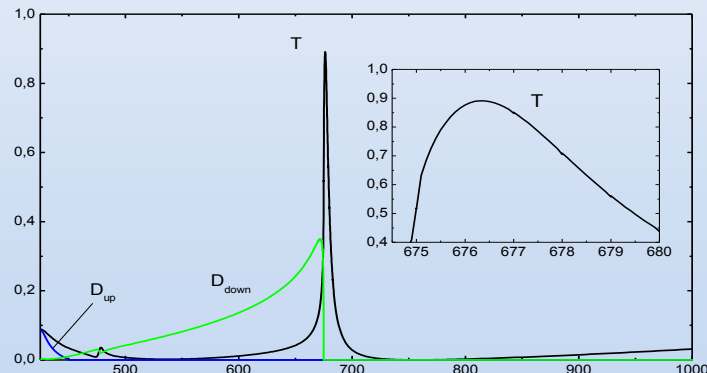
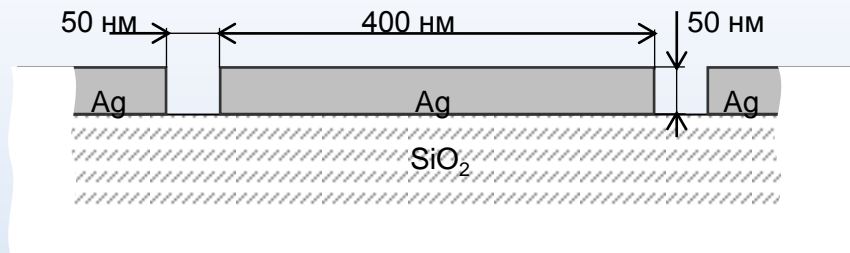




Лаборатория  
теоретических  
исследований

### Теоретический анализ оптических свойств многофункциональных оптических наноматериалов

- Проведён теоретический анализ наноразмерных металлических решёток на диэлектрических подложках.
- На основе смоделированных спектров пропускания и отражения продемонстрированы перспективы применения таких систем для эффективной спектральной фильтрации оптических сигналов.



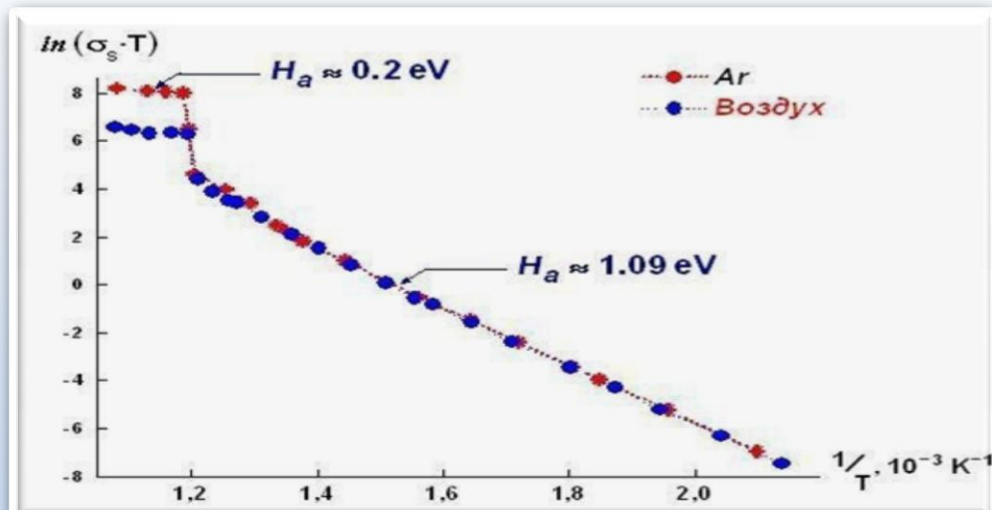




### Лаборатория электрических свойств кристаллов

Впервые надежно показано, что фазовый переход в керамике  $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$  имеет характерные признаки именно суперионного фазового перехода: скачком при температуре  $T \sim 850 \text{ K}$  не только возрастает проводимость (до  $1 \text{ S/m}$ ), но также скачком изменяется и энтальпия активации проводимости  $H_a$  (от 1 до  $0.2 \text{ eV}$ ).

### Исследования проводимости керамики состава $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$



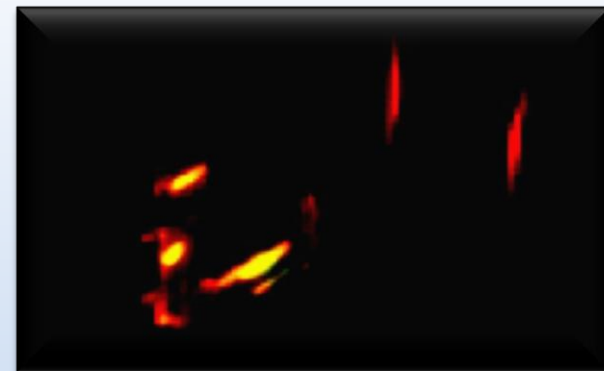
Температурная зависимость керамики  
 $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$  в аррениусовских координатах



### Лаборатория жидких кристаллов

### Лазерная генерация в холестерических жидких кристаллах

- Исследованы два типа лазерной генерации в холестерических жидких кристаллах в области люминесценции примесных молекул лазерного красителя.
- Первый тип относится к брэгговским модам на краю фотонной зоны, распространяющимся вдоль нормали к слою жидкого кристалла.
- Второй тип генерации связан с модами, вытекающими в подложку и распространяющимися под малыми углами к слою.
- Предлагаемый принцип увеличения эффективности основан на подавлении возбуждения вытекающих лазерных мод, используя частично поглощающие тонкие пленки в качестве ориентирующих жидкий кристалл покрытий.

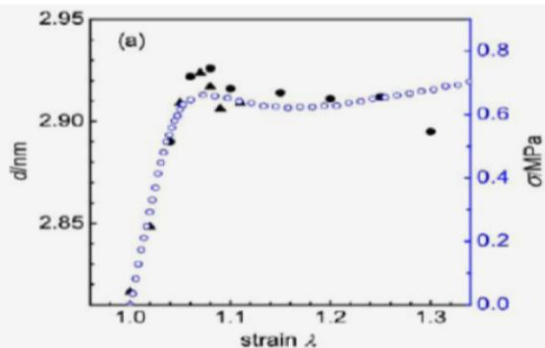


Лазерной генерации из  
торцов подложек,  
ограничивающих слой ЖК.

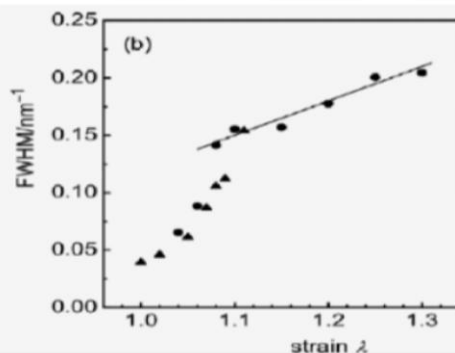


### Лаборатория жидких кристаллов

### Рентгендифракционные исследования сметического эластомера



При малых нагрузках происходит линейное увеличение периода смектических слоев, что отвечает упругому режиму деформации



При дальнейшем увеличении нагрузки наблюдается плато на диаграмме напряжение-деформация. Процесс растяжения сопровождается увеличением ширины рентгеновских пиков, что отвечает последовательному уменьшению размеров смектических доменов (зерен) в образце.

- Методами рентгеновской дифракции высокого разрешения изучена структура смектического эластомера, подвергнутого растяжению в направлении нормали к смектическим слоям.
- Обнаружено, что при некотором критическом напряжении происходит позиционное «плавление» слоевой структуры с образованием нематической фазы из-за дислокаций в сильно дефектной исходной структуре эластомера.

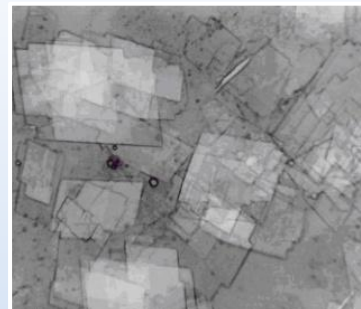


### Лаборатория кристаллооптики

### *Кристаллооптическое исследование синовиальной жидкости у больных ревматическими заболеваниями*

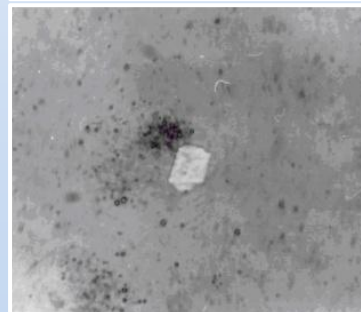
- При исследовании методом поляризационной микроскопии в синовиальной жидкости выявлено наличие кристаллов холестерина.
- Установлено, что размер, количество и рост кристаллов холестерина взаимосвязан с составом синовиальной жидкости.

В ревматоидном узелке

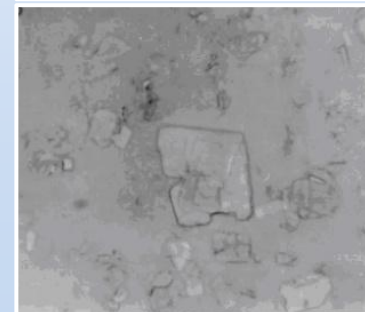


*Кристаллы  
холестерина в  
синовиальной  
жидкости*

В синовиальной жидкости при  
системной красной волчанке



В синовиальной жидкости при  
ревматоидном артрите





### Лаборатория высокотемпературной кристаллизации

1. Впервые методом горизонтальной направленной кристаллизации (метод Багдасарова) проведено выращивание кристаллов кремния. Удельное сопротивление образцов кремния, взятых из середины слитка,  $\sim 10$  ом·см, что почти в 100 раз выше параметров “металлургического” кремния.
2. Впервые на основании изучения системы  $W-Al_2O_3$  описаны несколько сотен химических реакций, а также показано, что при  $P \sim n \cdot 10^{-5}$  бар в химическое взаимодействие может активно вовлекаться расплав  $Al_2O_3$ .
3. Впервые по данным исследований пироэлектрических свойств реальных кристаллов установлены явления самоорганизации дефектов: а) в нестехиометричных кристаллах типа  $KTiOPO_4$  происходит возникновение дефектной подсистемы вида  $Me^+(PO_3)^-$ , характеризующейся петлей гистерезиса, спонтанной поляризацией и критической температурой распада указанных комплексов; б) в дефектных кристаллах  $Gd_2(MoO_4)_3$ ,  $KH_2PO_4$  и  $Pb_5Ge_3O_{11}$  при их поляризации при низких температурах возникает стабильное электрентное состояние, температурные границы существования которого могут простираться до  $\sim 800$  К.





### Сектор скоростных методов кристаллизации

### *Гидратационные и молекулярно-кинетические характеристики двух модельных систем: дигидрофосфата калия (KDP) и гидрофталата калия (БФК) методом СВЧ-диэлектрической спектроскопии*

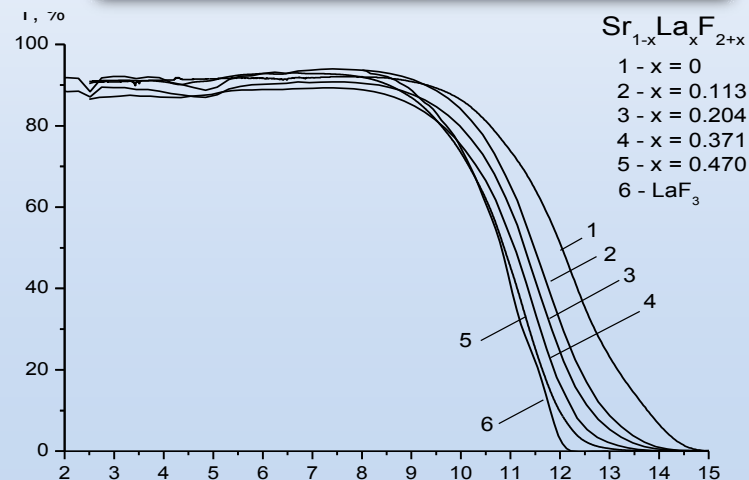
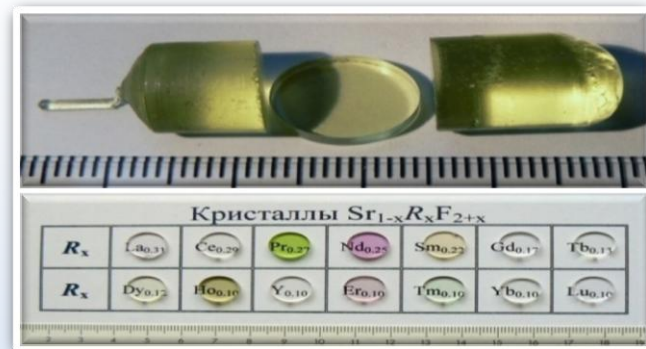
- Изучены гидратационные и молекулярно-кинетические характеристики двух модельных систем: дигидрофосфата калия (KDP) и гидрофталата калия (БФК) методом СВЧ-диэлектрической спектроскопии в см и мм диапазонах волн на частотах 7-25 ГГц в области аномальной дисперсии воды при температурах 288, 298, 308 К.
- Установлен различный тип гидратации фосфатного и фталатного анионов, предполагающий как специфические закономерности роста разных граней указанных кристаллов, так и иной характер их взаимодействия с примесями. Этот вывод подтвержден разнознаковым влиянием малых добавок каталитически активной примеси  $\text{BaCl}_2$  на кинетику роста, морфологию и дефектность граней разных простых форм кристаллов KDP и БФК.



### Лаборатория фторидных кристаллов

### Рост и исследование фторидных кристаллов

- Изучены 26 новых кристаллов  $Sr_{1-x}R_xF_{2+x}$  с  $R = Ce - Sm$ , являющихся оптическими средами с регулируемыми характеристиками, прозрачными в широком диапазоне спектра.
- Граница пропускания ( $\lambda_{50\%}$ ) в области 2 – 17 мкм с ростом  $x$  смещается в коротковолновую область.
- Меняя качественный ( $R$ ) и количественный ( $x$ ) состав, положение  $\lambda_{50\%}$  можно сдвигать от 10.7 до 12.2 мкм.
- Кристаллы  $Sr_{1-x}R_xF_{2+x}$  перспективны как селективные оптические фильтры для области 2 – 10 мкм.

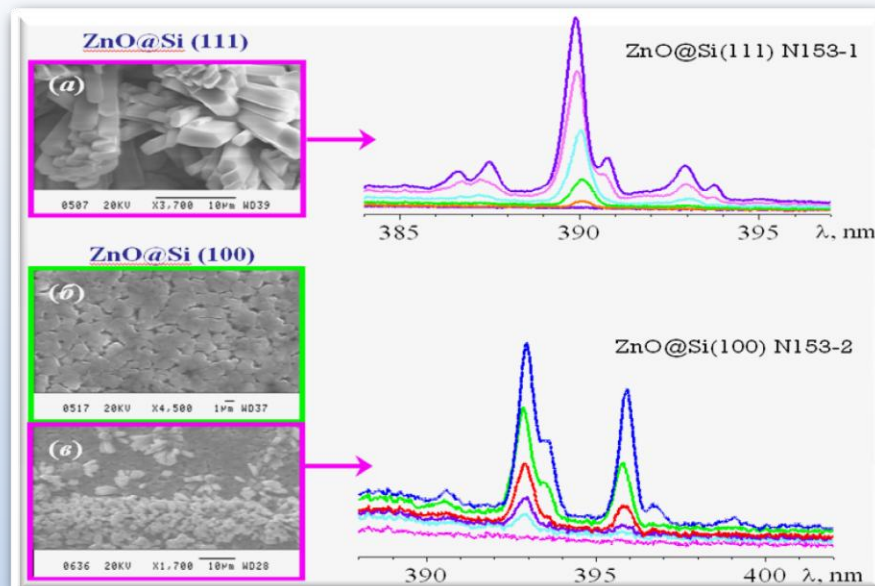




### Отдел кристаллизации из высокотемпературных растворов

### Лазерная генерация нанокompозитов $ZnO@Si(100)$ и $ZnO@Si(111)$ , синтезированных в гидротермальных условиях

- Подтверждена обнаруженная ранее зависимость лазерной генерации оксида цинка от морфологического типа кристаллитов в результате исследований генерации на нанокompозитах  $ZnO@Si(111)$ ,  $ZnO@Si(100)$  высокого оптического качества, синтезированных в мягких гидротермальных условиях на Si-подложках разной ориентации.
- В зависимости от ориентации, на ней формируются кристаллиты оксида цинка в виде нано- и микростержней (рис А), подложка Si (111); либо сплошные тонкие пленки ZnO (рис. Б) подложка Si (100); на краевых участках подложки Si (100) наблюдались сростки нано- и микростержней (рис.В).



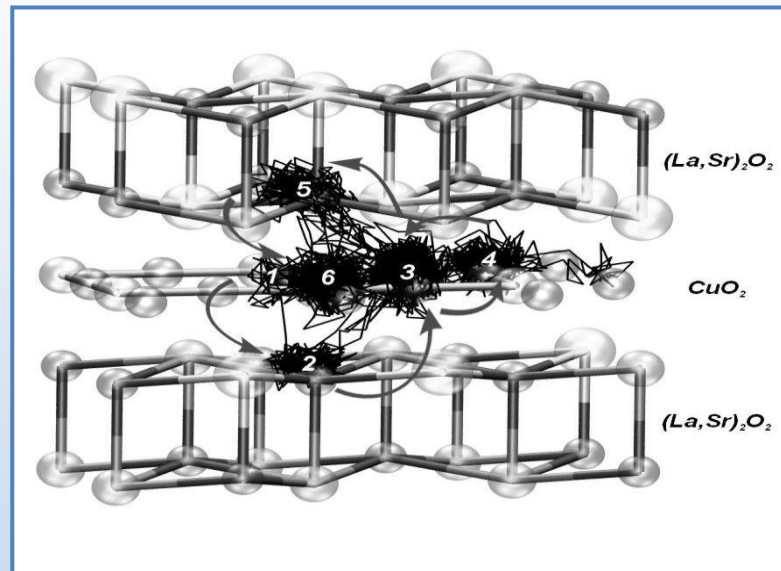
*Низкопороговая УФ-лазерная генерация наблюдалась только на образцах с морфологией, показанной на рис. А и В*



### Сектор твёрдых электролитов

### Моделирование ионного переноса в слоистых купратах лантана–стронция $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-\delta}$ и $La_{2-x}Sr_{1+x}CuO_{6+\delta}$

- Установлен микроскопический механизм кислород-ионного переноса и показано, что сильная анизотропия структуры сказывается на анизотропии транспортных свойств.
- Для  $La_{2-x}Sr_xCuO_{4-\delta}$  движение анионов кислорода удалось проследить на микроскопическом уровне (см. рис.).
- Для  $La_{2-x}Sr_{1+x}CuO_{6+\delta}$  показано, что транспорт кислорода в изученных купратах обусловлен миграцией двух сортов кислорода.



Кислород O1 в слоях  $CuO_2$  осуществляет перескоки типа  $3 \rightarrow 4 \rightarrow 3$ , а также переходит в вакантные места  $((La,Sr)_2O_2)$ -блоках (переходы  $1 \rightarrow 2$ ,  $3 \rightarrow 5$ ) и обратно (переходы  $2 \rightarrow 3$ ,  $5 \rightarrow 6$ )

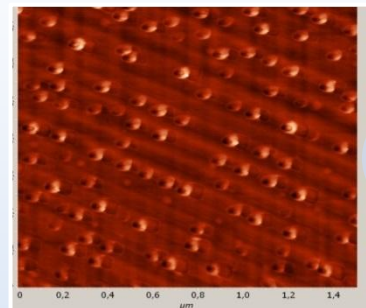




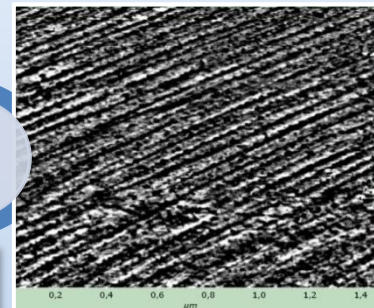
### Отделение ростовых технологий и инноваций

### Получение структурированных ансамблей золота на поверхности сапфира с регулярным нанорельефом

- Впервые получены наноструктурированные ансамбли частиц золота на поверхности сапфира, которые могут служить прообразом функциональных устройств в нелинейной оптике.
- В ходе исследовательских работ по получению металлических покрытий на поверхности наноструктурированных сапфировых пластин найдены условия формирования наноточек золота с плотностью 20-25 объектов на 1 мкм и нанопроводков золота с периодом 40-50 нм.



А



Б

*АСМ-изображение наноточек (А) и нанопроводков (Б) золота на поверхности сапфировой пластины с регулярным нанорельефом*





### Лаборатория физики лазерных кристаллов

### Лазерные кристаллы

1. Предложен новый тип фемтосекундных кристаллических лазеров с комбинированной активной средой, идея которого была предложена в ИК РАН в 1968 г. Для получения фемтосекундных лазерных импульсов используются активированные кристаллы, обладающие контуром усиления для реализации сфазированной многомодовой генерации. Использование комбинированных активных сред (КАС), т.е. помещение в резонатор лазера двух или более разнотипных кристаллов со своими спектральными возможностями, позволяет значительно расширить эффективный контур усиления и тем самым больше возбудить сфазированных мод. Созданный КАС-лазер на основе керамик  $\text{Sc}_2\text{O}_3$  и  $\text{Y}_2\text{O}_3$  с ионами иттербия и диодно-лазерной накачки генерировал импульсы с длительностью 53 фс.



### Лаборатория физики лазерных кристаллов

### Лазерные кристаллы

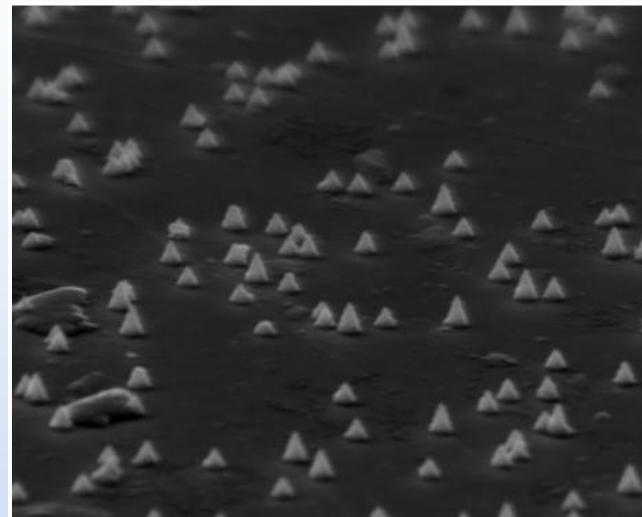
2. Найдены экспериментальные условия и впервые получены многооктавные стоксовы и антистоксовы лазерные частотные “гребенки” (combs) при возбуждении в неорганических и органических кристаллах.  $\chi^{(3)}$ -нелинейной генерации потенциальной для синтеза различных ультракоротких волновых форм (импульсов). Так при пикосекундной одномикронной лазерной накачке в кальците  $\text{CaCO}_3$  была зарегистрирована многоволновая стоксова и антистоксова “гребенка” со спектральной шириной более  $20000 \text{ см}^{-1}$ .



### Отдел мембранных технологий

### *Синтез острий и нанопроволок из серебра, никеля и меди*

- На основе пористых полимерных матриц из полиэтилентерефталата (лавсана) проведен синтез острий и нанопроволок из серебра, никеля и меди
- Изучена десорбция и ионизация молекул различных биологических веществ с полученных острийных поверхностей (масс-спектрометрия).
- Проведены измерения электропроводности единичной медной нанопроволоки и показано, что её вольтамперные характеристики линейны, а удельное сопротивление зависит от ее диаметра и в 2-2,5 раза выше сопротивления объемной меди.



*Средние размеры конусов: диаметр основания 500 нм; радиус закругления конуса может составлять (в зависимости от величины аспектного отношения) 1 – 10 нм; высота конуса 1 – 4 мкм*



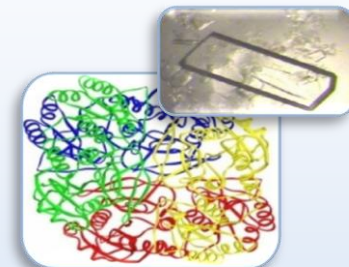
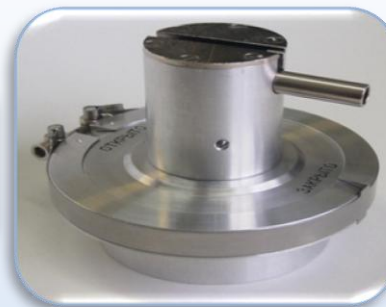
### *Кристаллизация белков в условиях микрогравитации*

В рамках российско-японской программы принято участие в двух космических экспедициях. На борту МКС выращены кристаллы 12 белков, их пространственная структура уточнена с разрешением лучше 2А. Данные внесены в PDB.

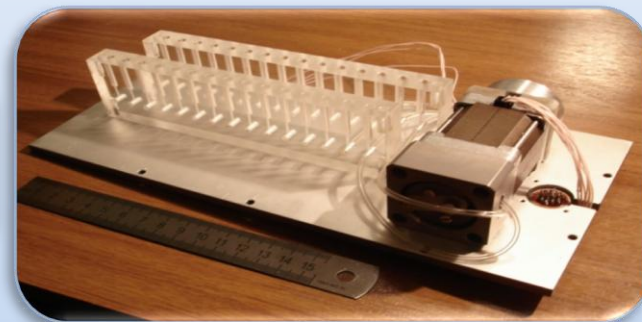
Совместно с ФГУП ЦЭНКИ (КБ ОМ им. Бармина) разрабатывается новая кристаллизационная аппаратура для спутника «Бион»

*М.В. Ковальчук, А.Э. Волошин,  
И.П. Куранова, Л.А. Задорожная и др.*

*МКТ-1*



*МКТ-2*

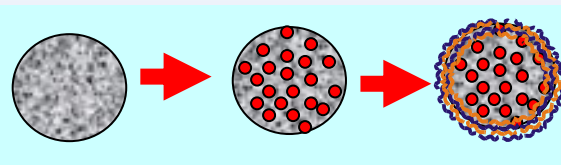




### Многофункциональные микро- и наноконтейнеры

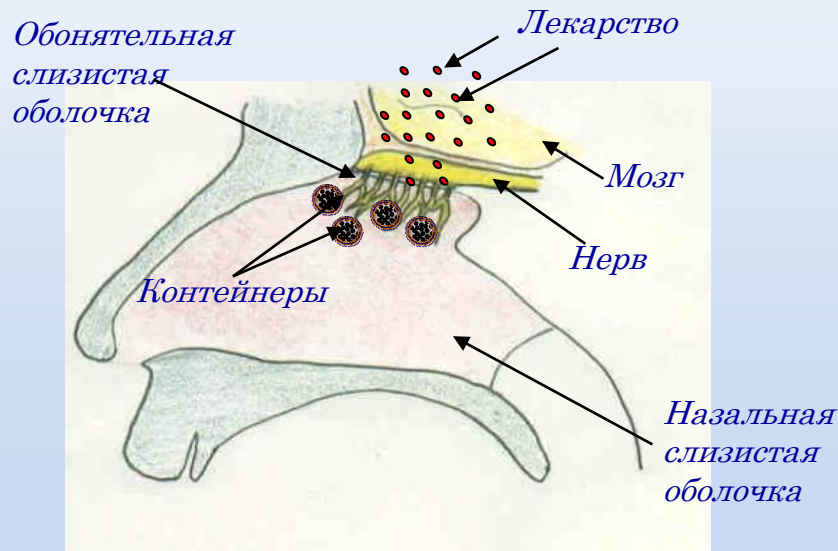
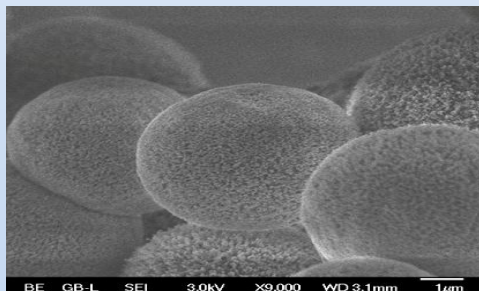
*М.В. Ковальчук, Т.В. Букреева,  
Т.Н. Бородина и др.*

Осуществлена доставка центрального анестетика лоперамида в мозг крыс при интраназальном введении контейнеров на основе пористых частиц



*Адсорбция функционального соединения*

*Формирование мукоадгезивной полимерной оболочки*



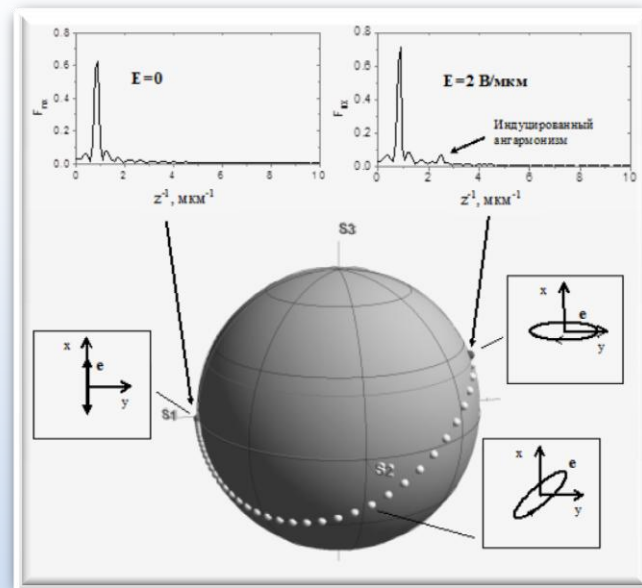




### *Быстрая ангармоническая мода в электрооптическом переключении жидкокристаллических структур на основе хиральных нематиков*

Обнаружен и изучен эффект быстрого электрооптического переключения поляризации в пространственно-структурированных слоях ЖК. Эффект характеризуется быстроедействием в десятки раз выше, чем в современных ЖК-дисплеях.

*С.П. Палто, М.И. Барник, Л.М. Блинов,  
Б.А. Уманский, Н.М. Штыков*

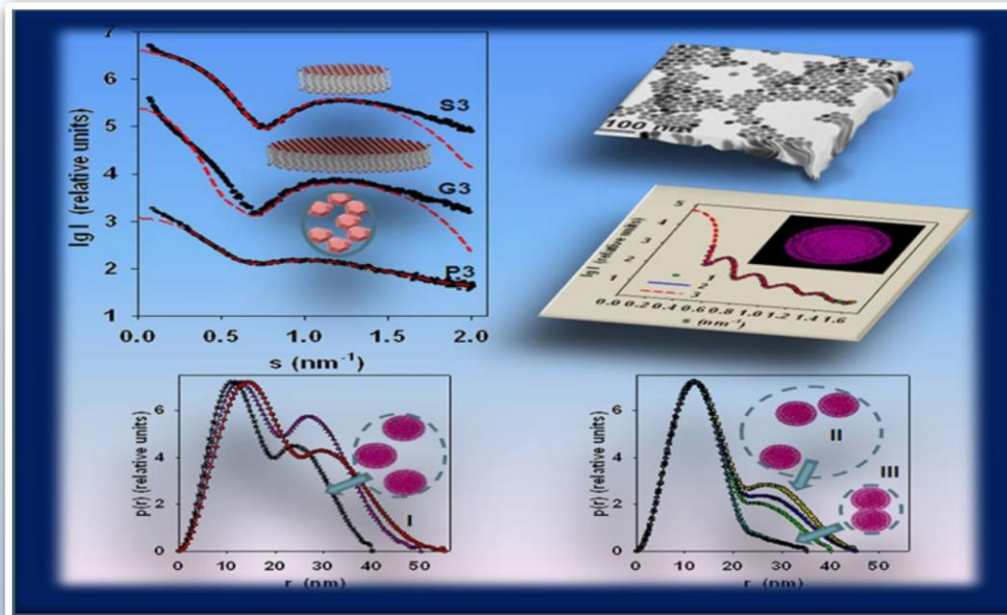


*Изменение поляризации света, прошедшего вдоль оси геликоида через тонкий слой ЖК (8 мкм), при изменении электрического поля от 0 до 2 В/мкм*



### *Малоугловое рентгеновское рассеяние: изучение структуры и свойств биосовместимых магнитных наночастиц*

Эти наночастицы используются в медицине и биологии *как в диагностических целях, так и для лечения раковых заболеваний*. Впервые было предсказано и показано в эксперименте какими структурными характеристиками должны обладать полимеры, стабилизирующие магнитные наночастицы в растворе.

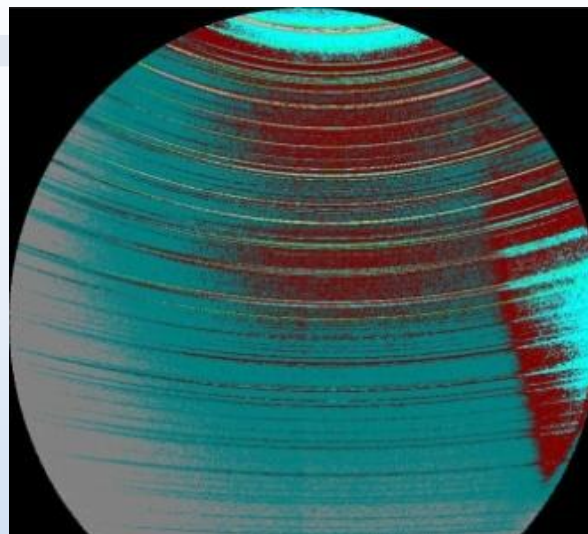


*Э.В. Штыкова, Л.М. Бронштейн,  
П.В. Конарев, Д.И. Свергун*



### *Прецизионное исследование поликристаллов с двумерным детектором на пучках СИ*

Разработан метод исследования структуры поликристаллов с двумерными детекторами на пучках СИ. Интегрирование по большому телесному углу обеспечивает высокую статистическую точность данных. Для эталонных образцов получены R-факторы менее 1%. *Качество определения структуры сравнимо с методом монокристалла*, при этом время съёмки на порядки величин меньше.



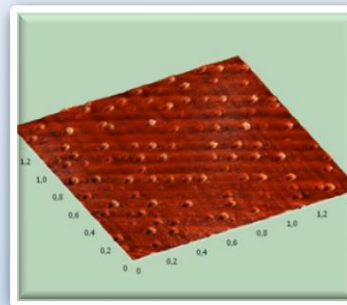
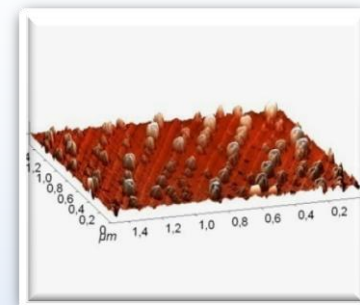
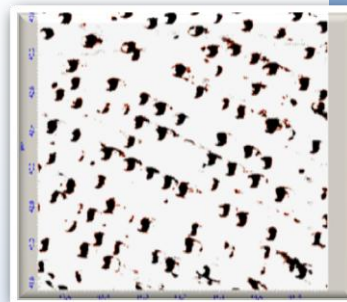
*Двумерная порошковая  
дифрактограмма*

*С.Н. Сульянов, А.А. Русаков, Е.А. Сульянова*



### *Террасно-ступенчатые наноструктуры на поверхности сапфира*

На сапфировых пластинах сформированы упорядоченные ансамбли наночастиц золота, положение которых коррелирует с атомными ступенями на поверхности. С учетом каталитической активности наночастиц металлов (Au, Pd, Ni, Fe) такие ансамбли могут быть использованы для формирования упорядоченных двумерных структур нитевидных кристаллов различного состава, а также углеродных нанотрубок и наностенок.



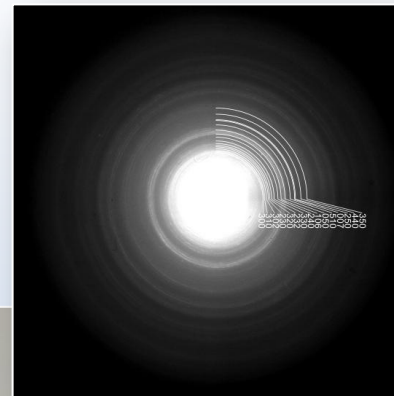
*АСМ изображения  
упорядоченных  
ансамбля  
наночастиц золота  
на сапфировой  
пластине со  
ступенями*

*В.М. Каневский, А.В. Бутапин, В.П. Власов,  
В.Е. Асадчиков, А.Е. Муслимов*

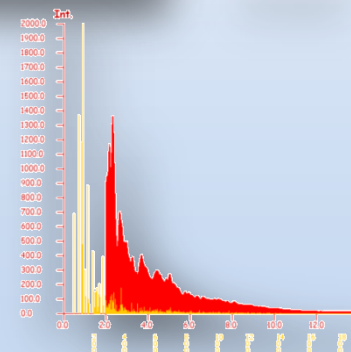


### *Фото – и электроактивные органические наносистемы*

В ИК РАН в рамках Российско-финского контракта (ФЦП) создан универсальный аппаратно-методический комплекс, с привлечением приборной и методической базы структурной и оптической характеристики наноразмерных систем.



Crystal : ZnDHD\_new



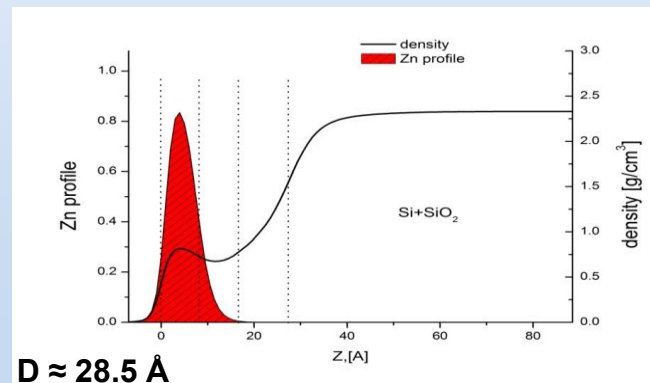
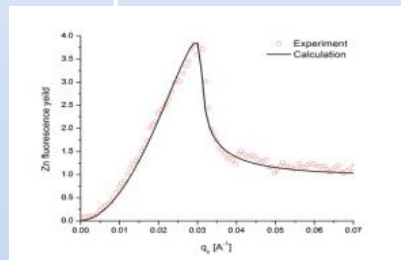
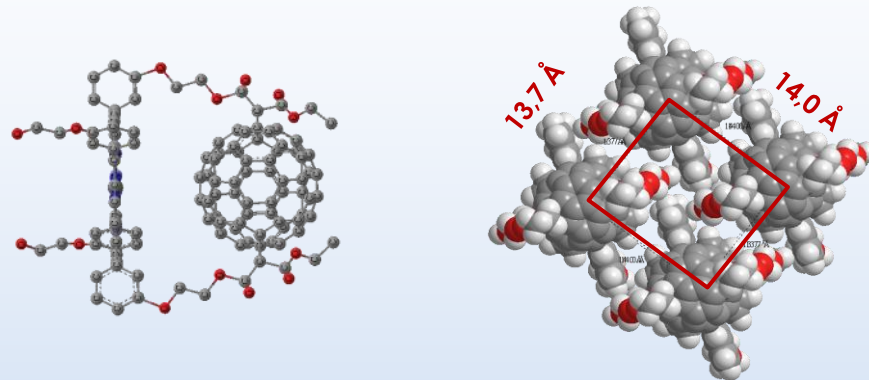




### Фото – и электроактивные органические наносистемы

Приобретено уникальное оборудование, позволяющее изучать органические пленки на поверхности жидкости и изготавливать пленки на твердых подложках.

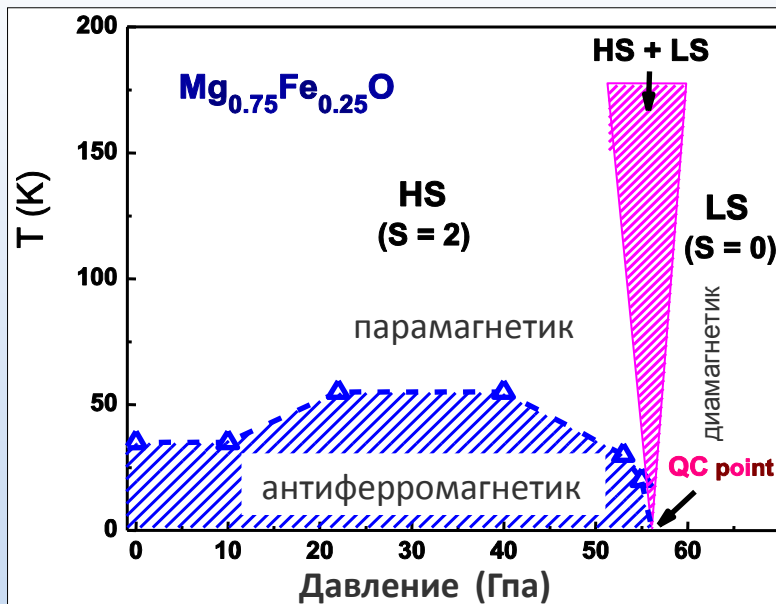
Проведены комплексные исследования структурной организации пленок фотоэлектроактивных органических молекул, в том числе, порфирин-фуллереновых диад.





### *Электронные и магнитные свойства кристаллов магнезиовюстита ( $Mg_{1-x}Fe_x$ )O в экстремальных условиях сверхвысоких давлений, высоких и низких температур*

Магнезиовюстит ( $Mg,Fe$ )O - один из основных минералов в составе нижней мантии Земли. В условиях, близких к существующим на глубине 1000 - 2200 км, (P до 900 кбар, T до 2500 К), обнаружены переходы  $Fe^{2+}$  из высокоспинового ( $S=2$ ) в низкоспиновое ( $S=0$ ) состояние, при которых радикально меняются электро- и теплопроводность, плотность, сжимаемость, скорость звука, вязкость кристаллов.

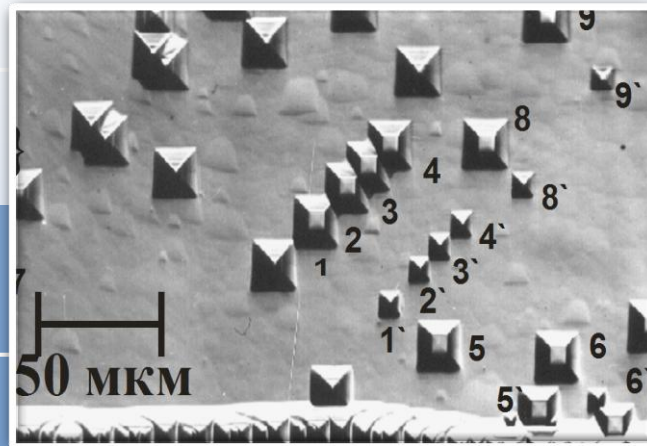


*И.С. Любутин, А.Г. Гаврилук, К.В. Фролов,  
П.Г. Наумов, И.А. Троян, В.В. Стружкин*



### *Природа аномального электрического влияния на магнитопластичность кристаллов*

Обнаружен эффект резкого изменения подвижности дислокаций в щелочно-галогидных кристаллах *при парамагнитном резонансе в магнитном поле Земли*. Эффект открывает технические перспективы управления пластичностью кристаллов.

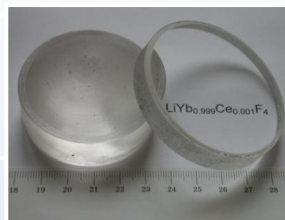


Движение дислокаций в магнитном поле:  
1, 2, ... - начальное положение дислокаций;  
1', 2', ... - конечное положение дислокаций

*В.И. Альшиц, Е.В. Даринская,  
М.В. Колдаева, Е.А. Петржик*



### Оптические фильтры УФ диапазона



В 2010 г. начато серийное производство кристаллов и прибора бортовой обороны



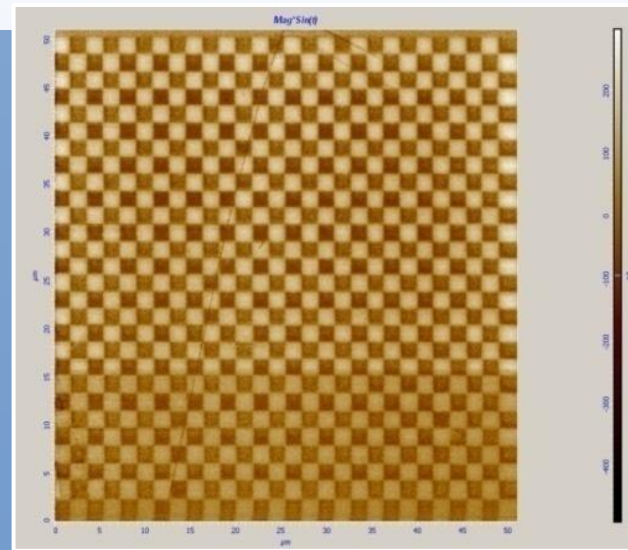
Прибор бортовой обороны

*А.Э. Волошин, Е.Б. Руднева,  
В.В. Долбинина и др.*



### *Двумерные сегнетоэлектрические нано- и субмикродоменные структуры с заданным дизайном*

На доменных структурах, записанных в кристалле НБС методом точечной АСМ-литографии, создана модель нелинейнооптического фотонного кристалла - получено преобразование излучения  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Ti-лазера во вторую гармонику.



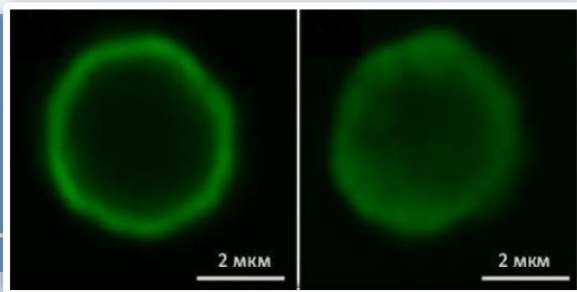
*Т.Р. Волк, А.Л. Толстихина,  
Р.В. Гайнутдинов и др.*





### *Модификация полиэлектролитных капсул для их управляемого перемещения и дистанционного вскрытия оболочек. Применение капсул для доставки лекарств в центральную нервную систему*

*Изображения полиэлектролитных капсул с красителями в оболочке, полученные методом конфокальной флуоресцентной лазерной микроскопии*



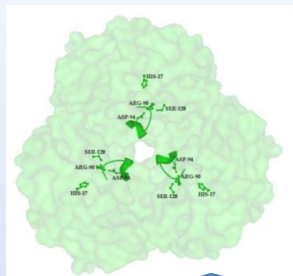
*Схема действия контейнеров назальной доставки.*



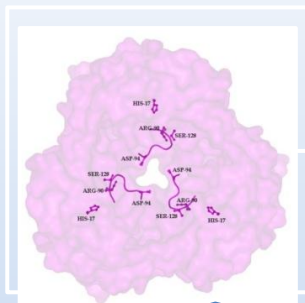
Разработаны новые методы модификации оболочек полиэлектролитных капсул наночастицами магнетита (для управляемого перемещения капсул под действием внешнего магнитного поля), наночастицами серебра и молекулами красителей (для дистанционного вскрытия оболочек капсул воздействием лазерного излучения).



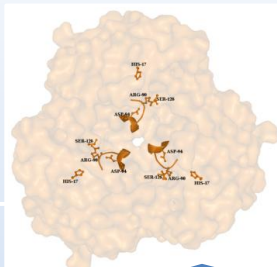
### *Структурный механизм функционирования фосфоантетеин аденилилтрансферазы *Mycobacterium tuberculosis* (PPAT *Mt*) на основании результатов рентгеновского исследования*



Комплекс PPAT *Mt* с субстратом (АТФ)



Апо-PPAT *Mt*

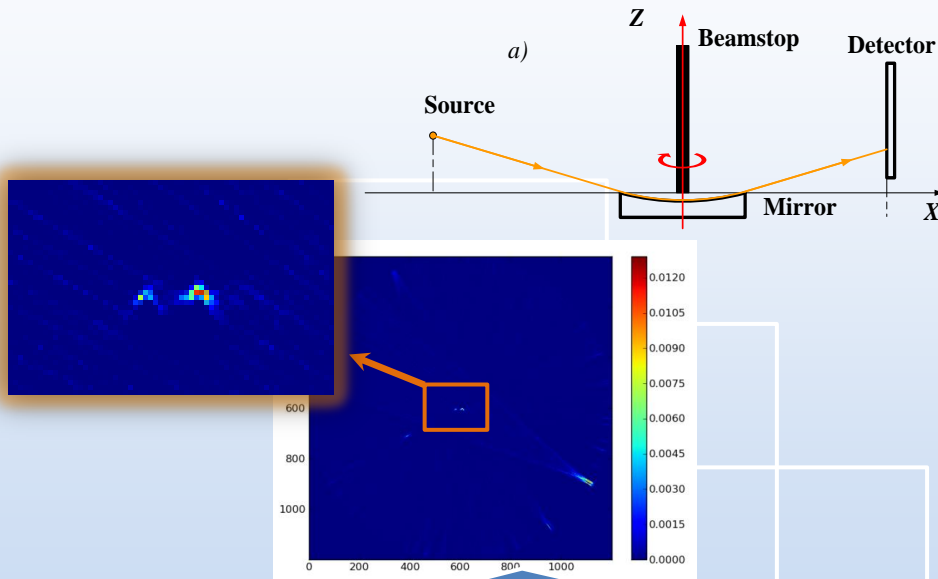


Комплекс PPAT *Mt* с продуктом (dPCoA)

Установлены пространственные структуры данного фермента в комплексах с субстратом (АТФ), продуктом (dPCoA) и ингибитором реакции (CoA) при высоком разрешении. При сравнении полученных структур выявлены конформационные изменения в молекуле фермента, происходящие на каждой из стадий катализируемой реакции, и установлен структурный механизм катализа.



### Рентгеновская микротомография на лабораторных источниках



*Выявленные дефекты обработки  
поверхности зеркала*

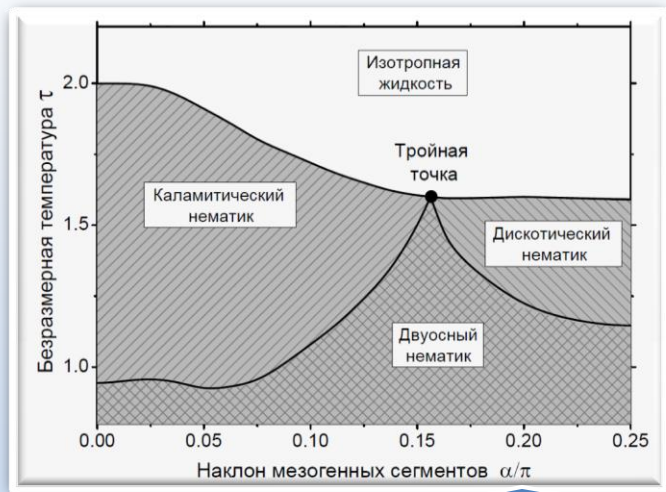
*(Расстояние между дефектами 1222 мкм,  
характерный размер дефекта ~80 мкм)*

Впервые предложен и экспериментально реализован новый подход к исследованию качества вогнутых сферических поверхностей. Данный подход основан на эффекте шепчущей галереи в рентгеновском диапазоне длин волн.

Созданная установка позволяет выявлять поверхностные дефекты с линейными размерами на уровне 50 мкм и более.



### *Молекулярная теория двусного порядка и сегнетоэлектричества в нематических и смектических жидких кристаллах*



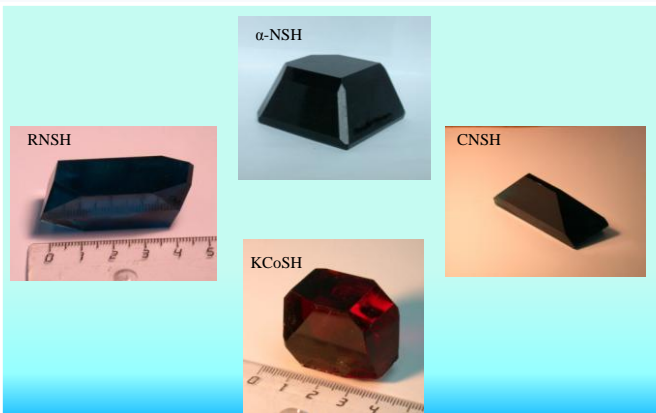
*Фазовая диаграмма жидкого кристалла  
на основе тетраподных молекул*

Разработана теория формирования двусного упорядочения молекул в нематических и смектических фазах жидких кристаллов и возникновения спонтанной поляризации при наличии молекулярной хиральности.

Предложен полный набор параметров порядка для смектической С фазы, в приближении среднего поля рассчитаны их температурные зависимости и объяснены аномалии поляризации, наблюдаемые в ряде перспективных материалов.



### Кристаллы для оптических фильтров УФ-диапазона



Кристаллы для  
изготовления  
оптических фильтров



Прибор бортовой  
обороны



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

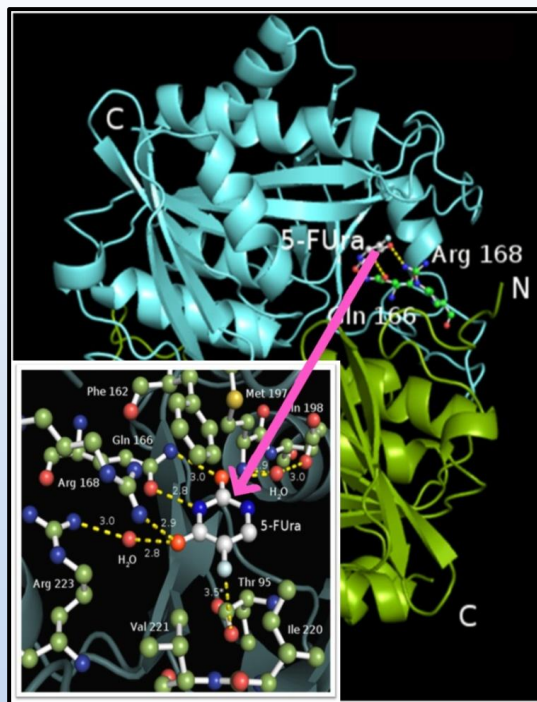
Разработаны технологии выращивания кристаллов  $\alpha$ -NSH, CNSH, KCSH. На их основе созданы два варианта солнечно-слепого объектива, входящего в состав УФ-датчика «Корона», который превосходит известные аналоги по многим параметрам.

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





### *Исследование бактериальной уридинфосфорилазы методами структурной биологии*

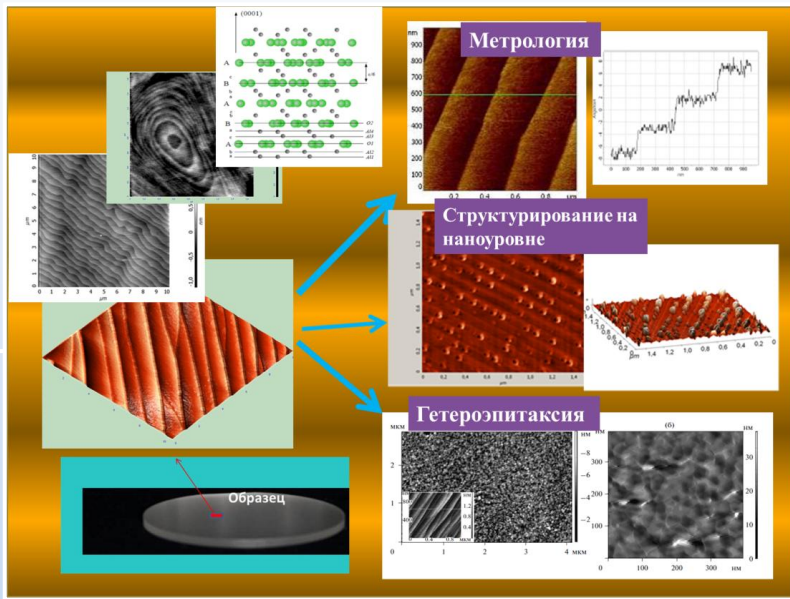


*Общий вид  
гомодимера молекулы  
уридинфосфорилазы и  
ее активный центр*

Изучены макромолекулярные комплексы уридинфосфорилазы клеток человека – фермента, принимающего участие в метаболизме противоопухолевых и антибактериальных препаратов. Впервые для исследования этих макромолекулярных комплексов использована совокупность *in silico* методов. На базе полученных структурных данных проведено рациональное конструирование новых ингибиторов уридинфосфорилаз методом комбинационного скрининга. Определены формулы 8-соединений, имеющие наибольшие константы связывания с бактериальными уридинфосфорилазами.



### *Террасно-ступенчатые наноструктуры на поверхности кристаллов сапфира: рост, характеристика и применение в нанотехнологиях*

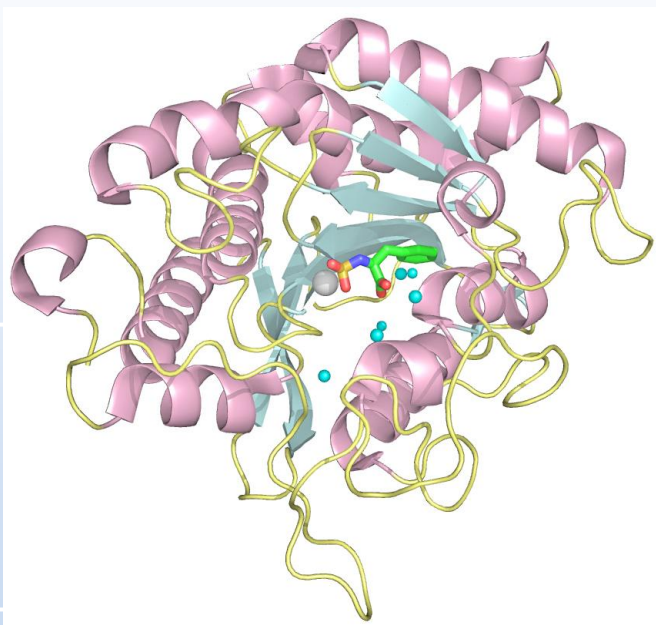


Предложен новый подход к созданию функциональных устройств микроэлектроники с использованием самоорганизующего эффекта нанорельефной поверхности подложки. Разработана и теоретически обоснована технология получения рельефных подложек лейкосапфира с шириной террас  $10 \div 500$  нм и высотой ступеней  $0,22 \div 5$  нм. Запатентован тестовый образец для калибровки атомно-силовых микроскопов.

*Нанорельефные подложки лейкосапфира:  
получение и некоторые применения*



### *Исследование структурных детерминант специфичности карбоксипептидазы T*

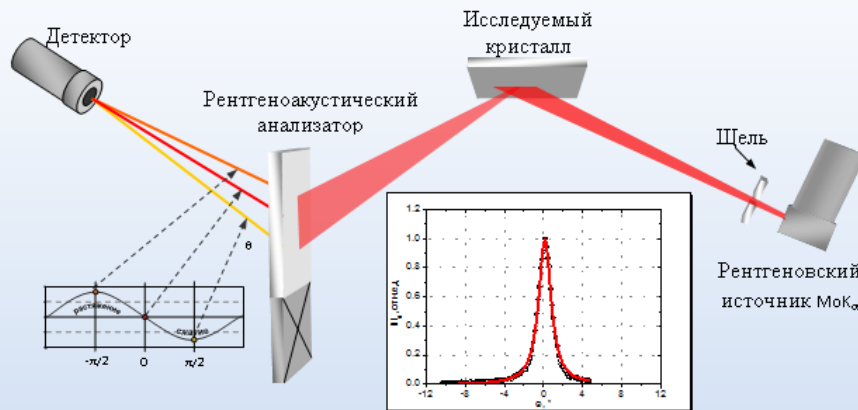


*Молекула металлокарбоксипептидазы T с ионом цинка и связанным лигандом в активном центре*

Изучена структурная обусловленность селективности бактериальной металлокарбоксипептидазы T. Выращены кристаллы и исследовано 11 пространственных структур металлокарбоксипептидазы T и ее мутантных форм в свободном виде и в комплексе с лигандами. Установлена роль ионов кальция как детерминант селективности; в активном центре металлокарбоксипептидазы T идентифицированы новые аминокислотные остатки, существенные для селективности фермента.



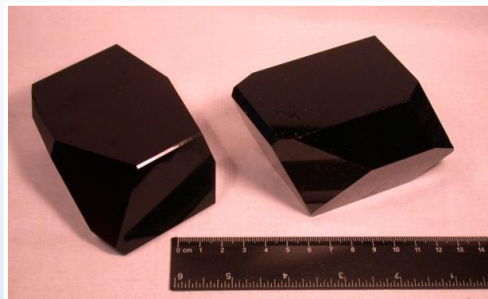
### Прибор для регистрации кривых дифракционного отражения с помощью адаптивной рентгеновской акустооптики



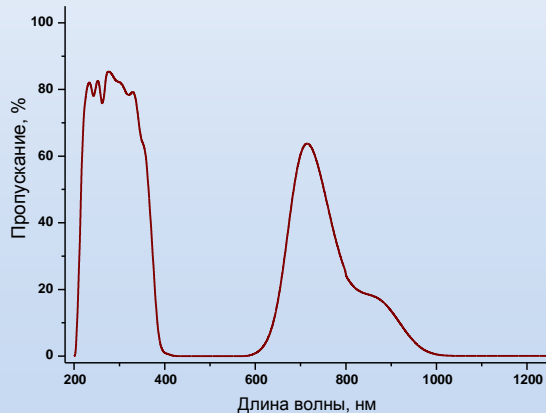
*Впервые в мире предложен и реализован метод измерения кривых дифракционного отражения (КДО) за счет ультразвуковой модуляции параметра решетки одного из элементов рентгенооптической схемы. Данный метод записи был успешно реализован на специально созданном приборе – рентгеноакустическом дифрактометре, основой для которого послужил рентгеновский дифрактометр ТРС разработки ИК РАН.*



### Кристаллы для оптических фильтров УФ-диапазона



*Внешний вид и  
спектральная  
характеристика  
кристаллов  
 $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$  (KCSH)*



Впервые получены крупные кристаллы  $K_2Co(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$  (KCSH) оптического качества и разработана технология их выращивания. С использованием кристаллов KCSH разработана и запатентована конструкция солнечно-слепого объектива для обнаружения ультрафиолетового излучения в солнечно-слепом спектральном диапазоне. Солнечно-слепой объектив, использующий в качестве фильтра кристалл KCSH, вошел в состав УФ детектора, с помощью которого можно эффективно проводить инспекции высоковольтных и распределительных сетей, осуществлять экологический мониторинг, в том числе труднодоступных территорий.





### **Базовая кафедра физики наносистем Физического факультета МГУ**

Зав. каф. чл.-корр. РАН М.В. Ковальчук

21 студент

3 аспиранта

Сотрудники ИК РАН читают лекции студентам кафедры, осуществляют руководство курсовыми и дипломными проектами. В 2012 году 3 студента кафедры ФНС представили свои работы на конкурсе научных работ ИК РАН.

### **Ведущие научные школы ИК РАН**

*«Физика когерентного взаимодействия рентгеновского и синхротронного излучения с веществом; развитие высокоразрешающих фазо-чувствительных рентгеновских методов для структурной диагностики кристаллических и наноразмерных материалов»*

Руководитель – чл.-корр. РАН М.В. Ковальчук

*«От минералов к материалам. Определение атомного строения минералов и синтетических кристаллов. Исследования форм концентрации химических элементов в минералах, кристаллохимии минералообразования и установление структурной обусловленности физических свойств»*

Руководитель – академик РАН Д.Ю. Пушаровский



**Совет молодых ученых ИК РАН организован в 2002 году.**

**Председатели СМУ в 2008 - 2012 гг.:**

- с 2008 по 2009 – Киреев В.В.
- с 2009 по 2011 – Григорьев Ю.В.
- с 2011 по 2013 – Запорожец М.А.
- с 2013 по наст. вр. – Золотов Д.А.

### **Деятельность СМУ**

- участие в организации и проведении общеинститутских мероприятий (лекции и практикумы для молодых сотрудников ИК РАН, молодежные семинары, Высшие курсы стран СНГ 2012 г., научные чтения, защиты курсовых и дипломных работ студентов базовой кафедры, творческие вечера);
- подготовка информации о баллах ПРНД молодых сотрудников ИК РАН;
- обсуждение заявок на различные конкурсы научных работ;
- рассылка информационных сообщений молодым ученым;
- взаимодействие со СМУ РАН.



12 действующих международных соглашений научно-техническом сотрудничестве

**Важнейшие совместные проекты в 2008-2012 гг.:**



Российско-Германская лаборатория на синхротроне BESSY (Германия)



Рентгеновский лазер на свободных электронах XFEL (Германия)



Проект по фото- и электроактивным органическим наносистемам (российско-финский проект)



Российско-германское сотрудничество в области фотонных наук (Photon science) (5 проектов)



Российско-японская космическая программа по кристаллизации белков на МКС



Национальная контактная точка «Нанотехнология» 7-й Рамочной программы ЕС



- **Международный союз кристаллографов (IUCr):**
  - А.С. Авилов – член комиссии по электронной кристаллографии
  - Н.Б. Болотина – член комиссии по аперiodичным структурам
  - В.В. Волков – член комиссии по малоугловому рассеянию
  - В.Р. Самыгина – член комиссии по биологическим макромолекулам
- **Международный союз прикладной и теоретической физики (IUPAP)**
  - А.А. Каминский – председатель комиссии по квантовой электронике (С-17)
- **Международная организация по росту кристаллов (IOCG)**
  - А.Э. Волошин – член Исполкома

### **Сотрудничество в международных периодических научных изданиях:**

**В.Е. Дмитриенко** – со-редактор международного журнала Acta Crystallographica A.

**Н.Б. Болотина** – со-редактор международного журнала Acta Crystallographica B.

### **Членство в международных научных организациях:**

**М.В. Ковальчук** – член Международного Управляющего комитета Европейского лазера на свободных электронах (International Steering Committee, European XFEL), представитель РФ в Совете международной организации ITER по термоядерной энергии, член Американской Ассоциации содействия развитию науки (AAAS).

**Н.А. Киселев** – Почетный член Королевского микроскопического общества.

**С.П. Палто** – член Международного экспертного совета по сегнетоэлектрическим жидким кристаллам.

**И.С. Любутин** – член Международного совета по применениям мессбауэровской спектроскопии (IBAME).

**Т.Р. Волк** – член Европейского координационного комитета по сегнетоэлектрикам.



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова  
Российской академии наук