

Форма сбора сведений, отражающая результаты научной деятельности
организации в период с 2015 по 2017 год,
для экспертного анализа

Организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр "Коми научный центр Уральского
отделения Российской академии наук"
ОГРН: 1021100511332

I. Блок сведений об организации

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
РЕФЕРЕНТНЫЕ ГРУППЫ ОРГАНИЗАЦИИ		
1	Тип организации	Научная организация
2	Направление деятельности организации	3. Общая физика Все дальнейшие сведения указываются исключительно в разрезе выбранного направления.
2.1	Значимость указанного направления деятельности организации	1%.
3	Профиль деятельности организации	I. Генерация знаний
4	Информация о структурных подразделениях организации	Физико-математический институт Коми НЦ УрО РАН

5	Информация о кадровом составе организации	<p>- общее количество работников организации; 2015 г. – 24 2016 г. – 24 2017 г. – 24</p> <p>- общее количество научных работников (исследователей) организации: 2015 г. – 21 2016 г. – 21 2017 г. – 21</p> <p>- количество научных работников (исследователей), работающих по выбранному направлению, указанному в п.2: 2015 г. – 10 2016 г. – 10 2017 г. – 10</p>
6	Показатели, свидетельствующие о лидирующем положении организации	<p>Ведущий научный сотрудник д.ф.-м.н. К.Г. Попов в составе международного проекта занимался изучением сильно-коррелированных Ферми систем (СФС) на базе сформулированной ранее В.Р. Шагиняном и В.А. Ходелем теории фермионного конденсата. Участники проекта объяснили и количественно описали практически все существующие на сегодняшний день эксперименты по изучению СФС. Они сделали ряд прогнозов, многие из которых нашли подтверждение в последующих экспериментах. В 2015 г. в издательстве Springer вышла монография M. Ya. Amusia, K.G. Popov, V.R. Shaginyan, W. Stefanowicz «Theory of Heavy-Fermion Compounds. Theory of Strongly Correlated Fermi-Systems». - Springer Series in Solid-State Sciences. - Heidelberg, New York, Dordrecht, London, 2015. - Vol. 182. - 360 p. в которой описаны все основные низкотемпературные свойства СФС в рамках единой теории.</p> <p>Исследования в области теоретической и экспериментальной физики ведутся также под руководством специалистов мирового уровня – д.ф.-м.н. Пунегова В.И. и д.ф.-м.н. Сивкова В.Н. Эти исследования посвящены неразрушающему контролю материалов микрофизики и наноматериалов с помощью дифракции рентгеновских лучей. Особо отметим, что и теоретики и экспериментаторы являются авторами уникальных методик обработки результатов измерений (теоретическая и вычислительная физики) и подготовки образцов для исследований. Обе группы работают в тесном контакте с</p>

		<p>мировыми физическими центрами, такими как Курчатовский институт, Институт ядерных исследований в Дубне, МФТИ, Институт экспериментальной физики Технического университета, ПИЯФ, Фрайбергской горной академии в Германии, Университеты Монаша и Новой Англии в Австралии, Университет Западной Верджинии США, Национальный автономный университет Мексики, Европейский центр синхротронного излучения. Результаты исследований опубликованы в высокорейтинговых журналах России и мира, сотрудники ФМИ КНЦ докладывали свои результаты на международных конференциях и получали поддержку программ использования дорогостоящего научного оборудования в Европейских научных центрах. При этом, теоретики зачастую обрабатывают результаты измерений иностранных коллег, а экспериментаторы по заказу иностранных коллег готовят образцы для экспериментов.</p> <p>Перспективы физических исследований очевидны в силу природы исследуемых материалов. Отметим, что кроме традиционных исследований материалов для электронного оборудования, в последнее время сотрудники института работают с биологическими материалами. В частности, исследования химического и электронного состава костей ледяных рыб, имеющих малую степень минерализации и пористую структуру, позволит понять процесс развития и лечения остеопороза у людей.</p>
--	--	--

II. Блок сведений о научной деятельности организации
(ориентированный блок экспертов РАН)

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОРГАНИЗАЦИИ		
7	Наиболее значимые научные результаты, полученные в период с 2015 по 2017 год.	1) Проведено численное моделирование распределения интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей от кристаллической среды GaAs с массивом скрытых InAs квантовых точек (КТ) в форме усеченной пирамиды. Угловое распределение диффузного рассеяния от кристалла с пирамидальными КТ зависит от ориентации наноструктур относительно плоскости дифракции. Исследованы поля упругих смещений для случая малой объемной плотности КТ в кристаллической

		<p>матрице. Вычислены соответствующие карты распределения диффузного рассеяния. Рассчитаны двумерные карты упругих деформаций и углового распределение диффузного рассеяния для КТ большой объемной плотности. Проведенные исследования показали, что разработанный метод численного расчета углового распределения диффузного рассеяния может быть использован для неразрушающего количественного рентгенодифракционного анализа полупроводниковых систем с КТ пирамидальной формы.</p> <p>2) Разработан новый подход к задачам динамической дифракции рентгеновских лучей в латеральных кристаллических структурах. Детально исследовано угловое и пространственное распределение волновых полей в Брэгг-Лауэ геометрии. Показано, что данный подход позволяет рассчитывать карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. Для кристаллов разной формы сечения детально исследованы рентгеновские поля в направлении дифракции и прохождения. Выполнено численное моделирование рентгеновской дифракции в кристаллах с разными структурными характеристиками. Показано, что при увеличении латеральной ширины кристалла профили кривых дифракционного отражения приближаются к форме дарвиновской кривой. С увеличением толщины кристалла интенсивности рассеяния стремятся к кривым отражения и прохождения для классического случая Лауэ.</p> <p>3) Рассмотрена общая проблема дифракции пространственно ограниченных рентгеновских пучков, в рамках которой: 1) Впервые динамическая теория рентгеновской дифракции в совершенном кристалле обобщена для анализа углового распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. Разработанный подход позволяет описывать когерентную составляющую интенсивности рассеяния в задачах 2D картографирования рентгеновской дифракции. Показано влияние размеров рентгеновских пучков на формирование углового распределения интенсивностей рассеяния; 2) Впервые в кинематическом приближении разработан детерминированный вариант брэгговского когерентного дифракционного изображения для</p>
--	--	---

		<p>рентгеновского рассеяния от несовершенного кристалла, дефектность которого составляла не более половины объема образца. Этот подход обеспечил уникальную аналитическую реконструкцию структурного фактора объекта и полей смещений из трехмерного дифрагированного распределения интенсивности, сосредоточенного вокруг любого конкретного вектора обратной решетки.</p> <p>4) Теоретически проанализированы недавние измерения намагниченности, дифференциальной магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости одномерного Гейзенберговского антиферромагнетика $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ во внешнем магнитном поле. Проведено изучение термодинамических свойств металла с тяжелыми фермионами $\beta\text{-YbAlB}_4$ на основании недавних измерений, выполненных в присутствии магнитного поля и давления, как управляющих параметров, с целью установления четкого теоретического объяснения наблюдаемых скейлинговых закономерностей и неферми жидкостного поведения, демонстрирующих некоторые неожиданные особенности поведения этой системы. Впервые, было продемонстрировано и дано объяснение скейлинговому поведению константы термоэлектрического эффекта Зеебека S/T для архитипичного металла с тяжелыми фермионами YbRh_2Si_2 как функции магнитного поля B и температуры T.</p> <p>5) Развита методика проведения абсолютных измерений спектральных зависимостей сечений поглощения в области NEXAFS методом TEY с применением СИ. Определены распределения сил осцилляторов рентгеновских переходов в области NEXAFS C 1s-края поглощения ряда наноструктурированных материалов. Показано, что марганец и медь в твердом растворе титаната висмута присутствуют в основном в состоянии окисления +2, а титан - в +4. Обнаружено, что в спектрах Ca2p-спектров NEXAFS зубов и костей <i>S. ginnagii</i> по сравнению с HA наблюдается красное смещение $\approx 0,1$ эВ энергий $2p_{1/2,3/2} \rightarrow 3d$ перехода.</p>
7.1	<p>Подробное описание полученных результатов</p>	<p>1) Наноструктурированные материалы имеют широкий спектр применений в нано- и оптоэлектронике, включая лазеры, солнечные элементы, транзисторы, эмиттеры, инфракрасные</p>

		<p>фотоприемники и т.д. Поэтому основной проблемой остается неразрушающий контроль формы, размеров, упругих деформаций, композиционного состава и пространственного распределения квантовых точек (КТ) на большой площади их размещения в растущих эпитаксиальных слоях. Изначально полупроводниковая оптоэлектроника базировалась исключительно на гетероструктурах с ультратонкими активными слоями (квантовыми ямами), демонстрируя эффекты размерного квантования только в одном направлении. Анализ квантования большей размерности на примере квантовых нитей и квантовых точек первоначально был проведен теоретически, поскольку изготовление структур с КТ оказалось более сложной задачей, чем устройств с квантовыми ямами. Впервые КТ экспериментально наблюдали в InAs/GaAs сверхрешетках с использованием просвечивающей электронной микроскопии. Поскольку кривые дифракционного отражения, регистрируемые с помощью двухкристального дифрактометра, характеризуют полное рентгеновское рассеяние, включая вкуче как когерентную, так и диффузную составляющую, получение данных о наличии КТ, тем более о свойствах наноструктур лишь на основе анализа двухкристальных кривых отражения не представляется возможным.</p> <p>Методы, основанные на дифракции рентгеновских лучей, позволяют получать структурные характеристики, усредненные по всему образцу. Однако эти методы также имеют свои недостатки, самым существенным из которых является то, что в большинстве случаев методы являются непрямыми. Это диктует необходимость выбора адекватной модели, построения сопутствующей теории, на основе которой выполняется численное моделирование или решается обратная задача рентгеновской дифракции. Немаловажным фактором является так называемая фазовая проблема, поскольку детектор в экспериментальной установке фиксирует модуль комплексного коэффициента отражения, а фаза рентгеновской волны при этом теряется. Тем не менее, рентгенодифракционные методы остаются наиболее перспективными, поскольку относятся к неразрушающим методам, являются весьма чувствительными, бесконтактными и экспрессными, позволяющими исследовать весь образец и получать среднестатистические данные о структуре материала.</p>
--	--	---

		<p>Одними из основных элементов рентгеновской оптики являются дифракционные решетки, широко используемые в различных спектроскопических исследованиях в качестве высокоразрешающих узкополосных монохроматоров и энергетических сепараторов. В настоящее время предпринимаются поиски создания новых типов дифракционных решеток. Неожиданное угловое распределение интенсивности рассеяния наблюдали в результате дифракции рентгеновских лучей на кристалле кремния с вольфрамовым поверхностным рельефом. Необычность наблюдаемой дифракционной картины в обратном пространстве заключалась в том, что помимо ожидаемых латеральных сателлитов присутствовали дополнительные вертикальные и диагональные дифракционные порядки. Для объяснения этого явления изначально предложена феноменологическая дифракционная модель, на основе которой выполнено численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния и проведено сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными. Однако формирование сегментальной ромбоидальной структуры рентгеновских полей в объеме кристалла в рамках феноменологической модели являлось лишь предположением. Поэтому предпринята попытка разработке нового подхода к динамической теории рентгеновского рассеяния на кристалле с латеральной периодической модуляцией амплитуды падающей и дифракционной волны.</p> <p>Результаты опубликованы в:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Пунегов В.И. Высокорастворимая рентгеновская дифракция в кристаллических структурах с квантовыми точками // Успехи физических наук, 2015, Т. 185, №5, С.449-478; 2. Пунегов В.И., Сивков Д.В. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей на кристаллических структурах с квантовыми точками пирамидальной формы// Журнал технической физики, 2015, Т. 85, №. 5, С. 148-151; Punegov V.I., Sivkov D.V. Diffuse X-Ray Scattering from Crystalline Structures with Quantum Dots of Pyramidal Shape// Technical Physics, 2015, Vol. 60, No. 5, pp. 778–781) <p>2) Развитие нано- и оптоэлектроники в настоящее время вызвало интерес к дифракции рентгеновских лучей на латеральных кристаллических структурах. Разные методы динамической дифракции в рамках</p>
--	--	---

	<p>уравнений Такаги (Takagi S (1962) Acta Cryst. V. 15 1311) использованы для вычисления кривых дифракционного отражения (КДО) от кристаллов прямоугольного сечения. Кинематическая теория дифракции применялась для описания дифракции в совершенных и деформированных кристаллах произвольного поперечного сечения. Предложенные в настоящее время методы динамической дифракции в латеральном кристалле на основе дифференциальных уравнений являются трудоемкими, требуют больших временных затрат в процессе вычислений и не пригодны для расчетов карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (Reciprocal Space Maps (RSM)). Поэтому более перспективным является направление, основанное на рекуррентных соотношениях динамической дифракции рентгеновских лучей. Такой подход отличается тем, что применим для латеральных структур и позволяет вычислять RSM. Поэтому в рамках исследований впервые получены рекуррентные соотношения для вычисления коэффициентов отражения и прохождения рентгеновских лучей от латеральных кристаллов Брэгг-Лауэ дифракции. Представленные исследования впервые посвящены разработке рекуррентных соотношений для исследования динамической Брэгг-Лауэ дифракции рентгеновских лучей в совершенных и деформированных латеральных кристаллах. Поскольку рассматриваемая задача относится к случаю Брэгг - Лауэ дифракции, возникла необходимость получения рекуррентных соотношений как для дифракционной, так и проходящей рентгеновской волны. Выполнены расчеты интенсивностей проходящих и отраженных рентгеновских полей внутри объема кристалла при различных значениях углов падения и отражения. В случае, когда выполняется условие для Брэгг - дифракции, наблюдается максимальное значение отраженной интенсивности в верхней приповерхностной области кристалла. Максимальное значение проходящей интенсивности слева и сверху кристалла вызвано направлением падающей рентгеновской волны, которая по мере продвижения в кристалле перебрасывается в дифракционный пучок из-за первичной экстинкции.</p> <p>При условии, когда рентгеновское поле вне дифракции по Брэггу, но выполняются условие дифракции по Лауэ, хорошо наблюдаются</p>
--	---

		<p>«искаженные» маятниковые биения внутри кристалла в виде эллипсоидальных контуров равной интенсивности.</p> <p>Результат опубликован в: Punegov V.I., Kolosov S.I., Pavlov K.M. Bragg-Laue X-ray dynamical diffraction on perfect and deformed lateral crystalline structures // J. Appl. Cryst. – 2016. – V. 49. p. 1190-1202. Иллюстрация к результатам работы помещена на обложку журнала).</p> <p>3) Трехкристальная рентгеновская дифрактометрия в последние годы широко используется для исследования различных кристаллических структур и элементов рентгеновской оптики. В основном качественно анализируется диффузное рассеяние рентгеновских лучей на различных дефектах. Вместе с тем экспериментально измеряемая интенсивность содержит как диффузную, так и когерентную составляющую. Однако в количественном анализе карт интенсивностей рассеяния вблизи узла обратной решетки (RSM) для описания когерентной составляющей приходится использовать различные приближения, поскольку в рамках разработанных теорий динамической дифракции используется модель падающей неограниченной плоской волны. В условиях бесконечно широкого фронта падающей рентгеновской волны латеральное угловое распределение интенсивности когерентного рассеяния в обратном пространстве сводится к δ-функции, что делает невозможным визуализацию дифракционной картины вблизи узла обратной решетки.</p> <p>Когерентное рентгеновское дифракционное изображение (КРДИ), создаваемое кристаллическим веществом на основе брэгговских отражений, позволяет решать классические кристаллографические обратные задачи фазового поиска с использованием экспериментальных данных и алгоритмов итерационной реконструкции. КРДИ - это вариант брэгговского рассеяния прямого метода когерентного дифракционного изображения. Для метода прямого рассеяния и брэгговского рассеяния требуется, чтобы длина когерентности падающей рентгеновской волны была больше, чем размер образца. Это условие достигается в современных рентгеновских синхротронных источниках, которые уже способны достичь объема когерентности порядка нескольких микрометров.</p>
--	--	---

		<p>Методы КРДИ были применены в самых разных экспериментальных условиях. Например, они были успешно использованы для исследования динамических наномасштабных процессов для визуализации в трех измерениях, для изучения дислокаций в кристалле при росте и растворении и т.д. Следует также отметить, что КРДИ применялось для представления трехмерного изображения морфологии и деформаций в монокристаллическом нанокубе в среде высокого давления, для определения плотности дефектов упаковки в нанопроводах, для изучения неравномерной релаксации деформаций в наноструктурах.</p> <p>Рассмотрена динамическая дифракция в кристалле, на поверхность которого под углом, близком к углу Брэгга, падает рентгеновская волна с плоским фронтом и поперечным сечением волнового фронта, формируемого щелью для падающего излучения и отраженного пучка. Рассмотрение выполнено в приближении геометрической оптики, в рамках которой дифракцией рентгеновских лучей на краях щелей падающего и отраженного пучков следует пренебречь.</p> <p>Исследована дифракция рентгеновских лучей на 3D кристалле кубической симметрии с постоянной решетки d и имеющую форму параллелепипеда с соответствующими размерами L_x, L_y и L_z.</p> <p>Рассмотрена двулучевая дифракция в копланарной геометрии, где плоскость XOY является верхней поверхностью кристалла.</p> <p>Результаты опубликованы в:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Punegov V.I., Pavlov K.M., Karpov A.V., Faleev N.N. Applications of dynamical theory of X-ray diffraction by perfect crystals to reciprocal space mapping // J. Appl. Cryst. – 2017. – V. 50. – p. 1256-1266.; 2. Pavlov K. M., Punegov V.I., Morgan K.S., Schmalz G., Paganin D. M. Deterministic Bragg Coherent Diffraction Imaging // Scientific Reports. – 2017. – V.7. – P. 1132 (1-15)). <p>4) Актуальность изучения сильно коррелированных ферми-систем (СКФС), испытывающих топологический ферми-конденсатный квантовый фазовый переход, определяющий их экзотические свойства, подтверждена присуждением Нобелевской премии по физике 2016 года за успехи в области непосредственно, примыкающей к нашим исследованиям.</p>
--	--	--

		<p>Признанием достижений Группы по развитию теории фермионного конденсата (ТФК) и успехов этой теории является включение в этом году статьи основоположников ТФК (V. A. Khodel and V. R. Shaginyan, Superfluidity in system with fermion condensate JETP Lett. 51 , 553 (1990)), в «Золотой архив» журнала Письма в ЖЭТФ.</p> <p>Сильно коррелированные ферми-системы относятся к числу наиболее интересных фундаментальных систем природы, изучаемых физикой. Основными классами таких систем являются металлы с тяжелыми фермионами (ТФ), высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП), квазидвумерные ферми-структуры, квантовые спиновые жидкости (КСЖ), квазикристаллы (КК) и др. Они обнаруживают огромное разнообразие физических свойств. Свойства этих материалов принципиально отличаются от свойств обычных ферми-систем. Например, в случае металлов с тяжелыми фермионами сильная корреляция электронов приводит к перенормировке эффективной массы квазичастиц, которая может превысить голую массу электрона на несколько порядков или даже стать неограниченно большой. При этом эффективная масса демонстрирует сильную зависимость от температуры, давления или приложенного магнитного поля. Эти металлы имеют аномальное поведение и необычные степенные законы температурной зависимости своих термодинамических и транспортных характеристик при низких температурах. Такое их поведение принято определять как поведение аномальной ферми-жидкости Ландау или не-ферми жидкостное (НФЖ) поведение.</p> <p>Накоплен большой экспериментальный материал, демонстрирующий экзотические свойства этих систем. Можно утверждать, что системы, о которых идет речь, в недалеком будущем найдут применение в создании новых материалов для крионики, редкоземельных магнитов, прикладной сверхпроводимости. СКФС, однако, демонстрируют значительное сопротивление попыткам их теоретического описания.</p> <p>Неспособность теории ферми-жидкости Ландау объяснить экспериментальные наблюдения, связанные с зависимостью эффективной массы M^* от температуры T, магнитного поля B, давления и т.д., привело к заключению, что квазичастицы не выживают в сильно коррелированных ферми-системах, и тяжелый электрон не сохраняет своей</p>
--	--	---

		<p>целостности как возбуждение-квазичастица.</p> <p>Теории, базирующиеся на концепции Кондо решетки и использующие квантовые и термические флуктуации в критической точке, соответствующей квантовому фазовому переходу второго рода, имеют узкую сферу применимости и не объясняют всего многообразия явлений в аномальных ферми-жидкостях.</p> <p>Такое кризисное состояние теории было вполне преодолено в результате развития теории ферми конденсатного квантового фазового перехода (ФККФП) в 90-е годы прошлого века в работах В.А. Ходеля и В.Р. Шагиняна. Развитие этой теории, включающее расширенную парадигму квазичастиц, которая допускает сильную зависимость эффективной массы от температуры, магнитного поля и других параметров системы, дало возможность приступить к описанию сильнокоррелированных ферми-систем.</p> <p>Были проанализированы измерения намагниченности, дифференциальной магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости квазиодномерного изолятора $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ - (CuPzN) в магнитном поле. Было показано, что термодинамические свойства системы полностью определяются квантовой спиновой жидкостью, сформированной из спинов. Магнитное поле помещает изолятор CuPzN к квантовую критическую точку ферми конденсатного квантового перехода (ФККФП), в которой эффективная масса спинов расходится кинематическим образом. Было показано, что концепция ФККФП позволяет получить и объяснить скейлинговое поведение термодинамических свойств. Впервые, была построена схематическая T-H (температура---магнитное поле) фазовая диаграмма CuPzN, содержащая жидкость Ферми-Ландау, переходную область и неферми жидкостную часть, аналогичные тем, что наблюдаются в соединениях с тяжелыми фермионами.</p> <p>Были проанализированы недавние измерения намагниченности, дифференциальной магнитной восприимчивости и удельной теплоемкости квазиодномерного Гейзенберговского антиферромагнетика $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ — (CuPzN) во внешнем магнитном поле. Используя соответствие между магнонами (бозоны) в CuPzN и фермионами, было показано, что магнитное поле помещает изолятор в квантовую критическую точку, связанную с ферми конденсатным квантовым</p>
--	--	---

		<p>фазовым переходом (ФККФП), в котором получающаяся эффективная масса квазичастиц расходуется кинематическим образом. Было показано, что концепция ФККФП позволяет объяснить скейлинговое поведение термодинамических характеристик, количественно описать результаты экспериментов и впервые построить Т-В (температура-магнитное поле) фазовую диаграмму системы, которая содержит Ландау-Ферми жидкость, неферми жидкостную часть и кроссовер между ними, аналогичные тем, что наблюдаются в соединениях с тяжелыми фермионами.</p> <p>Проведено изучение термодинамических свойств металла с тяжелыми фермионами β-YbAlB₄ на основании недавних очень информативных измерений, выполненных в присутствии магнитного поля и давления, как управляющих параметров, с целью установления четкого теоретического объяснения наблюдаемых скейлинговых закономерностей и неферми жидкостного поведения (НФЖ), демонстрирующих некоторые неожиданные особенности. Прежде всего, робастность НФЖ поведения термодинамических свойств и аномальной температурной зависимости $T^{3/2}$ электрической проводимости при наложении давления в нулевом магнитном поле, в противоположность с поведением НФЖ фазы во внешнем магнитном поле. Было показано, что последовательное топологическое обоснование для набора экспериментальных наблюдений, а также эмпирических скейлинговых законов, может быть найдено в рамках теории фермионной конденсации в появлении и разрушении «плоской зоны».</p> <p>Схематические Т-В (температура-магнитное поле) и Т-Р (температура-давление) фазовые диаграммы представлены для иллюстрации предложенного сценария.</p> <p>Впервые, было продемонстрировано и дано объяснение скейлинговому поведению константы термоэлектрического эффекта Зеебека S/T для архитипичного металла с тяжелыми фермионами (ТФ) YbRh₂Si₂ как функции магнитного поля В и температуры Т. Было показано, что точно такой-же скейлинг демонстрируют такие различные тяжело фермионные соединения, как β-YbAlB₄ и сильно коррелированная слоистая окись кобальта [BiBa_{0.66}K_{0.36}O₂]CoO₂. Используя YbRh₂Si₂ как пример, мы демонстрируем что скейлинговое поведение S/T исчезает в антиферромагнитной</p>
--	--	--

		<p>фазовом переходе, в то время как оба: остаточное удельное сопротивление ρ_0 и плотность состояний N скачок при этом фазовом переходе, заставляя коэффициент Зеебека испытывать два скачка и изменять. Наше разъяснение основано на появлении плоского участка в одночастичном спектре энергий квазичастиц, который определяет поведение ρ_0 и N. Для иллюстрации основных особенностей поведения S/T, была построена T-B схематическая фазовая диаграмма YbRh_2Si_2. Наши вычисления S/T для тяжело фермионных соединений находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.</p> <p>Результаты опубликованы в:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. V.R. Shaginyan, V.A. Stephanovich, K.G. Popov, E.V. Kirichenko, Quasi-one-dimensional quantum spin liquid in the $\text{Cu}(\text{C}_{4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ insulator, JETP. Lett. 103, 32-37 (2016) 2. V. R. Shaginyan, V. A. Stephanovich, K. G. Popov, E. V. Kirichenko, S. A. Artamonov, Magnetic quantum criticality in quasi-one-dimensional Heisenberg antiferromagnet $\text{Cu}(\text{C}_{4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$, Ann. Phys. (Berlin), v.528, N6, pp. 483 — 492, (2016). 3. V.R. Shaginyan, A.Z. Msezane, K.G. Popov, J.W. Clark, V.A. Khodel, M.V. Zverev, Topological basis for understanding the extraordinary behavior of the heavy-fermion metal $\beta\text{-YbAlB}_4$ under application of magnetic field and pressure, Phys.Rev. B, 93, 205126 (2016) 4. V. R. Shaginyan, A. Z. Msezane, G. S. Japaridze, K. G. Popov, J. W. Clark, V. A. Khodel, Scaling behavior of the thermopower of the archetypical heavy-fermion metal YbRh_2Si_2, Front. in Phys., 11(2), 117102, (2016). <p>5) В настоящее время, благодаря появлению мощных синхротронных источников рентгеновского излучения и спектральной аппаратуры высокого разрешения, широкое применение для исследования наноструктурных неорганических и органических материалов получили методы ультрамягкой рентгеновской (УМР) абсорбционной спектроскопии. При этом особый интерес представляют исследования резонансной структуры, доминирующей в области NEXAFS внутренних оболочек атомов, в виде интенсивных полос поглощения с высокой силой осциллятора, которая содержит уникальную информацию об энергии, составе и симметрии свободных состояний. Источником такой информации служат спектральные зависимости сечения поглощения (СП) в области NEXAFS и определяемые из них</p>
--	--	---

		<p>распределения сил осцилляторов (СО) рентгеновских переходов, которые являются фундаментальными параметрами, характеризующими процесс взаимодействия рентгеновского излучения с веществом. За редким исключением, образцы наноструктурных материалов невозможно приготовить в виде тонких пленок и слоев на подложках пригодных для исследования методом пропускания, поэтому для измерений необходимо использовать метод квантового выхода внешнего рентгеновского фотоэффекта, который может быть реализован путем регистрации полного электронного выхода (total electron yield, TEY). В настоящее время этот метод повсеместно используется при NEXAFS-исследованиях вещества на синхротронных источниках излучения. Экспериментальные данные по распределению сил осцилляторов в области NEXAFS востребованы при изучении вещества методами резонансной рентгеновской рефлектометрии, флуоресценции, фотоэлектронной спектроскопии и фотоэмиссии, а также необходимы для расчета дисперсии коэффициентов преломления материалов в области резонансного фотопоглощения. Поэтому развитие экспериментального подхода для получения достоверной информации по распределению сил осцилляторов в области NEXAFS внутренних уровней атомов, входящих в состав наноструктурированных материалов, основанного на методе TEY с использованием синхротронного излучения (СИ), является важной и актуальной задачей.</p> <p>Развита методика проведения абсолютных измерений спектральных зависимостей сечений поглощения в области NEXAFS методом TEY с применением СИ, которая предназначена для изучения широкого круга углеродных наноструктурированных сред и органических соединений.</p> <p>Измерены спектральные зависимости сечений поглощения и определены распределения сил осцилляторов рентгеновских переходов в области NEXAFS C 1s-края поглощения наноструктурированных материалов (НОРГ, MWCNT/(пиролитический Мо), фуллерит C60). Проведены рентгеновские и синхротронные исследования методом дифракция рентгеновских лучей и NEXAS- и XPS-спектроскопии термостабильных твердых растворов титаната</p>
--	--	--

		<p>висмута с структурой пироклора, допированных атомами 3d – металлов Mn, Cu . Было показано, что марганец и медь в указанном твердом растворе титаната висмута присутствуют в основном в состоянии окисления +2, а титан - в +4.</p> <p>Методами NEXAFS-спектроскопии были исследованы твердые ткани ледяной рыбы <i>Champsoccephalus gunnari</i>: отолиты, чешуя, зубы, кости скелета и чистого гидроксиапатита. Тонкая структура C1s -спектров поглощения твердых тканей ледяной рыбы указывают на то, что отолиты содержат анион [CO₃]²⁻. NEXAFS P2p-спектров четко показывают на отсутствие атомов фосфора только в образцах отолитов и чешуи. При этом NEXAFS P2p-спектров костей и зубов ледяной рыбы оказываются идентичными NEXAFS P2p-спектров гидроксиапатита. В NEXAFS Ca2p спектров жестких тканей ледяной рыбы также показаны особенности, которые хорошо согласуются с спектрами HA. Обнаружено, что в спектрах Ca2p-спектров NEXAFS зубов и костей <i>C. gunnari</i> по сравнению с HA наблюдается красное смещение $\approx 0,1$ эВ энергий $2p_{1/2,3/2} \rightarrow 3d$ перехода.</p> <p>Результаты опубликованы в:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Petrova, O.V. NEXAFS studies of Ice Fish Hard Tissues and hydroxyapatite / O.V. Petrova, S.V. Nekipelov, D.V. Sivkov, A.E. Mingaleva, V.N. Sivkov, A. Nikolaev, V.V. Bazhenov, O.V. Frank-Kamenetskaya, D.V. Vyalikh, S.L. Molodtsov, H. Ehrlich // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V.917. – P. 042001. 2. Shomysov, N.N. The x-ray study of 3d-metal doped bismuth titanates with a pyrochlore-type structure / N.N. Shomysov, M.S. Koroleva, A.E. Mingaleva, S.V. Nekipelov, O.V. Petrova, I.V. Piir, E.N. Shustova, V.N. Sivkov // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V.917. – P. 062057. <p>Все полученные результаты являются новыми и соответствуют мировому уровню исследований.</p>
8	<p>Диссертационные работы сотрудников организации, защищенные в период с 2015 по 2017 год.</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Теория дифракции рентгеновских лучей на латеральных структурах, Колосов Сергей Иванович, к.ф.-м.н., 2015 2. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах с квантовыми точками, Сивков Данил Викторович, к.ф.-м.н., 2015 3. Измерение топологических сечений в pp-взаимодействиях в области большой

		множественности при 50 ГэВ на установке СВД-2, Кутов Андрей Яковлевич, к.ф.-м.н., 2016
ИНТЕГРАЦИЯ В МИРОВОЕ НАУЧНОЕ СООБЩЕСТВО		
9	Участие в крупных международных консорциумах и международных исследовательских сетях в период с 2015 по 2017 год	
10	Наличие зарубежных грантов, международных исследовательских программ или проектов в период с 2015 по 2017 год.	<p>1. Грант Русско-Немецкого междисциплинарного научного центра, German-Russian Interdisciplinary Science Center (G-RISC). Фонд: G-RISC Страна: Германия Партнер: Горная Академия Фрайберга, г. Фрайберг Название: X-ray and synchrotron studies of selected natural biopolymers and their chemical modifications, B-2017b-8 (Рентгеновские и синхротронные исследования биополимеров и их химических модификаций) Период реализации: 10.08.2017 – 15.09.2017 Объем финансирования: 1025 Eur (72000 руб.)</p> <p>2. Грант для проведения исследований на Источнике синхротронного излучения BESSY II. Фонд: HZB (Helmholtz-Zentrum Berlin) Страна: Германия Партнер: Берлинский центр материалов и энергии имени Гельмгольца (Helmholtz-Zentrum Berlin, HZB) Название: NEXAFS and XPS studies of the 3d-metal-doped bismuth titanate and bismuth niobate., 171-05259-ST (NEXAFS и XPS исследования ниобатов и титанатов висмута допированных атомами 3d-переходных металлов) Период реализации: 21.08.2017 – 27.08.2017 Объем финансирования: 600 Eur (42000 руб.)</p>
11	Участие в качестве организатора крупных научных мероприятий (с более чем 1000 участников), прошедших в период с 2015 по 2017 год	
12	Членство сотрудников организации в признанных	

	международных академиях, обществах и профессиональных научных сообществах в период с 2015 по 2017 год	
ЭКСПЕРТНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ОРГАНИЗАЦИИ		
13	Участие сотрудников организации в экспертных сообществах в период с 2015 по 2017 год	д.ф.-м.н. Сивков Виктор Николаевич - Эксперт РФФИ
14	Подготовка нормативно-технических документов международного, межгосударственного и национального значения, в том числе стандартов, норм, правил, технических регламентов и иных регулирующих документов, утвержденных федеральными органами исполнительной власти, международными и межгосударственными органами в период с 2015 по 2017 год	
ЗНАЧИМОСТЬ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ		
15	Значимость деятельности организации для социально-экономического развития соответствующего региона в период с 2015 по 2017 год	
ИННОВАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ОРГАНИЗАЦИИ		
16	Инновационная деятельность организации в период с 2015 по 2017 год	

III. Блок сведений об инфраструктурном и внедренческом потенциале
организации, партнерах, доходах от внедренческой и договорной
деятельности
(ориентированный блок внешних экспертов)

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
ИНФРАСТРУКТУРА ОРГАНИЗАЦИИ		
17	Научно-исследовательская инфраструктура организации в период с 2015 по 2017 год	<p>В Физико-математическом институте установлено следующее научное оборудование:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Два вычислительных кластера с суммарной пиковой мощностью не более 500 Гфлопс. В указанный период на кластерах решались следующие научные задачи: обратные задачи рентгеноструктурного анализа, реконструкция и моделирование событий в вершинном детекторе и магнитном спектрометре в установке СВД-2; 2. Рентгеновский спектрометр-монокроматор РСМ-500; 3. Универсальный вакуумный пост для термического напыления УВП.
18	Показатели деятельности организаций по хранению и приумножению предметной базы научных исследований в период с 2015 по 2017 год	
ДОЛГОСРОЧНЫЕ ПАРТНЕРЫ ОРГАНИЗАЦИИ		
19	Стратегическое развитие организации в период с 2015 по 2017 год.	<p>Все научно-исследовательские работы в 2015-2017 гг. проводились в соответствии с Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (далее Программа), основными направлениями фундаментальных исследований РАН и основными научными направлениями Отдела математики (с апреля 2017 г. Физико-математического института). Деятельность Отдела (Института) осуществлялась на основании утвержденного Государственного задания и плана НИР на 2015-2017 гг. Научные исследования велись в рамках плановой темы «Теоретические и экспериментальные исследования рентгеновской оптики композиционных материалов и сильнокоррелированных ферми-систем» (номер гос. регистрации 115021210055, номер в гос. задании 0412-2014-0019) и инициативного проекта № 15-9-1-13 (номер в гос. задании 0412-2015-0008) «Высокоразрешающая дифракционная и спектральная диагностика наноструктурированных материалов с использованием рентгеновского и</p>

		синхротронного излучения» по направлению 8 Программы: «Актуальные проблемы физики конденсированных сред, в том числе квантовой макрофизики, мезоскопии, физики наноструктур, спинтроники, сверхпроводимости».
РИД И ПУБЛИКАЦИИ ОРГАНИЗАЦИИ		
20	Количество созданных результатов интеллектуальной деятельности, имеющих государственную регистрацию и (или) правовую охрану в Российской Федерации или за ее пределами, а также количество выпущенной конструкторской и технологической документации в период с 2015 по 2017 год, ед.	2015 г. – 0 2016 г. – 0 2017 г. – 0
21	Объем доходов от использования результатов интеллектуальной деятельности в период с 2015 по 2017 год, тыс. руб.	2015 г. – 0.000 2016 г. – 0.000 2017 г. – 0.000
22	Совокупный доход малых инновационных предприятий в период с 2015 по 2017 год, тыс. руб.	2015 г. – 0.000 2016 г. – 0.000 2017 г. – 0.000
23	Число опубликованных произведений и публикаций, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования в период с 2015 по 2017 год, ед.	2015 г. – 11 2016 г. – 8 2017 г. – 7
ПРИВЛЕЧЕННОЕ ФИНАНСИРОВАНИЕ		
24	Гранты на проведение исследований Российского фонда фундаментальных исследований,	8 грантов: 1) Грант РФФИ Руководитель: Сивков Д.В.

	<p>Российского научного фонда и др. источников в период с 2015 по 2017 год.</p>	<p>Название: Влияние формы самоорганизованных квантовых точек и упругих деформаций среды на диффузное рассеяние рентгеновских лучей от полупроводниковых гетероструктур, № 14-02-31778 мол_a Период реализации: 2014-205 гг. Объем финансирования: 800 тыс. руб.(400 тыс. руб. в год).</p> <p>2) Грант РФФИ Руководитель: Петрова О.В. Название: Рентгеновские и синхротронные исследования биологических организмов – экстремофилов, 16-32-00441 мол_a Период реализации: 2016-2017 Объем финансирования: 2016 - 450000 руб., 2017 - 450000 руб.</p> <p>3) Грант РФФИ Руководитель: Некипелов С.В. Название: Рентгеновские и синхротронные исследования твердых растворов допированных титанатов и ниобатов висмута, 16-42-110610 р_a Период реализации: 2016-2018 Объем финансирования: 2016 – 106000 руб., 2017 – 121550 руб., 2018 - 121550 руб.</p> <p>4) Грант РФФИ Руководитель: Сивков В.Н. Название: Развитие методов рентгеновской диагностики наноразмерных материалов, 16-43-110350 р_a Период реализации: 2016-2018 Объем финансирования: 2016 – 106000 руб., 2017 – 121550 руб., 2018 - 121550 руб.</p> <p>5) Грант РФФИ Руководитель: Пунегов В.И. Название: Количественный рентгенодифракционный анализ структурированных сред, № 13-02-00272 А Период реализации: 2013-2015 Объем финансирования: 2013 - 400000, 2014 -450000, 2015 - 560000 руб.</p> <p>6) Грант РФФИ Руководитель: Пунегов В.И. Название: Прямые и обратные задачи дифракции на основе картографирования пространственно ограниченных рентгеновских пучков, №17-02-00090</p>
--	---	---

		<p>А</p> <p>Период реализации: 2017-2019 Объем финансирования: 2017 - 700000, 2018 - 700000, 2019 - 700000 руб.</p> <p>7) Грант Русско-Немецкого междисциплинарного научного центра, German-Russian Interdisciplinary Science Center (G-RISC). Фонд: G-RISC Страна: Германия Партнер: Горная Академия Фрайберга, г. Фрайберг Название: X-ray and synchrotron studies of selected natural biopolymers and their chemical modifications, В-2017b-8 (Рентгеновские и синхротронные исследования биополимеров и их химических модификаций) Период реализации: 10.08.2017 – 15.09.2017 Объем финансирования: 1025 Eur (72000 руб.)</p> <p>8) Грант для проведения исследований на Источнике синхротронного излучения BESSY II. Фонд: HZB (Helmholtz-Zentrum Berlin) Страна: Германия Партнер: Берлинский центр материалов и энергии имени Гельмгольца (Helmholtz-Zentrum Berlin, HZB) Название: NEXAFS and XPS studies of the 3d-metal-doped bismuth titanate and bismuth niobate., 171-05259-ST (NEXAFS и XPS исследования ниобатов и титанатов висмута допированных атомами 3d-переходных металлов) Период реализации: 21.08.2017 – 27.08.2017 Объем финансирования: 600 Eur (42000 руб.)</p>
25	Перечень наиболее значимых научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ и услуг, выполненных по договорам (в том числе по госконтрактам с привлечением бизнес-партнеров) в период с 2015 по 2017 год	
26	Доля внебюджетного финансирования в общем финансировании организации в период с 2015 по 2017 год,	0.09000

26.1	Объем выполненных работ, оказанных услуг (исследования и разработки, научно-технические услуги, доходы от использования результатов интеллектуальной деятельности), тыс. руб.	2015 г. – 0.000 2016 г. – 0.000 2017 г. – 0.000
26.2	Объем доходов от конкурсного финансирования, тыс. руб.	2015 г. – 960.000 2016 г. – 662.000 2017 г. – 1393.100
УЧАСТИЕ ОРГАНИЗАЦИИ В ЗНАЧИМЫХ ПРОГРАММАХ И ПРОЕКТАХ		
27	Участие организации в федеральных научно-технических программах, комплексных научно-технических программах и проектах полного инновационного цикла в период с 2015 по 2017 год.	
ВНЕДРЕНЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ОРГАНИЗАЦИИ		
28	Наличие современной технологической инфраструктуры для прикладных исследований в период с 2015 по 2017 год.	
29	Перечень наиболее значимых разработок организации, которые были внедрены в период с 2015 по 2017 год	
30	Участие организации в разработке и производстве продукции двойного назначения (не составляющих государственную тайну) в период с 2015 по 2017 год	

IV. Блок дополнительных сведений

ДРУГИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ОРГАНИЗАЦИИ	
31	Любые дополнительные сведения организации о своей деятельности в период с 2015 по 2017 год

Руководитель
организации

ВРИО директора

(должность)



(личная подпись)

В.В. Володин

(расшифровка
подписи)