

Краткая информация о проекте

Наименование	ИРН АР14971722 «Дефектная структура функциональных кристаллических материалов: рентгеновские и нейтронные дифракционные исследования»
Актуальность	<p>Реальная структура кристалла – нарушение идеального дальнего порядка из-за наличия разного типа дефектов – влияет практически на все основные физические свойства кристаллических материалов, а зачастую их определяет. Среди методов исследований дефектной структуры кристаллических материалов дифракция коротковолнового излучения (рентгеновских лучей и нейтронов) является одним из наиболее информативных. В ОИЯИ (Дубна) на импульсном реакторе ИБР-2 развит новый метод дифракции нейтронов (Фурье-дифрактометрия), сочетающий возможности режимов высокого разрешения и высокой светосилы. Их параллельное использование на дифрактометре ФДВР (Фурье дифрактометр высокого разрешения) позволяет получать данные о структуре и микроструктуре кристаллов непосредственно в ходе внешнего воздействия на кристалл или при смене внешних условий <i>in situ</i> и в реальном времени. Кроме того, в отличие от просвечивающей электронной микроскопии и дифракции рентгеновских лучей, дифракция нейтронов позволяет получить объемные данные, что дает возможность избежать влияния локальных неоднородностей состава и поверхностных эффектов. В проекте методом дифракции нейтронов будет получена новая информация о реальной кристаллической структуре нескольких типов функциональных материалов (сплавов на основе железа с большим коэффициентом внутреннего трения и гигантской магнитострикцией). Кроме того, будут определены ее изменения в ходе структурных фазовых переходов в зависимости от внешних условий. Эти результаты необходимы для решения некоторых физических проблем функциональных интерметаллических сплавов. В равной степени эти результаты будут востребованы материаловедами, использующими функциональные сплавы на основе железа для практических приложений.</p>
Цель	Целью настоящего проекта являются развитие методологии нейтронных дифракционных исследований реальных кристаллических материалов с дефектной структурой и получение с ее помощью новых данных о влиянии реальной структуры на физические и физико-химические свойства материалов.

Задачи

Основным экспериментальным методом определения характеристик микроструктурного состояния кристаллических материалов является брэгговская дифракция рентгеновских лучей или синхротронного излучения. В частности, в дифракционном эксперименте параллельно со структурными данными может быть получена информация о микронапряжениях в кристаллитах и характерных размерах областей когерентного рассеяния. Однако объемные функциональные материалы, как правило, состоят из довольно крупных кристаллитов и могут быть сильно текстурированы. Эти обстоятельства делают структурный анализ в случае рентгеновского или синхротронного излучения с их узкими пучками, когда облучаемый объем содержит не очень большое число кристаллитов, практически невозможным. Эти трудности в значительной степени нивелируются, если используется дифракция нейтронов. Проникающая способность нейтронов на порядки больше, чем у рентгеновских лучей и электронов, а поперечное сечение нейтронного пучка составляет не менее 1 см^2 . В результате, в нейтронном эксперименте регистрируется именно “объемная” информация, практически не искаженная локальными флуктуациями состава и поверхностными эффектами. Дифракция нейтронов пока сравнительно редко используется для определения характеристик микроструктурного состояния кристаллических материалов, поскольку для этого необходимо иметь очень высокий уровень разрешающей способности дифрактометра. Кроме того, для изучения фазовых переходов в режиме реального времени требуется иметь и очень высокий уровень светосилы дифрактометра. Оба эти условия выполняются на нейтронном дифрактометре ФДВР (High-Resolution Fourier Diffractometer), действующий на импульсном реакторе ИБР-2 в ОИЯИ (Дубна). Рекордно высокое разрешение по межплоскостному расстоянию ($\Delta d/d \approx 0.001$) на ФДВР обеспечивается использованием быстрого фурье-прерывателя и корреляционного метода набора дифракционных данных. Отключение корреляционного анализа переводит ФДВР в режим высокой светосилы, для которого высокий поток нейтронов ($\sim 10^7 \text{ н/см}^2/\text{с}$) и достаточно большой телесный угол детекторной системы ($\Omega_d \sim 0.2 \text{ ср}$) дают возможность использовать времена накопления данных $t_s = 1$ минута и меньше.

В рамках проекта будут проведены исследования изменений атомной структуры и микроструктуры сплавов на основе железа (Fe-Ga, Fe-Al и др.), которые отличаются необычными физическими свойствами. В частности, состав Fe-27Ga

	<p>известен своей рекордной магнитострикцией по сравнению с другими двойными сплавами на основе железа (около 400 ppm) [1], соответственно анализ фазовой диаграммы и свойств Fe-Ga сплавов активно ведется самыми разнообразными методами (обзор [2] и ссылки в нем). Рентгеновская дифракция будет использована для предварительной характеристики образцов. Нейтронные дифракционные эксперименты будут выполнены в ОИЯИ на дифрактометре ФДВР в широком диапазоне температур (20-900°C). Нагрев образцов будет осуществляться в специализированной высокотемпературной печи (стандарт ILL) с линейным повышением температуры или с изотермическим отжигом при некоторых фиксированных температурах.</p> <p>Комбинация дифракции нейтронов в реальном времени в режиме <i>in-situ</i> при непрерывном сканировании по температуре и измерения дифракционных спектров высокого разрешения при некоторых фиксированных температурах позволят получить уникальные данные, необходимые для понимания связи структуры и микроструктуры сплавов с их важнейшими технологическими свойствами (пластичностью, магнитострикцией, внутренним трением и др).</p>
<p>Ожидаемые и достигнутые результаты</p>	<p>Проект нацелен на получение информации о функциональных сплавах, которая имеет фундаментальное значение как для теории упорядочивающихся сплавов, так и для построения моделей взаимодействия микроструктуры и физических характеристик материалов. В то же время, эти данные будут важны для материаловедов, прежде всего, для построения реальных фазовых диаграмм состояния. Фундаментальность результатов обеспечит возможность их публикации в международных научных журналах. Предполагается, что по результатам экспериментов будет возможность опубликовать две статьи в журналах уровня <i>J. Alloys and Compounds</i>.</p> <p>По результатам первого года выполнения проекта опубликование книг или глав в книгах, а также патентования результатов не предполагается.</p> <p>Научный эффект выполнения проекта будет состоять в получении абсолютно новой научной информации. Экономический эффект возможен, но для этого должно пройти определенное время.</p> <p>Потенциальными пользователями результатов проекта будут физики, занимающиеся проблемами интерметаллических сплавов, и материаловеды, использующие функциональные сплавы на основе железа для практических приложений.</p>

В ходе реализации проекта планируются опубликование не менее 2 (двух) статей в журналах из первых трех квартилей по импакт-фактору в базе данных Web of Science или имеющих процентиль по CiteScore в базе данных Scopus не менее 50 (пятидесяти), а также не менее 1 (одной) статьи или обзора в рецензируемом зарубежном или отечественном издании, рекомендованном ККСОН.

Опубликование полученных результатов будет осуществлено согласно подпункту 1.1 раздела 7 текущей конкурсной документации.

Публикации результатов проекта в высокорейтинговых журналах с импакт-фактором позволят расширить публикационную активность КазНУ им. Аль-Фараби. При этом участие в подготовке и опубликовании результатов молодых ученых позволит получить им бесценный опыт в данном направлении, а также увеличит их наукометрические показатели. Также в рамках проекта запланирована подготовка PhD диссертации, данная тема будет предложена докторантам в 2022 году при поступлении на специальность «Ядерная физика».

Результаты проекта помимо публикаций, будут представлены в виде научных докладов на ряде международных конференциях и научных школах. Участие молодых ученых в данных конференциях позволит установить новые научные связи для дальнейших исследований, с целью развития данного направления в Казахстане.

Социальный эффект успешной реализации проекта заключается в развитии и укреплении навыков и опыта в проведении научных исследований молодых перспективных ученых Казахстана, а также привлечение их в науку, в новые направления, которые являются наиболее востребованными в мире. Так участие молодых ученых в развитии в данной тематике, позволит им получить бесценный опыт и стать высококлассными специалистами не только в своей стране, но и мире. Важно отметить, что результаты проекта сформируют серьезный научно-технический задел для проведения в Казахстане дальнейших передовых исследований в области разработки строительных технологии, материалов и конструкции. Реализация проекта также будет способствовать выстраиванию казахстанско-российского сотрудничества с ведущими научными группами, работающими в области нейтронной физики, с целью развития казахстанской научной школы.

Будет проведена подготовка и закрепление в сфере науки и образования научных кадров из числа студентов, позволяющих в будущем сформировать

	<p>эффективные научные коллективы. Так реализация проекта будет тесно связана с PhD докторскими и магистерскими диссертациями, выполняемыми казахстанскими студентами в рамках своего обучения.</p> <p>Целевыми потребителями полученных результатов будут международные научно-исследовательские центры и компании по получению, изучению и оптимизации микроструктуры композитных цементных материалов для нужд ядерной промышленности.</p>
<p>Имена и фамилии членов исследовательской группы с их идентификаторами (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID, при наличии) и ссылками на соответствующие профили</p>	<p>1. Мухаметулы Багдаулет, КазНУ имени аль-Фараби, 6D060500-Ядерная физика», доктор PhD, H-индекс=4, Scopus ID 55619577200.</p> <p>2. Балагуров Анатолий Михайлович, проф., д.ф.-м.н. H-индекс = 37, Scopus ID 7006758479</p>
<p>Список публикаций со ссылками на них</p>	<p>1. Mukhametuly, B., Bobrikov, I.A. Balagurov, A.M. «Neutron diffraction analysis of the microstructure of dispersion-hardening steels» Physics of Metals and Metallography Volume 117, Issue 10, 1 October 2016, Pages 1047-1053. (https://doi.org/10.1134/S0031918X16100045) (Q4, IF= 0.877, Процентиль – 55%)</p> <p>2. Balagurov, A.M., Bobrikov, I.A. Mukhametuly, B., Sumnikov, S.V, Golovin, I.S. Coherent cluster atomic ordering in the Fe-27Al intermetallic compound. JETP Letters Volume 104, Issue 8, 1 October 2016, Pages 539-545. (https://doi.org/10.1134/S0021364016200078), (Q3, IF= 1.532, Процентиль – 55%)</p> <p>3. Mukhametuly, B., Bokuchava G.D., Papushkin I.V., Sumin V.V., Aznabayev D. Microstrain in Dispersion-Hardened Steels. Physics of Particles and Nuclei Letters Volume 10, Issue 2, March 2013, Pages 157-161. (https://doi.org/10.1134/S1547477113020040) (Q4, IF= 0.527, Процентиль – 55%)</p> <p>4. B. Muhametuly, S. E. Kichanov, E. A. Kenzhin, D. P. Kozlenko, K. M. Nazarov, A. A. Shaimerdenov, E. Bazarbaev, E. V. Lukin. Concept of the Facility of Neutron Radiography and Tomography at the Research Reactor WWR-K in Almaty, Kazakhstan Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 13, 877–879 (2019). (https://doi.org/10.1134/S1027451019050082), (Q3, Процентиль – 21%)</p> <p>5. K.M.Nazarov, B.Mukhametuly, S.E.Kichanov, T.K.Zholdybayev, A.A.Shaimerdenov, K.B.Karakozov, D.S.Dyussambayev, M.T.Aitkulov, M.Yerdauletov, P.Napolskiy, M.Kenessarin,</p>

	<p>E.K.Kalymkhan, N.A.Imamverdiyev, S.H.Jabarov, Non-destructive analysis of materials by neutron imagin gat the TITAN facility, Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2021, 5(1), стр. 6–14. DOI:10.32523/ejpfm.2021050101 (Q4, Процентиль – 14%)</p> <p>6. K.Nazarov, B.Muhametuly, E.A.Kenzhin, S.E.Kichanov, D.P.Kozlenko, E.V.Lukin, A.A.Shaimerdenov. New neutron radiography and tomography facilityat theWWR-K reactor, Nuclear Instruments and Methodsin Physics Research Section A. 2020, V.982,164572. (https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.164572), (Q2, IF= 1.455, Процентиль – 59%)</p> <p>7. B.Muhametuly, D.P.Kozlenko, E.A.Kenzhin, S.E.Kichanov, E.V.Lukin, A.A.Shaimerdenov, K.Nazarov, B.N.Savenko. The First Scientific Results Obtained Using the Experimental Setup for Neutron Radiography and Tomography at the WWR-K Reactor, JINR News, 2020, No.1, p.20-23. DOI: 10.13140/RG.2.2.15838.38721</p> <p>8. Bauyrzhan A.B., Koltochnik S.N., Aitkulov M.T., Mukhametuly B., Burtebaev N.T., Neutron-physical parameters at the outlet of the WWR-K reactor beam tube, Eurasian Journal of Physicsand Functional Materialsthis link is disabled, 2019,3(3), стр. 219–225. https://doi.org/10.29317/ejpfm.2019030303 (Q4, Процентиль – 14%)</p> <p>9. K. M. Nazarov, S. E. Kichanov, E. V. Lukin, I. Yu. Zel, D. P. Kozlenko, T. K. Zholdybayev, B. Muhametuly, M. Kenessarín, A. V. Rutkauskas, A. Yskakov, M. O. Belova., A comparative study of promising filter materials for neutron imaging facilities, Eurasian Journal of Physicsand Functional Materialsthis link is disabled, 2021, Vol 5, No 4 стр. 169–180. DOI: 10.32523/ejpfm.2021050401, (Q4, Процентиль – 14%)</p>
Информация о патентах	-