



Екатеринбург | 23–25 августа 2021

**7-й Урало-Сибирский семинар
«Спектроскопия комбинационного рассеяния света»**

ПРОГРАММА СЕМИНАРА

Екатеринбург 2021

ОРГАНИЗАТОРЫ:



Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого
УрО РАН



Центр коллективного пользования ИГГ УрО РАН
«Геоаналитик»



ФИЦ «Красноярский научный центр Сибирского
отделения Российской академии наук»



Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН



Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б. Н. Ельцина

годнауки.рф -
навигатор научных событий



ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Шабанов В. Ф., академик РАН, д.ф.-м.н. (ФИЦ КНЦ СО РАН) – сопредседатель
Суровцев Н. В., член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ИАиЭ СО РАН) – сопредседатель
Вотяков С. Л., академик РАН, д.г.-м.н. (Центр коллективного пользования УрО
РАН «Геоаналитик»)
Втюрин А. Н., д.ф.-м.н. (ИФ СО РАН, Красноярск)
Колесов Б. А., д.х.н. (ИНХ СО РАН, Новосибирск)
Корсаков А. В., д.г.-м.н. (ИГМ СО РАН, Новосибирск)
Крылов А. С., к.ф.-м.н. (ИФ СО РАН, Красноярск)
Милехин А. Г., д.ф.-м.н. (ИФП СО РАН, Новосибирск)
Наумов А. В., д.ф.-м.н., профессор РАН (ИСАН, Троицк, Москва)
Поносов Ю. С., к.ф.-м.н. (ИФМ УрО РАН, Екатеринбург)
Шур В. Я., д.ф.-м.н. (ИЕНиМ УрФУ, Екатеринбург)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Щапова Ю. В., к.ф.-м.н., ИГГ УрО РАН – председатель
Киселева Д. В., к.г.-м.н., ИГГ УрО РАН – секретарь
Замятин Д. А., к.г.-м.н., ИГГ УрО РАН
Крылова С. Н., к.ф.-м.н., ИФ СО РАН
Леонидов И. И., к.х.н., ИХТТ УрО РАН
Пелегов Д. В., к.ф.-м.н., ИЕНиМ УрФУ
Панкрушина Е. А., асп., ИГГ УрО РАН
Рянская А. Д., асп., ИГГ УрО РАН

ПРОГРАММА СЕМИНАРА

Воскресенье, 22 августа	Время	Стр.
Заезд		
Регистрация	10:00-18:00	
Экскурсии по ЦКП ИГГ УрО РАН	В течение дня	
Автобусная обзорная экскурсия по Екатеринбургу, длительность 3-3.5 часа. Отъезд от ИГГ УрО РАН	15:00-18:00	
Понедельник, 23 августа		
Утреннее заседание		
Секции	9:30-13:00	4
Вечернее заседание		
Секции	14:00-18:00	6
Айс-брейкер		
Вторник, 24 августа		
Утреннее заседание		
Секции	9:30-13:00	9
Вечернее заседание		
Секции	14:00-18:30	11
Постерная секция	18:30-	20
Среда, 25 августа		
Утреннее заседание		
Секции	9:30-13:00	14
Вечернее заседание		
Секции	14:00-18:00	16
Товарищеский ужин	18:00-	
Четверг, 26 августа		
Автобусная обзорная экскурсия по Екатеринбургу, длительность 3-3.5 часа. Отъезд от ИГГ УрО РАН	11:00-14:00	

В рамках выставки аналитического оборудования будет представлен работающий оптоволоконный портативный спектрометр Virsa с лазерами 785 и 532 нм (фойе конференц-зала). Также на все время семинара будут присутствовать представители фирм-производителей спектроскопического оборудования.

В рамках социальных мероприятий планируется обзорная автобусная экскурсия по Екатеринбургу «Екатеринбург – сердце Урала», в воскресенье во второй половине дня с повтором в четверг в первой половине дня. Длительность примерно 3 часа, отъезд от ИГГ УрО РАН. После окончания экскурсии Вы сможете остаться в центре города (по желанию) и самостоятельно посетить достопримечательности/выставки /музеи и поужинать.

Понедельник, 23 августа

Утреннее заседание

9:30	<p>ОТКРЫТИЕ КОНФЕРЕНЦИИ Приветственное слово членов Оргкомитета конференции</p>
9:40-10:20 ПЛ-1	<p>Милёхин Александр Германович</p> <p>Плазмон-усиленное комбинационное рассеяние света с нанометровым пространственным разрешением Милёхин А.Г., Rahaman M., Дуда Т.А., Родякина Е.Е., Васильев Р.Б., Milekhin I.A., Аникин К.В., Dzhagan V.M., Латышев А.В., Zahn D.R.T.</p> <p>Сообщается о последних достижениях в исследовании комбинационного рассеяния света (КРС) двумерными и нульмерными полупроводниковыми наноструктурами, расположенными на поверхности массивов золотых нанокластеров, усиленного металлизированным зондом атомного-силового микроскопа (АСМ) (от англ. gap-mode tip-enhanced Raman scattering). Такая геометрия эксперимента обеспечивает гигантское усиление сигнала КРС при нанометровом пространственном разрешении (нано-КРС). Основное внимание будет уделено коллоидным сферическим нанокристаллам CdSe и нанопластинкам CdSe/CdS типа ядро/оболочка, нанесенным на поверхность плазмонных структур методом Ленгмюра-Блоджетт, и двумерным структурам, включая дисульфид молибдена (MoS₂) и графен. Плазмонные структуры представляют собой массивы золотых нанокластеров диаметром 50–200 нм, которые были сформированы с помощью нанолитографии на поверхности Si и Si/SiO₂.</p> <p>Плазмонные свойства массивов нанокластеров Au на поверхности Si и Si/SiO₂ были изучены, и определена зависимость энергии локализованного поверхностного плазмонного резонанса от структурных параметров нанокластеров.</p> <p>Обсуждается резонансное гигантское нано-КРС оптическими фононами наноструктур, когда энергия возбуждающего излучения близка к энергии ЛППР. Будут представлены результаты изучения нано-КРС оптическими и поверхностными оптическими фононами двумерных и нульмерных наноструктур на массивах нанокластеров Au. Изображения нано-КРС массивов двумерных и нульмерных наноструктур представляют собой набор упорядоченных колец с диаметром, близким к размеру нанокластеров. Сравнение АСМ и нано-КРС изображений свидетельствует о том, что сигнал КРС от наноструктур наблюдается преимущественно для областей, расположенных вблизи граней нанокластеров Au, где ожидается максимальное локальное электромагнитное поле.</p> <p>Показано, что усиление имеет электромагнитный характер, а коэффициент усиления сигнала КРС может превышать величину 10⁵.</p> <p>Гигантское усиление КРС позволило получить информацию о правилах отбора для нано-КРС, величинах механических напряжениях в нанопластинках и распределении локального электромагнитного поля вблизи металлических наноструктур, о фазовом составе полупроводниковых наноструктур.</p> <p>Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 19-52-12041, РФФИ 19-52-12041-ННИО а РФФИ 18-02-00615 а РФФИ 18-29-20066_мк)</p>
10:20-10:50 С-1	<p>Быков Виктор Александрович (НТ-МДТ Спектрум Инструментс)</p> <p>Сканирующая спектроскопия нанометрового разрешения для исследования строения и свойств микро- и наноструктур Быков В.А., Быков Ан.В., Быков А.А., Котов В.В., Леесмент С.И., Поляков В.В., Тимофеев С.В.</p> <p>В настоящее время методами сканирующей зондовой микроскопии и спектроскопии возможно измерять целый ряд физических свойств поверхностных структур. Для реализации этих возможностей разработаны специальные системы, позволяющие одновременно работать в режимах атомной силовой микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния (Рамановской), люминесцентной спектроскопии, ближнепольной оптической микроскопии (SNOM). Для реализации этой идеи с конца 90-х годов NT-MDT были предприняты разработки соответствующих систем – были созданы приборы линии АСМ-Раман NTEGRA Spectra, включающие как атомно-силовую, так и сканирующую Рамановскую и люминесцентную спектроскопию. Разработка зондов со специальными покрытиями, способными концентрировать оптические плазмоны, позволило создать приборы на основе эффекта гигантского усиления Рамановского рассеяния – создать методы Tip Enhanced Raman Scatterings</p>

	<p>(TERS). Методика информативна для изучения, в том числе, сегнетоэлектриков, предельно тонких углеродных материалов – графенов, углеродных нанотрубок, слоистых полупроводников, а также квантовых точек, нанопроволок и других материалов, активных в комбинационном рассеянии. Не оставлено без внимания новейшее направление в нанофотонике и наноплазмонике: нано-ИК спектроскопия (s-SNOM в ИК диапазоне). Измерительная система NT-MDT NTEGRA nano IR может работать в спектральном диапазоне 3 – 12 мкм в зависимости от используемого лазера. Метод s-SNOM интересен для как для изменения уровня легирования, так и распределения химических функциональных групп – при использовании перестраиваемых лазеров инфракрасного диапазона.</p>
10:50-11:00	КОФЕ-БРЕЙК
Комбинационное рассеяние в кристаллах и в микро-, мезо- и наноструктурах	
11:00-11:20 О-1	<p>Сергеева Нина Мифодьевна</p> <p>Исследование поверхности модифицированной подложки p-Si/нано 3C-SiC, содержащей буферный слой Сергеева Н.М., Богданов С.П.</p> <p>Приведены данные исследования поверхности подложки Si(111)/3C-SiC(111), модифицированной осаждением люминофора $Cd_{0.1}Zn_{0.9}S:Cu,Ag$ из водного коллоидного раствора. Подложка содержит пористую прослойку, расположенную между слоем SiC и матрицей монокристаллического кремния. Используются методы электронной микроскопии (РЭМ), микроAMANовской конфокальной спектроскопии (МРКС), инфракрасной (ИК) спектроскопии отражения. Методом РЭМ в режиме контраста вторичных электронов показано, что на поверхности подложки находятся отдельные кристаллики люминофора, сульфата натрия, сульфида натрия-кадмия. Анализ сигналов МРКС позволил идентифицировать набор линий характерных для: TA-Si (300 см^{-1}), TO-Si (522 см^{-1}), TO- 3C-SiC (796 см^{-1}), LO-H-SiC (968 см^{-1}), твёрдого раствора $Cd_{0.1}Zn_{0.9}S$ (658 см^{-1}). От исходной подложки наблюдали только кремниевые линии и сложную линию: Si+LO-3C-SiC (973 см^{-1}), обусловленную структурой буферного слоя. Методом ИК спектроскопии отражения в диапазоне от 50 до 3000 см^{-1} ($200.0\text{--}3.3\text{ мкм}$) обнаружена аномально высокая интенсивность сигналов отражения свыше 60000 абс. ед. детектора CDD (charged -coupled device) в широком диапазоне волновых чисел см^{-1} от 1200 до 3300 ($8.3\text{--}3.0\text{ мкм}$). Этот эффект объяснён вкладами в интегральную интенсивность колебаний кристаллических решёток поверхности подложки структуры композита $Na_2SO_4/Si/Cd_{0.1}Zn_{0.9}S:Cu,Ag$, образованного при кристаллизации водного раствора сульфата натрия в виде отдельных нитевидных монокристаллов, дендритных их ветвлений в пустотах пористой подложки.</p>
11:20-11:40 О-2	<p>Крылов Александр Сергеевич</p> <p>Низкочастотная спектроскопия КР металлоорганических каркасов Крылов А.С. Senkovska I., Крылова С.Н., Юшина И.Д., Слюсарева Е.А., Kaskel S., Втюрин А.Н.</p> <p>Переключаемые металлоорганические каркасы (MOF) или мягкие пористые кристаллы являются уникальными материалами, которые могут преобразовывать свою кристаллическую структуру из плотного непористого в высокопористое открытое состояние и наоборот в ответ на внешние раздражители. Это бистабильные или мультистабильные кристаллические материалы с дальним структурным упорядочением, обратимой трансформируемостью между кристаллическими фазами и постоянной пористостью. Представлены результаты исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния света переключаемого металлоорганического каркаса DUT-8 (Ni), относящегося к классу MOF со столбчатым слоем. Выявленные характерные спектральные особенности могут стать основой для экспресс-методики, основанной на спектроскопии КРС, для определения различных переключаемых фаз MOF, а также для in situ анализа по спектральному профилю. Работа поддержана грантом РФФИ No. 18-02-00754.</p>
11:40-12:00 О-3	<p>Юшина Ирина Дмитриевна</p> <p>Расчетные спектральные характеристики кристаллических металлоорганических каркасов в низкочастотной области Юшина И.Д., Крылов А.С.</p> <p>В работе будут рассмотрены особенности расчета КР-активных мод колебаний для металлоорганических каркасов различной симметрии, состава, строения и топологии методами теории функционала плотности с периодическими граничными условиями. Будет произведен</p>

	анализ полученных данных с точки зрения сопоставления с экспериментальными структурными и спектральными данными, наблюдаемыми фазовыми переходами и особенностями межмолекулярных взаимодействий.
12:00-12:20 О-4	<p>Пелегов Дмитрий Вячеславович</p> <p>Исследование микронных частиц при помощи микро-СКРС: проблемы и особенности метода на примере железософосфата лития Рябин А.А., Лукманова А.И., Пелегов Д.В.</p> <p>Спектроскопия комбинационного рассеяния (КРС) света как метод исследования структуры материалов уже давно и успешно используется как в научных исследованиях, так и для решения прикладных задач. Но, как и для любого другого метода, для спектроскопии КРС существуют свои ограничения. Особенности взаимодействия лазерного излучения с исследуемым объектом определяются как физическими и химическим свойствами объектов, так и физическими свойствами воздействующего на объект лазерного излучения. В докладе предлагаются к обсуждению результаты исследования микрочастиц железософосфата лития при помощи конфокальной микроскопии КРС. Для решения задачи уточнения локальности метода (латерального и вертикального разрешения) был проведен эксперимент по исследованию спектров КРС отдельных частиц LiFePO_4, осажденных на кремниевую подложку, которая выступала в качестве модельного нижнего слоя. Были измерены спектры для семидесяти отдельных частиц разного размера. Сравнение интенсивностей 522 см^{-1} пика кремния и 951 см^{-1} пика LiFePO_4 в зависимости от диаметра частиц позволило сделать вывод, что вертикальное разрешение может достигать нескольких микрон. Использование картирования выявило «блокировку» отклика на краях частиц и в порах, а также локальное усиление частицей отклика от кремниевой подложки. Также подход отдельных частиц позволил выявить неоднородность оптических свойств, а также различные пути и продукты деградации. Индуцированный лазером нагрев как причина изменения параметров пиков LiFePO_4 был поставлен под вопрос.</p>
12:20-12:40 О-5	<p>Федотова Яна Викторовна</p> <p>Гигантское усиление рамановского рассеяния света в ближней ИК-области спектра Федотова Я.В., Кукушкин В.И., Соловьев В.В., Кукушкин И.В.</p> <p>Исследованы свойства периодических диэлектрических структур, покрытых толстым слоем металла, которые позволяют усиливать сигнал неупругого рассеяния света более чем на восемь порядков при длине волны лазерного возбуждения 1064 нм. Обнаружены две моды гигантского резонансного усиления рамановского сигнала, связанные с различным диэлектрическим окружением металлической пленки. Изучены параметры периодических структур, при которых наблюдается абсолютный максимум резонансного усиления и показано, что этот режим реализуется при выполнении четырех условий: (а) период структуры должен быть приблизительно равен длине волны лазерного возбуждения; (б) отношение планарного размера столбика к периоду должно быть около 0.42; (в) высота диэлектрических столбиков должна быть около 260 нм; (г) толщина закрывающего слоя серебра должна быть около 80 нм. Изученные структуры могут быть получены относительно дешевым фотолитографическим методом. Уникальные свойства реализованных структур открывают огромные перспективы по их использованию для детектирования возбудителей опасных заболеваний в биомедицинских анализах.</p>
12:40-13:00 О-6	<p>Демишкевич Елизавета Александровна</p> <p>Исследование плазмонных свойств наноструктурированных золотых островковых плёнок, термоосажденных на кварцевую поверхность Демишкевич Е.А., Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Самусев И.Г.</p> <p>В представляемой работе отражены результаты исследований по разработке методологии создания модифицированных гидрозолями золотых наночастиц размером 32 нм островковых кластеров на кварцевых поверхностях. Показано, что порядок усиления сигнала комбинационного рассеяния света поверхностными плазмонами наночастиц золота для молекул красителя родамина 6Ж может достигать $10_4\text{-}10^5$ раз. Для создания наночастиц золота в работе использовался контролируемый синтез их гидрозолей методом восстановления из соли HAuCl_4. Размер полученных частиц и свойства плазмонного поглощения гидрозолей были исследованы с помощью методов фотон-корреляционной спектроскопии и спектрофотометрии, соответственно. Золи адсорбировались на химические очищенные кварцевые стекла. Для исследования спектров гигантского комбинационного рассеяния использовался спектрометр</p>

	комбинационного рассеяния Centaur U HR (ООО «Наноскантехнология», Россия и ЗАО «SolarLS», Республика Беларусь), на котором, с помощью DPSS лазера Cobolt Samba (532 нм) мощностью 50 мВт были получены спектры гигантского комбинационного рассеяния молекул родамина 6Ж ($C=5 \cdot 10^{-5}$), адсорбированных на слое термически нанесенных на кварцевое стекло гидрозолей. Для каждого образца был рассчитан порядок усиления сигнала комбинационного рассеяния. В работе показана перспективность использования предложенного подхода как эффективного метода для исследования широкого круга соединений с помощью спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света.
13:00	ФОТОГРАФИРОВАНИЕ
13:00-14:00	ОБЕД

Вечернее заседание

14:00-14:40 ПЛ-2	Наумов Андрей Витальевич Сверхчувствительная флуоресцентная и КР-спектроскопия одиночных молекул
14:40-15:10	Поляков Вячеслав (НТ-МДТ Спектрум Инструменте) Тема будет объявлена позднее
Комбинационное рассеяние в молекулах и кристаллах	
15:10-15:30 О-7	Шукшин Владислав Евгеньевич Анализ поляризованных спектров спонтанного комбинационного рассеяния монокристаллического $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ Шукшин В.Е., Шлегель В.Н., Григорьева В.Д. Впервые исследованы поляризованные спектры спонтанного комбинационного рассеяния света образца монокристаллического димолибдата натрия, полученного методом Чохральского в условиях низкого температурного градиента. Идентифицировано 50 колебаний характерных типов симметрии из 66 предсказанных для $\text{Na}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ теоретико-групповым анализом (18 из 18 линий симметрии типа A_g , 12 из 15 типа B_{1g} , 9 из 14 B_{2g} и 11 из 19 – типа B_{3g}). Измерены параметры линии, обладающей максимальным сдвигом и наиболее перспективной для ВКР-преобразования когерентного излучения: тип симметрии A_g , частотный сдвиг $\Delta\nu = 936.8 \text{ см}^{-1}$, ширина линии на полувысоте $\delta_{1/2} = 2.7 \text{ см}^{-1}$.
15:30-15:50 О-8	Соловьева Елена Викторовна Гигантское комбинационное рассеяние органических лигандов, выполняющих функцию молекулярных линкеров наночастиц благородных металлов Соловьева Е.В., Смирнов А.Н., Одинцова О.В., Пузык А.М., Иванов П.В. В работе представлены результаты исследования ГКР спектров бифункциональных полиароматических соединений на основе производных толана, стильбена и бибензила, которые способны выступать в качестве молекулярных линкеров золотых и серебряных наночастиц (НЧ). Получаемые путем сшивки НЧ органо-неорганические системы представляют высокий интерес для нанооптики и органической электроники, а также для выявления фундаментальных закономерностей, происходящих в условиях высоко локализованного электромагнитного поля. Основным аспектом настоящей работы заключается в оценке влияния строения органического лиганда, как сопряженной системы, так и функциональных групп, на механизм его взаимодействия с поверхностью металла и возникающий ГКР отклик. Установлено, что наличие в молекуле лиганда полностью сопряженной π -системы играет принципиальную роль для возникновения механизма переноса заряда, даже в случае идентичных концевых функциональных групп. Расчет аналитических коэффициентов усиления позволил оценить дополнительный вклад в ГКР, обусловленный резонансным механизмом.
15:50-16:00	КОФЕ-БРЕЙК
16:00-16:20 О-9	Петров Илья Сергеевич Прогресс в изготовлении имплантируемых биосовместимых SERS подложек Петров И., Свиридова Е., Дорожко Е., Исса А., Шеремет Е., Постников П., Джради С., Родригес Р.Д. В настоящее время использование гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС, англ. SERS) привлекает все больший интерес в области биомедицины, поскольку данный метод

	<p>позволяет не только обнаруживать крайне низкие концентрации биомолекул (до 10^{-8} моль⁻¹), но и идентифицировать их структуру. в том числе были продемонстрированы долговременные измерения на имплантированных подложках. Данное исследование посвящено разработке биосовместимых, механически и химически стабильных SERS подложек для использования <i>in vivo</i>. Мы сравнили различные подходы (подложки, изготовленные методом Френца; трехмерные структуры, изготовленные методом двухфотонной поляризации), с точки зрения чувствительности и равномерности распределения аналитического сигнала для модельных монослоев 4-нитрофенола и для лекарственных препаратов. Развитие <i>in vivo</i> ГКР-сенсоров позволит расширить возможности высокочувствительного мониторинга биохимических параметров для биомедицины и он-лайн мониторинга функциональных состояний организма. Исследования поддержаны грантом РФФИ № 19-75-10046.</p>
16:20-16:40 О-10	<p>Пугачев Алексей Маркович</p> <p>Комбинационное рассеяние света и нелинейно-оптические методы исследования локальных асимметричных областей в сегнетоэлектрических кристаллах Пугачев А.М., Зайцева И.В.</p>
16:40-17:00 О-11	<p>Зайцева Ирина Валерьевна</p> <p>Применение спектроскопии КРС и РМБ для изучения локальных полярных областей в параэлектрической фазе в сегнетоэлектриках и релаксорах Зайцева И.В., Пугачев А.М., Суровцев Н.В., Ивлева Л.И., Лыков П.А.</p> <p>В настоящей работе предметом исследования являются локальные полярные области, возникающие в параэлектрической фазе ниже определенной температуры T_d, в релаксорах и некоторых сегнетоэлектриках. В качестве модельных объектов для изучения роли локальных полярных областей в релаксорах и сегнетоэлектриках используются кристаллы ниобата бария стронция $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$ (далее, SBN-100x) химического состава $x = 0.33, 0.5, 0.61, 0.75$. При $x < 0.5$ данные кристаллы демонстрируют свойства обычных сегнетоэлектриков, при $x > 0.5$ – свойства, характерные для релаксоров. Для исследования кристаллов SBN-100x применяются бесконтактные и неразрушающие методы исследования, такие как метод комбинационного рассеяния света (КРС) и рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ). В результате показано, что для всех образцов в низкочастотных спектрах КРС наблюдается центральный пик (ЦП) в широком диапазоне температур, включая сегнетоэлектрическую и параэлектрическую фазы. Спектральная форма ЦП в представлении спектральной плотности не описывается функцией Лоренца, в то время как в представлении спектральной плотности ЦП подчиняется степенному закону w^α, где $\alpha < 1$. Это указывает на множество времён релаксации. Получены температурные зависимости позиции и ширины линий РМБ продольных акустических (LA) мод. Показано, что позиции и ширины линий РМБ и амплитуда ЦП отклоняются от линейного высокотемпературного поведения в параэлектрической фазе ниже T_d. Температуры T_d, полученные КРС и РМБ, незначительно отличаются. При этом T_d не отличаются в SBN-100x независимо от x.</p>
17:00-17:20 О-12	<p>Пятьшев Александр Юрьевич</p> <p>Комбинационная опалесценция на крутильной моде в гиротропных кристаллах Горелик В.С., Пятьшев А.Ю.</p> <p>Гиротропные кристаллы характеризуются способностью вращать плоскость поляризации электромагнитного излучения. Эта способность связана со структурой кристаллов – асимметричное строение молекулы, при котором она является хиральной, либо с асимметрией структуры самого вещества. Примерами гиротропных кристаллов являются многие аминокислоты, комплексные соединения металлов, кварц и др. Целью работы является установление характеристик комбинационной опалесценции в гиротропных кристаллах. В качестве объектов исследования были выбраны кристаллы кварца, парателлурита, триглицинсульфата и тирозина. Регистрация спектров комбинационного рассеяния (КР) проводилась при нескольких геометриях рассеяния. В результате установлено, что в спектре КР кристаллах хирально чистого L-тирозина наблюдается ряд высокодобротных либрационных мод полярного типа. В спектре КР монокристалла триглицинсульфата вдоль сегнетоэлектрической оси имеется ряд узких линий, при повороте кристалла перпендикулярно этой оси некоторые линии отсутствуют и наблюдается резкий рост люминесцентного фона. В спектре КР кристаллов кварца помимо фундаментальных линий $A_1(TO)$-типа присутствует дополнительная полоса, не предсказанная теоретико-групповым анализом. Положения максимумов интенсивностей в спектрах КР для фундаментальных мод $A_1(TO)$ изменяются</p>

	<p>несущественно при нагревании кристалла кварца, дополнительная полоса ведёт себя как эффективная мягкая мода. Наконец, в кристаллах парателлуриата наблюдается существенное изменение спектра КР при повороте кристалла относительно оси z.</p> <p>Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 18-02-00181 и 18-32-00259 мол_а) и РНФ (грант 19-79-30086).</p>
Теория комбинационного рассеяния света	
17:20-17:40 О-13	<p>Абалмасов Вениамин Александрович</p> <p>Частота ангармонического осциллятора как функция температуры Абалмасов В.А.</p> <p>Частота оптических фононов, измеряемая методами комбинационного рассеяния света (КРС) или инфракрасной (ИК) спектроскопии, зависит от температуры. Во-первых, это связано с изменением плотности кристалла и соответствующим изменением параметров гармонического потенциала, в котором находятся ионы. Однако гораздо более сильная зависимость может наблюдаться для колебаний ионов в ангармоническом потенциале, когда при более низкой температуре ионы находятся ближе к дну потенциальной ямы, где расстояния между соседними уровнями энергии могут быть значительно меньше. В большей степени это свойственно гостевым ионам в ячейках клатратов или т. н. «погремушек» (англ. rattlers). Мы находим в классическом квазигармоническом приближении температурную зависимость частоты осциллятора $\omega(T)$ в потенциале вида $V = a x^2 + b x^n$ при разных соотношениях параметров a и b. При малом ангармонизме поправка к частоте гармонического колебания оказывается пропорциональной $T^{(n-2)/4}$. В противоположном пределе, частота полностью определяется ангармоническим потенциалом и оказывается пропорциональной $T^{(n-2)/2n}$. Мы подтверждаем наши выводы точными квантовомеханическими расчётами диэлектрической восприимчивости при разных частотах и температурах для отдельных видов ангармонического потенциала. Мы подчёркиваем отличие в данном случае от температурной зависимости Кюри-Вейса вида $(T-T_c)^{1/2}$, свойственной сегнетоэлектрической мягкой моде и обусловленной взаимодействием ионов одного типа.</p>
17:40-18:00	ЭКСКУРСИЯ ПО ЦКП «ГЕОАНАЛИТИК»
18:00	ПРИВЕТСТВЕННЫЙ ФУРШЕТ

Вторник, 24 августа

Утреннее заседание

9:30-10:10 ПЛ-3	<p>Втюрин Александр Николаевич</p> <p>Комбинационное рассеяние света на низкочастотных колебаниях с учетом затухания Втюрин А.Н.</p> <p>Аномальное снижение частоты фононных мод, соответствующих флуктуациям параметра порядка фазового перехода – яркий физический эффект, во многих случаях определяющий механизм возникновения неустойчивостей кристаллической решетки. Исследование зависимости частоты этих критических колебаний от внешних параметров (температуры, давления, электрических или магнитных полей) позволяет установить многие характеристики исследуемых кристаллов, важные как для решения вопросов фундаментальной физики твердого тела, так и для практических приложений. Для проведения таких исследований широко применяется методика спектроскопии комбинационного рассеяния света.</p> <p>Для повышения точности определения частот линий спектра комбинационного рассеяния в настоящее время, как правило, используется компьютерная обработка спектра; при этом для описания формы спектральных линий используются дисперсионный или гауссов контуры, либо их комбинация. Известно, что форма линии комбинационного рассеяния в идеальном кристалле в случае малого затухания описывается именно дисперсионным контуром, поэтому в стандартных программах обработки спектров используется именно она. В то же время при исследовании низкочастотных колебаний, когда частота линии становится сравнимой с ее шириной и приближается к крылу упругого рассеяния, контур линии становится очевидно асимметричным, что делает определение частоты линии комбинационного рассеяния проблематичным. Для решения этой проблемы ранее были предложены различные приближенные подходы (см., например, [1]), однако форма контура спектральной линии по-прежнему предполагалась дисперсионной. В то же время в [2] было показано, что при</p>
--------------------	---

	<p>понижении частоты колебания контур соответствующей спектральной линии становится асимметричным и существенно отличается от дисперсионного. Дополнительные искажения в спектральный контур могут вносить взаимодействия таких колебаний с квазиупругим рассеянием на дефектах структуры и некритическими низкочастотными колебаниями решетки. В докладе приводятся примеры обработки спектров низкочастотного комбинационного рассеяния с учетом этих факторов. В качестве примеров используются спектры низкочастотных спектров комбинационного рассеяния ряда кристаллов ферроборатов и керамик оксидов со структурами перовскита и эльпасолита смешанных составов.</p> <p>1. Н. Taniguchi, M. Itoh, D. Fu, J. Raman Spectroscopy 42, 706 (2010). 2. В. Л. Гинзбург, А. П. Леванюк, А. А. Собянин, УФН 130, 615 (1980).</p>
10:10-10:50 ПЛ-4	<p>Бунтов Евгений Александрович</p> <p>DFT-моделирование комбинационного рассеяния изолированных и 2D-упорядоченных карбиновых цепей</p> <p>В последние годы большой интерес вызывают одномерные аллотропы углерода, содержащие sp¹-связи, как отдельные цепи, так и карбиноподобные кристаллы, удерживаемые силами Ван-дер-Ваальса.</p> <p>В связи с трудностями стабильного синтеза цепочечных структур особое значение приобретают методы ab initio моделирования, широко применяемые для исследования одномерного углерода. Одним из недавних достижений является ионная конденсация sp¹ цепочек, упорядоченных в гексагональную структуру с межцепочечным расстоянием около 5 Å, т.н. 2D-упорядоченный линейно-цепочечный углерод (ЛЦУ).</p> <p>Основной проблемой синтеза ЛЦУ является отсутствие простой методики аттестации, способной оперативно характеризовать его структурные особенности.</p> <p>В наших работах объединены экспериментальные спектры комбинационного рассеяния пленок и расчет рамановской восприимчивости из первых принципов с использованием структурной модели ЛЦУ, с учетом и без учета поверхности подложки. DFT-расчеты позволяют идентифицировать типы колебаний в спектрах КРС, устанавливая зависимость между линейной длиной фрагмента, углом изгиба и комбинационно-активными фононными модами углеродных цепочек, обеспечивая интерпретацию высокочастотным и низкочастотным колебаниям с учетом распределения структурных параметров ЛЦУ. Результаты расчетов объясняют инверсию рамановского спектра отдельной цепи, наблюдаемую в случае ансамбля цепочек, взаимодействием между цепями, усиленным за счет изгибов в структуре ЛЦУ. Эффект усиления низкочастотных колебаний в КР-спектре объясняется влиянием приповерхностных слоев подложки.</p>
10:50-11:00	КОФЕ-БРЕЙК
Комбинационное рассеяние в кристаллах и разупорядоченных средах	
11:00-11:20 О-14	<p>Крылова Светлана Николаевна</p> <p>Динамика решетки AgNbO₃ и 95.5%AgNbO₃-4.5%LiTaO₃: исследование методом комбинационного рассеяния света</p> <p>Крылова С.Н., Крылов А.С., Втюрин А.Н., Li Jing, Tian Ye, Jin Li and Wei Xiaoyong</p> <p>Выполнены температурные измерения в керамике AgNbO₃ и 95.5%AgNbO₃-4.5%LiTaO₃ в диапазоне от 10 до 415 К методом спектроскопии комбинационного рассеяния. Представлена интерпретация спектров комбинационного рассеяния AgNbO₃ при комнатной температуре. Наблюдались мягкие фононные моды. Определены температуры спектральных аномалий в керамике AgNbO₃ и в 95.5%AgNbO₃-4.5%LiTaO₃. Исследованы отличия температурного поведения спектров чистого ниобата серебра и легированного ионами лития и тантала.</p>
11:20-11:40 О-15	<p>Орешонков Александр Сергеевич</p> <p>КР и ИК спектроскопия тригональных и моноклинных боратов ReAl₃(BO₃)₄</p> <p>Орешонков А.С., Шестаков Н.П., Молокеев М.С., Рогинский Е.М., Адищев С.В., Пугачев А.М., Гудим И.А., Темеров В.Л., Чимитова О.Д.</p> <p>В работе представлены экспериментальные КР и ИК спектры, полученные от тригональных и моноклинных представителей ReAl₃(BO₃)₄. Их интерпретация выполнена на основе ab initio вычислений DFT методом. Обсуждаются вопросы стабильности ReAl₃(BO₃)₄ с хантитоподобной структурой, однозначной идентификации полиморфных модификаций ReM₃(BO₃)₄ методом колебательной спектроскопии.</p>
11:40-12:00 О-16	Втюрин Александр Николаевич

	<p>Фазовый переход в керамике $Pb(Yb-Nb)O_3-BaTiO_3$ - комбинационное рассеяние света Втюрин А. Н., Крылов А. С., Крылова С. Н., Bingjie Teng, Jiangtao Zeng, Guorong Li</p> <p>Методом комбинационного рассеяния света исследован фазовый переход в керамике $Pb(Yb-Nb)O_3-BaTiO_3$ в области малых (менее 10%) концентраций титаната бария. Фазовый переход в области концентраций 5–6% при комнатной температуре проявляется как в конденсации и сильном уширении низкочастотного фона, так и в аномальном скачке положения высокочастотной линии, соответствующей колебанию связи металл-кислород. Исследованы температурные и угловые зависимости спектров.</p>
12:00-12:40	<p>Он-лайн демонстрация нового спектрометра LabRam Soleil (Horiba) Прямое включение из Франции</p>
12:40-13:00 O-17	<p>Щапова Юлия Владимировна</p> <p>Динамика решетки и электронное строение ортофосфатов $LnPO_4$ ($Ln=La, Ce, Nd$): влияние типа Ln, химического и радиационного беспорядка Щапова Ю.В., Панкрушина Е.А., Замятин Д.А., Вотяков С.Л.</p>
13:00-14:00	ОБЕД

Вечернее заседание

14:00-14:40 ПЛ-5	<p>Суровцев Н.В. Низкочастотные спектры комбинационного рассеяния света водных суспензий фосфолипидных везикул</p> <p>В докладе представлены результаты исследований низкочастотного ($5-100\text{ см}^{-1}$) комбинационного рассеяния света (КРС) в фосфолипидных слоях. Фосфолипиды, являющиеся важным компонентом биологических мембран, формируют бимолекулярные слои толщиной около 5 нм. Получено, что собственные слоевые колебания мембран, частота которых определяется модулем упругости и толщиной мембраны, а также колебательные акустоподобные возбуждения, распространяющиеся вдоль липидного слоя, проявляются в низкочастотном спектре КРС фосфолипидных мембран. Будет обсуждено влияние фазового состояния, температуры, насыщенности фосфолипида и длины его углеводородного хвоста на параметры пиков, соответствующих слоевым модам. Чувствительность спектра КРС, отражающего плотность акустоподобных колебательных состояний, к упорядоченному или неупорядоченному фазовому состоянию будет сравнена с результатами измерений неупругого рассеяния нейтронов и синхротронного излучения. Работа поддержана грантом РФФ No. 19-12-00127.</p>
14:40-15:10 С-4	<p>Михаил Александрович Трусов, NeaSpec</p> <p>Ближнепольная фотолюминесцентная и рамановская микроспектроскопия NeaSpec Баварская команда NeaSpec (принадлежит компании Attocube AG) является ведущим производителем оборудования для ближнепольной микроскопии и спектроскопии. NeaSpec владеет рядом передовых запатентованных технологий в ближнепольной оптике, позволяющих достигать в микроскопических исследованиях рекордного пространственного разрешения в очень широком спектре длин волн излучения VIS-NIR-THz. Таким образом, приборы NeaSpec позволяют проводить комплексный оптический анализ материалов на очень малых масштабах, на порядки превышающих традиционный дифракционный предел оптической спектроскопии. Оптическая схема прибора NeaSpec оптимально использует механизм зондового усиления электромагнитного поля для локализации сигнала фотолюминесценции и сигнала комбинационного рассеяния. Доклад посвящен описанию технологии и методик оптической наномасштабной фотолюминесцентной и рамановской спектроскопии на приборах NeaSpec</p>
15:10-15:30 O-18	<p>Адищев Сергей Владимирович</p> <p>Низкочастотное рассеяние света в дибутилфталате Адищев С.В, Суровцев Н.В.</p> <p>Низкочастотный спектр рассеяния света в стеклах содержит вклад колебательной плотности состояний, называемый «бозонный пик», проявляющийся в диапазоне 1–10 ТГц, и вклад быстрой релаксации, доминирующий в области 1–500 ГГц. Выяснение природы и свойств</p>

	<p>бозонного пика и быстрой релаксации является предметом активных исследований. Предлагаемая работа посвящена экспериментальному исследованию быстрой релаксации в органической жидкости дибутилфталат при температурах ниже температуры стеклования с помощью низкочастотного рассеяния света.</p>
Комбинационное рассеяние в молекулах и биологических объектах	
15:30-15:50 O-19	<p>Окотруб Константин Александрович</p> <p>Исследование сосуществования фаз липидов в ооцитах домашней кошки методом спектроскопии комбинационного рассеяния света дейтерированных меток Окотруб К.А., Окотруб С.В., Мокроусова В.И., Амтиславский С. Я., Суровцев Н.В.</p> <p>В данной работе мы применили метод спектроскопии КРС дейтерированных меток для изучения фазового разделения и конформационного упорядочения различных липидных фракций в цитоплазматических липидных гранулах. С этой целью ооциты кошек культивировали с дейтерированными жирными кислотами, линии комбинационного рассеяния которых сдвинуты от линий комбинационного рассеяния остальных липидов. Полученные температурные зависимости спектров комбинационного рассеяния света позволили изучить, как изменяется фазовое состояние для различных фракций липидов при охлаждении. Картирование КРС позволило оценить перераспределение липидов с насыщенными, мононенасыщенными и полиненасыщенными углеводородными цепями внутри липидных гранул. Были идентифицированы две сосуществующие фазы: упорядоченная фаза, богатая насыщенными углеводородными цепями, и неупорядоченная фаза, богатая мононенасыщенными и полиненасыщенными липидами. Различные липидные фракции внутри липидных гранул претерпевают фазовый переход при разных температурах, что свидетельствует о том, что постепенные изменения липидного фазового состояния во время охлаждения связаны с фазовым разделением, которое приводит к пространственному перераспределению различных липидных фракций. Проведенное исследование КРС липидных гранул внутри ооцитов кошек с использованием дейтерированных углеводородных меток демонстрирует возможности этого подхода для изучения эффектов разделения липидов <i>in vivo</i>. Работа была выполнена при поддержке РФФ 19-74-00050.</p>
15:50-16:00	КОФЕ-БРЕЙК
16:00-16:20 O-20	<p>Крайский Александр Владиславович</p> <p>О новом подходе к исследованиям спектров комбинационного рассеяния света межмолекулярных колебаний воды и слабых водных растворов Крайский А.В., Мельник Н.Н., Крайский А.А.</p> <p>Низкочастотные (НЧ) спектры комбинационного рассеяния света воды и слабых водных растворов (4 см^{-1}–350 см^{-1}) отражают динамику сетки водородных связей межмолекулярных колебаний воды. При этом связи нестабильны: постоянно рвутся и возникают вновь. С этими колебаниями связаны 2 полосы: низкочастотная (НЧ – около 50 см^{-1}) и высокочастотная (ВЧ – около 180 см^{-1}). Для аппроксимации спектров в указанном диапазоне была предложена функция из 4-х слагаемых, имеющая 9 подгоночных параметров, хорошо приближающая экспериментальные спектры [1, 2]. В слабых растворах общий вид спектра не изменяется, изменяются лишь значения всех параметров. Все параметры заметно флуктуируют даже при записи одного и того же образца. Однако нами впервые было обнаружено, что флуктуации положения максимума полосы и ее ширины коррелированы [3, 2]. Это нами было объяснено на основе свойств классического затухающего осциллятора. Было показано, что полосы спектрально неоднородны, получены значения эффективных собственных частот колебаний, коэффициентов неоднородности, однородные ширины линий и времена затухания [4]. В спектральных координатах (квадрат частоты – квадрат ширины) наблюдалось неоднородное разномасштабное распределение точек, характеризующих полосу, отражающее неоднородность вероятности возникновения состояния воды с теми или иными значениями максимума и ширины полосы [5]. Показано, что введение примесей (перекиси водорода, хлорида натрия) изменяет как эффективные значения параметров осцилляторов, так и эти распределения [4, 6].</p>
16:20-16:40 O-21	<p>Зайцева Юлия Вячеславовна</p> <p>Исследование спектров комбинационного рассеяния света везикул дейтерированного фосфолипида DPPC-d62 и его смесей Зайцева Ю.В.</p> <p>Дейтерирование одного из компонентов широко применяется для исследования</p>

	<p>комбинационного рассеяния света (КРС) от смеси фосфолипидов. Линии, соответствующие протонированному и дейтерированному липидам, в спектре КРС находятся на разных частотах, поэтому можно независимо анализировать поведение отдельных компонентов. В данной работе была уточнена интерпретация спектров КРС дейтерированного липида. Исследованы спектры КРС от везикул смесей DPPC и DPPC-d62 с различными концентрациями. Проанализировано температурное поведение линий, чувствительных к конформационному и латеральному беспорядку. Методом КРС исследовано фазовое состояние бислоя тройных смесей DPPC-d62 с DOPC и холестерина для различных соотношений компонентов.</p> <p>Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №19-12-00127.</p>
16:40-17:00 O-22	<p>Шамаева Дарья Владимировна</p> <p>Исследование фазовой тройной диаграммы DOPC-DPPC(d62)-Chol методом картирования КРС</p> <p>Шамаева Д.В., Окотруб К.А., Суровцев Н.В.</p> <p>Фосфолипиды являются одним из наиболее распространенных компонентов мембран биологических клеток. В сложных по составу смесях фосфолипидов, в т.ч. биологических мембранах, могут формироваться фазы разного химического состава. Спектроскопия КРС является перспективным подходом для исследования неоднородностей химического состава и конформационного состояния фосфолипидов. В этой работе мы применили метод КРС картирования для изучения фазовой диаграммы сухих и гидратированных планарных структур тройной смеси ненасыщенного липида DOPC (1,2-диолеоил-sn-глицеро-3-фосфохолин), дейтерированного насыщенного липида DPPC(d62) (1,2-дипальмитоил-sn-глицеро-3-фосфохолин) и холестерина (Chol). Обнаружено разделение на домены двух фаз разного химического состава. Сделана оценка локального химического состава доменов. Построены диаграммы фазового разделения образцов с разными концентрационными долями компонентов. Показано, что гидратация оказывает сильное влияние на фазовое разделение липидов. Результаты работы демонстрируют возможности метода картирования КРС применительно к исследованию фазового разделения в мембранах.</p>
17:00-17:20 O-23	<p>Слатинская Ольга Вадимовна</p> <p>Изменение конформации гема и глобина гемоглобина при нормобарической гипоксии в эритроцитах человека</p> <p>Слатинская О.В., Лунева О.Г., Деев Л.И., Максимов Г.В.</p> <p>Конформация гема и глобина гемоглобина эритроцита и в растворе имеет разную динамику изменений в физиологическом диапазоне температур 22–38 °С и различном парциальном давлении кислорода. В обоих случаях, при нормобарической гипоксии меняется конформация гемоглобина за счет увеличения вклада пиррольных колец гема и валентных колебаний групп винилов, также выявлены изменения вклада валентных симметричных и ассиметричных колебаний СН₂- и СН₃-радикалов аминокислот глобина. Однако, данные изменения носят разный характер и могут быть связаны с системами внутриклеточной регуляции эритроцитов.</p>
17:20-17:40 O-24	<p>Зюбин Андрей Юрьевич</p> <p>Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния тромбоцитов при проведении антитромбоцитарной терапии</p> <p>Демишкевич Е.А., Зюбин А.Ю., Рафальский В.В., Моисеева К.И., Матвеева К.И., Цибульникова А.В., Самусев И.Г.</p> <p>В настоящей работе представлены результаты по использованию оптических сенсоров Au/Ti и их апробация их для целей исследований эффективности антитромбоцитарной терапии. В частности, в работе были получены новые фундаментальные результаты о фотопроцессах и закономерностях, характеризующих изменения структуры тромбоцита человека, на основе анализа его спектральных данных in vitro, при его активации так и без нее. С применением наночастиц золота, полученных методом фемтосекундной лазерной абляции и адсорбированных на анодированную титановую поверхность и последующих оптических измерений были оценены спектральные характеристики тромбоцитов до и после действия антитромбоцитарного препарата – клопидогреля.</p>
17:40-18:00 O-25	<p>Сараева Карина Павловна</p> <p>Применение спектроскопии комбинационного рассеяния света для исследования</p>

	<p>однослойных везикул DOPC/DPPC-d62 Сараева К.П., Окотруб К.А., Суровцев Н.В.</p> <p>В данной работе представлены результаты исследования влияния процесса экструдирования на состав однослойных двухкомпонентных фосфолипидных везикул и исследован эффект нагрева везикул, захваченных оптическим пинцетом, на основе анализа спектров комбинационного рассеяния света. В качестве объектов исследования использовались образцы многослойных и однослойных, диаметром 1 мкм, везикул смеси DPPC/DPPC-d62 (1:1), склонной к фазовому разделению, и гомогенной смеси DOPC/DPPC-d62 (1:2). В ходе работы проведено поэтапное сравнение состава образцов, полученных из разных смесей. Для многослойных везикул разброс состава DOPC/DPPC-d62 превысил разброс состава в контрольном образце DPPC/DPPC-d62. Выявлено различие в составе многослойных и однослойных везикул, таким образом выявлено влияние процесса экструдирования на состав получаемых двухкомпонентных образцов. Оценка нагрева везикул, захваченных лазерным пучком, составила ~4К.</p>
18:00-18:20 О-26	<p>Черкасова Ольга Павловна</p> <p>Изучение плазмы крови мышей в динамике развития глиобластомы с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света Черкасова О.П., Манькова А.А., Вражнов Д.А., Кистенев Ю.В.</p> <p>Глиобластома является одним из самых опасных видов злокачественных опухолей головного мозга. Актуальным и важным является выявление онкологии на ранней стадии и разработка неинвазивных и малоинвазивных методов контроля эффективности лечения. Цель работы состояла в изучении плазмы крови мышей в динамике развития глиобластомы с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и технологии машинного обучения. Были исследованы спектры КРС плазмы крови мышей через 1, 2, 3 и 4 недели после привития опухоли и показано, что интенсивность ряда спектральных особенностей изменяется в зависимости от срока. Так, интенсивность полосы амид I в спектрах КРС уменьшается в динамике развития глиобластомы. Методы машинного обучения позволили провести анализ по разделению экспериментальных и контрольных групп по показателям чувствительности, специфичности и точности. Наилучшие модели были получены для срока 3 недели после инокуляции клеток опухоли, когда наблюдается наибольшее различие в спектрах КРС контрольных и экспериментальных животных. Был проведен анализ матриц нагрузок и определены наиболее информативные частоты, связанные с определенными метаболитами, концентрация которых изменяется в крови в динамике роста опухоли.</p>
18:30	ПОСТЕРНАЯ СЕКЦИЯ

Среда, 25 августа

Утреннее заседание

9:30-10:10 ПЛ-6	<p>Павел Юрьевич Плечов</p> <p>Количественные методы определения содержания воды в природных стеклах по спектрам комбинационного рассеяния</p> <p>Содержание воды является одним из ключевых параметров магм, влияющим как на температуру кристаллизации минералов, так и на реологические свойства магмы. Спектроскопия комбинационного рассеяния - очень перспективный инструмент, позволяющий проводить прямые определения воды как в закалочном стекле горных пород, так и в стекле расплавных включений. В последние годы были предложены десятки методик определения воды в стеклах, но каждая из них имеет существенные ограничения и не является универсальной. Нами разработаны методики определения воды для широкого спектра составов природных стекол, которые хорошо согласуются с другими более сложными и трудоемкими способами определения. Для калибровки методики определения воды и полимеризованных алюмосиликатных стекол мы используем параметр NBO/T, отражающий степень полимеризации алюмосиликатных расплавов. Отличие данной методики от ранее предложенных заключается в использовании полной деконволюции исходного спектра, автоматическом выделении фона и аппаратной функции и нормированию колебательных мод 3200-3600 см⁻¹ к сумме колебаний силикатного каркаса. Такой подход позволяет существенно понизить погрешность измерений и использовать универсальную калибровку для широкого</p>
--------------------	---

	спектра природных стекол. Методика опробована на ряде вулканических объектов Камчатки и Курильских островов (Голбачик, Курильское озеро, вулкан Ветровой и др.).
10:10-10:40 С-5	Понкратов Кирилл Владимирович (Renishaw) Доклад посвящается новому спектрометру Virsa производства компании Renishaw (Великобритания). Рассматриваются возможные характеристики, конфигурации и области применения с примерами получаемых данных. На стенде компании будет работать демо-прибор Virsa с лазерами 532 и 785 нм, где можно будет проанализировать образцы.
10:40-10:50	КОФЕ-БРЕЙК
Рассеяние Мандельштама – Бриллюэна	
10:50-11:10 О-27	Будет объявлено позже
11:10-11:30 О-28	Садовников Александр Владимирович Управляемый спин-волновой транспорт в 3D структурах магноники Садовников А.В., Бегинин Е.Н., Никитов С.А. В докладе представлены результаты исследований в актуальной и быстро развивающейся области исследования спин-волновых возбуждений в магнитных микро- и наноструктурах – магнонике и магнонной стрейнтронике. Рассмотрено применение экспериментального метода Мандельштам-Бриллюэновской спектроскопии, методов микроволновой спектроскопии, метода широкополосного ферромагнитного резонанса и численных методов микромагнитного моделирования для исследования динамики спин-волновых возбуждений в планарных и 3D магнитных структурах. Приведены результаты исследования латеральных, нерегулярных и композитных магнитных микроструктур.
11:30-11:50 О-29	Добрынина Елизавета Александровна Изучение водных растворов солей из ряда Гофмейстера методами оптической спектроскопии Добрынина Е.А., Зыкова В.А. Характеристики водного раствора изменяются при добавлении солей, что влияет на свойства растворенных в воде биомолекул, в частности, на стабильность белков. В соответствии с влиянием ионов на свойства белков их разделили на космотропы (стабилизируют белок) и хаотропы (приводят к денатурации белка). Эти эффекты связывают с изменением ионами сетки водородных связей воды, однако, механизм этого явления все еще не до конца изучен. Настоящая работа посвящена исследованию влияния различных солей на сетку водородных связей воды путем наблюдения за вязкоупругими свойствами раствора методом рассеяния Мандельштама-Бриллюэна и изменением спектральной полосы ОН-колебаний спектров комбинационного рассеяния света. Объектами исследования являются водные растворы солей различных концентраций, состоящие как из космотропных, так и из хаотропных ионов. В ходе работы было установлено, что скорость звука в растворе возрастает при добавлении соли, причем для космотропов изменения скорости звука более существенны, чем для хаотропов. Из анализа деполяризованного спектра КРС, характеризующего силу водородных связей воды, было показано, что космотропные ионы, которые структурируют сетку водородных связей воды, уширяют спектр ОН-полосы по сравнению со случаем воды, что свидетельствует об усилении Н-связей, в то время как при добавлении хаотропов, которые ослабляют Н-связи, эта линия сужается. Полученные результаты подтверждают различное влияние космотропных и хаотропных ионов на сетку водородных связей воды.
11:50-12:10 О-30	Губанов Владислав Андреевич Исследование фазового распространения ПМСВ в пленке ЖИГ методом БЛС Губанов В.А., Бессонов В.Д., Садовников А.В. Создание устройств на принципах магноники представляет большой интерес для развития области хранения и обработки информационных сигналов. При помощи установки Мандельштам-Бриллюэновской спектроскопии рассеяния света (БЛС) возможно детектирование распространение спиновой волны (СВ) – прецессии

	<p>намагниченности под воздействием СВЧ сигнала. В классической системе БЛС детектируется интенсивность I БЛС СВ. При добавлении в систему БЛС оптического фазового модулятора можно разрешить фазу распространяющейся СВ. В работе методом БЛС будет исследовано формирование фазового фронта спиновой волны в пленке ЖИГ. При помощи микромагнитного моделирования будет показано соответствие с экспериментальными данными, сравнены интенсивность и фаза СВ и выявлены оптимальные параметры для распространения СВ в пленке ЖИГ.</p>
12:10-12:30 О-31	<p>Зыкова Валерия Андреевна</p> <p>Спектроскопия рассеяния Мандельштама-Бриллюэна для характеристики ксеногенных коллагенсодержащих биоматериалов Зыкова В.А., Суровцев Н.В., Журавлева И.Ю.</p> <p>Ксеногенные коллагенсодержащие биоматериалы широко применяются в качестве сердечно-сосудистых протезов при васкулярных операциях на сердце. На этапе предимплантационной подготовки биопротезы подвергаются воздействию стабилизирующих растворов с целью повышения их гемосовместимости и срока службы. При этом подбор протокола обработки, обеспечивающего оптимальные характеристики имплантируемой ткани, остается актуальной научной задачей. В настоящее время применяются различные экспериментальные методы, позволяющие описать свойства коллагенсодержащих материалов как на молекулярном уровне (методы инфракрасной спектроскопии), так и на макроуровне (приложение квазистатических механических напряжений). Информация о мезоскопических свойствах материала на уровне сотен нанометров и о соответствующем вязкоупругом модуле в гигагерцовом частотном диапазоне также могла бы быть перспективной для понимания особенностей материала и влияния на него стабилизирующих сшивок. В настоящей работе изучаются возможности спектроскопии рассеяния Мандельштама-Бриллюэна для характеристики мезоскопических свойств ксеногенных коллагенсодержащих биоматериалов на основании исследования бычьей яремной вены и свиного перикарда. Спектры рассеяния Мандельштала-Бриллюэна были измерены для гидратированных и высушенных образцов. Проведение поляризационных измерений позволило определить чувствительность наблюдаемых линий к поляризационным условиям. Детальное исследование дегидратированного образца вены выявило наличие крупномасштабных (доли миллиметра) неоднородностей в материале, предположительно являющихся вариациями долей коллагена и эластина в биологической ткани. Ориентационные измерения, а также исследование образцов, взятых от различных голов скота, позволили сделать вывод о влиянии донорской особи и ориентации волокон на параметры измеряемого спектра.</p>
12:30-13:00 С-6	<p>Высоких Юрий Евгеньевич (ООО «ЭМТИОН»)</p> <p>Современные методы исследования на базе спектроскопии комбинационного рассеяния</p>
13:00-14:00	ОБЕД

Вечернее заседание

14:00-14:40 ПЛ-7	<p>Корсаков Андрей Викторович</p> <p>КР-картирование для изучения структурных и химических неоднородностей в минералах Корсаков А.В., Мусяиченко К.А.</p> <p>КР-картирование флюидных/расплавных включений в породообразующих и аксессуарных минералах, а также самих «минералов-хозяев» становится одним из наиболее общих подходов в современной минералогии и петрологии. В данной работе приведены примеры, демонстрирующие преимущества КР-картирования при изучении состава и структурных параметров минералов.</p>
<i>Комбинационное рассеяние в минеральном веществе для решения задач минералогии, геммологии, петрологии, геотермометрии</i>	
14:40-15:00 О-32	Панкрушина Елизавета Алексеевна

	<p>Особенности кристаллохимии и физики ряда минералов и их синтетических аналогов по данным оптической спектроскопии и первопринципных <i>ab initio</i> расчетов (Доклад по теме диссертационной работы на соискание степени кандидата химических наук).</p>
<p>15:00-15:20 О-33</p>	<p>Резвухина Ольга Владимировна ОНЛАЙН</p> <p>КР-исследование включений в цирконе и рутиле из алмазоносных кианитовых гнейсов участка Барчинский (Кокчетавский массив) Резвухина О.В., Резвухин Д.И., Замятин Д.А., Корсаков А.В.</p> <p>В рамках данной работы проведены детальные КР-исследования акцессорных минералов алмазоносных кианитовых гнейсов участка Барчинский (Кокчетавский массив). Исследуемые кианитовые гнейсы содержат крупные порфиробласты кианита и граната, окруженные кварц-полевошпат-слюдяным матриксом. В кианитовых гнейсах диагностирован широкий спектр акцессорных минералов: циркон, рутил, графит, апатит, монацит, турмалин, пирротин, алланит, дюмортьерит, а также высокобарические фазы – алмаз и коэсит. Особое внимание было уделено циркону и рутилу, поскольку данные минералы являются минералами-«контейнерами», способными сохранять реликтовые минеральные ассоциации с различных этапов метаморфизма. КР-исследование циркона показало наличие в нем нескольких доменов, различающихся как по набору минеральных включений (кварц, графит, коэсит, алмаз, рутил, гранат), так и по параметрам (интенсивность, полуширина) основного пика (1008 см^{-1}) в КР-спектре циркона. Методом КР-спектроскопии в рутиле идентифицированы многочисленные нескрытые минеральные и флюидные включения. Среди минеральных включений преобладают графит, гранат и фторapatит; включения алмаза, Mg-кальцита, мусковита и цинксоодержащего ставролита встречаются реже. Флюидные включения в рутиле состоят из CO_2.</p>
<p>15:20-15:40 О-34</p>	<p>Горяйнов Сергей Владимирович ОНЛАЙН</p> <p>КР спектры импактных алмазов Попигайского метеоритного кратера Горяйнов С.В., Афанасьев В.П.</p> <p>Якутиты являются импактными алмазами, выброшенными из центра кратера Попигай на 500–700 км. Якутиты отличаются от россыпных алмазов, схожих с кимберлитовыми алмазами. Методом КР показано, что якутиты и долганиты – попигайские импактные алмазы, образовавшиеся в переплавленных породах, имеют ряд общих характеристик, что доказывает их общее происхождение. Обе группы демонстрируют уширенную асимметричную алмазную полосу КР первого порядка при $1325\text{--}1333\text{ см}^{-1}$, форма которой связана с наличием неупорядоченно чередующихся кубических и гексагональных слоев sp^3-упаковок (или смеси алмаза-лонсдейлита в другой модели разупорядочения). Наблюдается отличие в КР спектрах якутитов и долганитов, что вызвано их различными условиями возникновения. Якутиты подвергались экстремальным нагрузкам в момент взрыва в центре кратера, тогда как попигайские долганиты Скального месторождения образовались в 30 км от центра взрыва при меньших Р-Т. Это проявляется в КР спектрах якутитов в виде повышенного содержания алмаза в смеси алмаз-лонсдейлит и в росте волнового числа алмазной полосы на $1\text{--}1.5\text{ см}^{-1}$, что говорит об уплотнении частично разупорядоченной sp^3-структуры.</p>
<p>15:40-16:00 О-35</p>	<p>Карпутин Иван Сергеевич</p> <p>Идентификация полиминеральных включений в хромистом пиропе из дайки “Алданская” методом КР-спектроскопии Карпутин И.С., Резвухин Д.И., Николенко Е.И., Резвухина О.В.</p> <p>Данная работа посвящена изучению полиминеральных включений в ксенокристаллах хромистого пироба из дайки “Алданская” методом КР-спектроскопии для получения систематических минералогических данных о глубинных парагенезисах литосферной мантии под Чомполинским полем лампрофиров, Алданский щит, Россия. В работе продемонстрирована возможность применения метода КР-спектроскопии к комплексным ассоциациям минералов-включений в хромистом пиропе, которые могут легко разрушаться при выведении на поверхность. В результате аналитических исследований была выявлена богатая ассоциация минеральных включений в пиропе,</p>

	<p>состоящая из оксидов (хромит-магнезиохромит, рутил, пикроильменит, минерал группы кричтонита), безводных силикатов (форстерит, энстатит, хромдиоксид), водосодержащих силикатов (Ca-Na амфибол, флогопит, тальк), сульфидов (пентландит, миллерит, халькопирит, Cu-Ni-Fe-содержащий сульфид), карбонатов (магнезит, кальцит), апатита и графита. Были установлены закономерности в расположениях пиков интенсивности КР-спектров. Для безводных силикатных минералов присущи ярко-выраженные пики на типичных для данных минералов волновых числах, для водосодержащих силикатов характерны пики структурной воды: для талька – 3677 см^{-1} и для флогопита – 3720 см^{-1}, для оксидов характерны большие фоновые шумы и сглаженные крупные пики, сульфиды дают небольшие пики в области до 500 см^{-1}, карбонатные минералы имеют симметричные валентные колебания $(\text{CO}_3)^{2-}$ группы, апатит – колебания $(\text{PO}_4)^{3-}$, спектры графита характеризуются двумя пиками на 1350 см^{-1} и 1579 см^{-1}. Ассоциация включений в хромистых пиропсах из дайки “Алданская” отличается от других мировых проявлений большим разнообразием минералогии, а также наличием графита и первичного талька. Также данная ассоциация обогащена несовместимыми элементами и летучими компонентами, что свидетельствует о происхождении из метасоматического флюида/расплава. Применение метода КР-спектроскопии в комплексе с рентгеноспектральным микроанализом позволяет получить существенно более информативные результаты изучения минеральных ассоциаций в подобных образцах, чем применение каждого из этих методов по отдельности.</p>
16:00-16:10	КОФЕ-БРЕЙК
16:10-16:30 О-36	<p>Бородина Ульяна Олеговна</p> <p>Поведение гидроканкринита $\text{Na}_6\text{Ca}_2[(\text{OH},\text{CO}_3)_2\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ при высоких P-T параметрах Бородина У.О., Горайнов С.В., Крылов А.С., Семерикова А.И., Крылова С.Н., Лихачёва А.Ю.</p> <p>Методом КР спектроскопии <i>in situ</i> изучено поведение синтетического карбонато-алюмосиликата гидроканкринита $\text{Na}_6\text{Ca}_2[(\text{OH},\text{CO}_3)_2\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, сжатого в водной среде до 1.6 ГПа при 500 °С. Обнаружено, что гидроканкринит сохраняет кристаллическую структуру до 1.5 ГПа, 300 °С, затем с ростом температуры аморфизуется, частично растворяется и разлагается на два основных продукта: нефелин и шеелито-подобное соединение.</p>
<i>Практические приложения комбинационного рассеяния в материаловедении, науках о жизни и о Земле</i>	
16:30-16:50 О-37	<p>Костенко Матвей Александрович</p> <p>Применение спектроскопии комбинационного рассеяния для контроля концентрации метана в атмосферном воздухе Петров Д.В., Костенко М.А., Матросов И.И.</p> <p>Представлено описание разработанного КР-спектрометра, предназначенного для регистрации спектров газовых сред. Для обеспечения требуемой интенсивности сигналов использована многопроходная оптическая система и сжатие пробы до 25 атм. Представлен метод определения концентрации метана, где в качестве опорного сигнала использована интенсивность обертона кислорода. Проведенная экспериментальная апробация на примере анализа набора образцов атмосферного воздуха показала, что разработанный прибор позволяет измерять содержание метана с погрешностью менее 100 ppb.</p> <p>Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-77-10046.</p>
16:50-17:10 О-38	<p>Кундалевич Анна Анатольевна</p> <p>Гигантское комбинационное рассеяния света в исследованиях структуры Балтийского янтаря Кундалевич А.А., Зюбин А.Ю., Матвеева К.И., Самусев И.Г.</p> <p>В представляемой работе отражены результаты исследований КР-спектроскопии вытяжки ароматических соединений балтийского янтаря в комплексе с наночастицами серебра размером 44 нм.</p>
17:10-17:30 О-39	Находнова Анастасия Васильевна

	<p>Применение рамановской спектроскопии для контроля температурных полей керна печи Ачесона Находнова А.В., Самойлов В.М., Фатеева М.А., Гончарова Н.Н.</p> <p>Целью данной работы являлось обоснование применимости рамановской спектроскопии образцов-свидетелей на основе углеродного волокна (УВ) для контроля температурных полей керна печи Ачесона. Полученные результаты позволили уточнить градиент температур по объёму керна, что является ценной информацией для корректировки технологического процесса с целью получения качественных электрощётчных блоков.</p>
17:30-18:00	ПОДВЕДЕНИЕ ИТОГОВ И ЗАКРЫТИЕ СЕМИНАРА
18:00	ТОВАРИЩЕСКИЙ УЖИН

СТЕНДОВАЯ СЕКЦИЯ

24 августа с 18:30

По-1	<p>Адищев С.В, Суровцев Н.В.</p> <p>Исследование температурной зависимости скорости звука в мембране многослойных везикул методом рассеяния Мандельштама-Бриллюэна Предлагаемая работа посвящена исследованию суспензий многослойных везикул фосфолипида DPPC методом рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ). В работе были получены спектры РМБ от образцов с разной степенью гидратации в широком температурном диапазоне (от -190 °С до 70 °С). Из измеренных спектров была определена температурная зависимость скорости звука в мембране фосфолипидных везикул.</p>
По-2	<p>Бедин С.А., Кожина Е.П., Андреев С.Н., Наумов А.В.</p> <p>Горячие точки на SERS-подложках, изготовленных методом шаблонного синтеза В данной работе представлен простой подход к процедуре изготовления SERS-подложек с Ag-нанопроволокой (NW) с использованием метода электроосаждения с помощью шаблона на коммерческих трековых мембранах (ТМ). Длину Ag-NW можно легко изменять, контролируя время осаждения. После щелочного травления ТМ Ag-НП длиной 1.6 мкм и диаметром 100 нм наклоняются к своим ближайшим соседям, образуя пучки, тем самым создавая самоорганизующиеся горячие точки в области между остриями Ag-НП. Было показано, что при нанесении тестового вещества на влажные подложки, до момента агломерации НП, интенсивность SERS сигнала будет больше в среднем на 30%.</p>
По-3	<p>Григорьев М.В., Крылова С.Н., Чернышев В.А., Русейкина А.В.</p> <p>Спектроскопия комбинационного рассеяния соединения SrTmCuS₃ КР спектры соединения SrTmCuS₃ получены в геометрии обратного рассеяния с использованием КР спектрометра Jobin Yvon T64000 с тремя монохроматорами, работающего в режиме вычитания, и ПЗС-матрицы, охлаждаемой до 140 К. В качестве источника возбуждающего света использовался одномодовый криптон 647.09 нм лазера Lexel Kr+. Фактор-групповой анализ структуры SrTmCuS₃ проведен для определения симметрии мод с использованием локальной симметрии всех позиций атомов. 15 КР-активных мод включают 5 мод A_g, 5 мод B_{3g}, 4 моды B_{1g} и моду B_{2g}. Согласно теоретико-групповому анализу, атомы тулия не участвуют в КР модах. КР моды с частотами ниже 150 см⁻¹ представляют собой колебания решетки. Моды с частотами выше 150 см⁻¹ представляют собой внутренние колебания групп атомов. Проведены ab initio расчеты кристаллической структуры и фононного спектра SrTmCuS₃ в рамках DFT с функционалом B3LYP. Степень участия иона в моде оценена на основе анализа векторов смещения, полученных при ab initio расчете. Согласно расчетам, ионы стронция и меди существенно участвуют в модах с частотами до ~ 160 см⁻¹. Наибольшее участие меди проявляется в КР модах ~ 80 см⁻¹ (B_{1g}), 81 см⁻¹ (A_g), 117 см⁻¹ (B_{2g}). Сера участвует во всех модах, причем, активно в модах с частотами выше 180 см⁻¹.</p>
По-4	<p>Окотруб К.А., Шамаева Д.В., Суровцев Н.В.</p> <p>Спектры комбинационного рассеяния света дейтерированных углеводородов применяемых в качестве изотопических меток Спектроскопия комбинационного рассеяния света активно применяется для изучения липидомы биологических клеток. Однако метод КРС страдает ограниченной способностью различать разные липиды. В последние годы меченые изотопами молекулы все чаще используются для улучшения разрешающей способности метода КРС при исследовании близких по структуре соединений в биологических образцах. В докладе представлено исследование спектров КРС полностью дейтерированной стеариновой кислоты (стеариновая-d35), полудейтерированной олеиновой кислоты (олеиновая d-9), арахидоновой кислоты с дейтерированными метиновыми группами (арахидоновая-d8), а также их протонированных аналогов. Чтобы выявить особенности изотопически смещенных линий комбинационного рассеяния, были исследованы поляризационные свойства и температурные зависимости валентных CD колебаний. Показана чувствительность линий КРС метиновых, метиленовых и метильных групп к переходу между упорядоченным и разупорядоченным конформационным состояниями углеводородных цепочек. Показано как изотопически смещенные линии комбинационного рассеяния могут быть использованы для получения информации об ориентации дейтерированных меток.</p>
По-5	<p>Кожина Е.П., Бедин С.А., Андреев С.Н., Наумов А.В.</p>

	<p>Метаповерхности для SERS-спектроскопии с оптимизированными дендритными наноструктурами на основе трековых мембран</p> <p>В работе были получены метаповерхности с дендритными наноструктурами (НС) ветвистой формы. Было показано, что, при увеличении значения тока в процессе осаждения, иголки на ветвях дендритов делают переход от слаборазвитых к более тонким ветвящимся. Посредством моделирования было показано, что локальные электрические поля при этом концентрируются не только на остриях ветвей, но также и в областях между ними, что позволяет использовать такие метаповерхности для усиления рамановского сигнала (SERS-спектроскопия) в широком диапазоне длин волн. Путем регистрации SERS-сигнала красителя малахитового зелёного было продемонстрировано наличие оптимальной формы ветвей дендритов.</p>
По-6	<p>Чернышев В.А., Глухов К.И.</p> <p>Фононный спектр редкоземельных станнатов $R_2Sn_2O_7$ ($R = La-Lu, Y$): ab initio расчет</p> <p>Впервые проведено ab initio исследование структуры и динамики решетки ряда редкоземельных станнатов $R_2Sn_2O_7$ ($R = La-Lu, Y$). Рассчитан КР спектр, проведено отнесение колебаний. Из анализа векторов смещений, полученных при ab initio расчете, определена степень участия ионов в фононных модах. Определены моды с абсолютным или преимущественным участием кислорода в позиции 48f, характеризуемой смещением x.</p>
По-7	<p>Марченко А.В., Милёхин А.Г., Курусь Н.Н.</p> <p>Эмиссия света монослоями дисульфида молибдена</p> <p>Проявление уникальных, отличающихся от объёмных аналогов структурных, оптических и электронных свойств двумерных материалов привлекает большое внимание научного сообщества в силу перспективности применения данных веществ в полупроводниковой промышленности. При помощи методов оптической микроскопии, атомно-силовой микроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и фотолюминесценции (ФЛ) были изучены полученные методом химического осаждения из газовой фазы образцы тонких плёнок дисульфида молибдена MoS_2 на кремниевой подложке. Работа проведена на установке XPloa PLUS в лаборатории ближнепольной оптической спектроскопии и наносенсорике ИФП СО РАН. Были получены оптические изображения и АСМ-изображения островков тонких плёнок монослоёв MoS_2, произведена оценка их характерных латеральных размеров и толщины монослойных покрытий. Были построены карты ФЛ и КРС монослоёв MoS_2, изучена зависимость частоты фононных мод КРС MoS_2 от числа монослоёв. Обнаружено усиление интенсивности моды КРС оптического фона кремния бислоем дисульфида молибдена. Выдвинута гипотеза об интерференционном усилении комбинационного рассеяния света кремниевой подложкой.</p>
По-8	<p>Курусь Н.Н., Небогатикова Н.А., Милёхин А.Г.</p> <p>Плазмон-усиленное комбинационное рассеяние света графеном</p> <p>Использование наноструктурированных металлических подложек позволяет добиться гигантского усиления сигнала КРС (ГКРС) вследствие возникновения локализованного плазмонного резонанса. Подобные структуры широко применяются в исследовании ГКРС органическими молекулами и полупроводниковыми нанокристаллами. В то же время число работ, посвященных исследованию плазмон-усиленного КРС графеном и графеноподобными материалами, весьма ограничено. Данная работа посвящена исследованию плазмон-усиленного КРС пленкой мультиграфена толщиной 10 монослоев, расположенной на плазмонной подложке в виде массивов золотых нанокластеров различного диаметра. Получено усиление интенсивности G-моды графена в 50 раз. Установлено, что усиление КРС имеет резонансный характер. С увеличением длины волны возбуждающего излучения происходит сдвиг резонансных условий в сторону большего диаметра кластеров.</p>
По-9	<p>Герасимова Ю.В., Александровский А.С., Лапташ Н.М., Герасимов М.А., Крылов А.С., Втюрин А.Н.</p> <p>Спектроскопия комбинационного рассеяния и электронных возбуждений структурно неупорядоченного кристалла $FeTiF_6 \cdot 6H_2O$</p> <p>Исследованы спектры кристалла $FeTiF_6 \cdot 6H_2O$ с разупорядоченной при комнатной температуре структурой в спектральных диапазонах колебательных и электронных возбуждений. Измерены угловые зависимости спектров КР при вращении кристалла. Определена симметрия отдельных мод в спектре КР. Выполнено соотнесение спектральных линий с неприводимыми представлениями соответствующих групп симметрии. Исследование температурного поведения спектров КР показало, что, несмотря на то, что температура фазового перехода из тригональной</p>

	<p>в моноклинную фазу составляет 270 К, трансформация спектра КР становится заметной лишь ниже 100 К, вследствие того, что расщепление линий невелико и становится заметным вследствие сужения спектральных линий при охлаждении. Фазовый переход в $\text{FeTiF}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ связан с поворотом и упорядочением комплекса $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, в то время как подрешётка $[\text{TiF}_6]^{2-}$ не играет при этом существенной роли. Спектр поглощения в ближней ИК и видимой областях проанализирован в модели Танабэ-Сугано для электронной конфигурации d^6. В спектре наблюдается одиночная линия разрешённого по спину перехода иона Fe^{2+}, находящегося в октаэдрическом окружении ионов кислорода, в то время как признаки её расщепления вследствие эффекта Яна-Теллера отсутствуют. Остальные полосы в указанном выше спектре интерпретированы как переходы в триплетные состояния. Хорошее согласие между экспериментальными и расчётными положениями энергетических уровней электронных возбуждений получено при силе кристаллического поля $Dq = 490 \text{ см}^{-1}$ и параметрах Рака $B = 340 \text{ см}^{-1}$ и $C = 1904 \text{ см}^{-1}$ ($Dq/B = 1.44$). Указанные значения параметров Рака гораздо меньше, чем для свободного иона, что можно связать с разупорядоченной структурой либо наличием ионов водорода во второй координационной сфере.</p>
По-10	<p>Смирнов А.Н., Шевчук А.И., Стрельников А.С., Одинцова О.В., Соловьева Е.В.</p> <p>Молекулярные линкеры на основе толанов: гигантское комбинационное рассеяние и квантово-химическое моделирование</p> <p>В работе приведены экспериментальные и теоретические результаты исследований гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) производных толана (также известных как дифенилацетилены). Экспериментальная ГКР-система представляет собой плазмонные металлические наночастицы в виде гидрозоля, модифицированные толанами. Теоретическое моделирование заключается в квантово-химическом расчете колебательного спектра молекул, координированных металлическим кластером. Данные результаты являются важным составным звеном в серии исследований нашей научной группы, направленных на получение оптически активных наноматериалов, принцип работы которых основан на явлениях усиления поверхностью и «горячих точек». Последнее достигается за счет способности бифункциональных соединений служить молекулярными линкерами. Экспериментальные данные соотнесены с соответствующими модельными системами, описывающими два возможных режима адсорбции толанов (односторонняя или мостиковая адсорбция). Моделирование выполнено с использованием гибридного функционала B3LYP, основные электроны атомов металла аппроксимированы псевдопотенциалом базиса Lanl2DZ, влияние среды в гидрозолье учтено с помощью модели поляризованного континуума. На основании полученных результатов охарактеризованы особенности и перспективы использования толанов для модификации металлических наночастиц.</p>
По-11	<p>Головкина Е.В., Втюрин А.Н., Senkovska I., Крылов А.С.</p> <p>Угловые зависимости поляризованных спектров КРС металлоорганических каркасов</p> <p>Для изучения неориентированных кристаллических веществ представлена методика снятия угловых зависимостей спектров, в которой стало бы возможным выявление поведения линий и симметрии колебаний молекул кристаллов. В работе проведено исследование металлоорганических каркасов DUT-8(Ni), синтезированных в Дрезденском техническом университете, кристаллы которых имеют характерный размер 0.1 мм. Сопоставляя результаты с модельными расчетами, представляется возможность распознать группу симметрии колебаний кристалла, а также выяснить отличительные признаки спектра различных фаз металлоорганических каркасов.</p>
По-12	<p>Басалаева Л.С., Дуда Т.В., Васильев Р.Б. и Милехин А.Г.</p> <p>Изучение фононного спектра нанопластинок ZnSe с помощью КРС и ИК спектроскопии</p> <p>В данной работе с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и ИК спектроскопии исследован фононный спектр нанопластинок ZnSe, синтезированных методом коллоидной химии. Изучались ИК спектры и спектры КРС в структурах с нанопластинками ZnSe, имеющими различную толщину (1-4 монослоя), измерения проводились при комнатной температуре.</p>
По-13	<p>Суровцев Н.В.</p> <p>Низкочастотные спектры комбинационного рассеяния света нанометровых фосфолипидных мембран</p> <p>В докладе представлены результаты исследований низкочастотного ($5\text{-}100 \text{ см}^{-1}$) комбинационного рассеяния света (КРС) в фосфолипидных слоях. Фосфолипиды, являющиеся важным компонентом биологических мембран, формируют бимолекулярные слои толщиной</p>

	<p>около 5 нм. Получено, что собственные слоевые колебания мембран, частота которых определяется модулем упругости и толщиной мембраны, а также колебательные акустоподобные возбуждения, распространяющиеся вдоль липидного слоя, проявляются в низкочастотном спектре КРС фосфолипидных мембран. Будет обсуждено влияние фазового состояния, температуры, насыщенности фосфолипида и длины его углеводородного хвоста на параметры пиков, соответствующих слоевым модам. Чувствительность спектра КРС, отражающего плотность акустоподобных колебательных состояний, к упорядоченному или неупорядоченному фазовому состоянию будет сравнена с результатами измерений неупругого рассеяния нейтронов и синхротронного излучения. Работа поддержана грантом РФФИ No. 19-12-00127.</p>
По-14	<p>Бессонов В.Д., Телегин А.В., Теплов В.С.</p> <p>Процессы релаксации в плёнках железо-иттриевого граната Целью данной работы являлось экспериментальное исследование линейной и нелинейной пространственно-временной спин-волновой динамики процессов возбуждения и релаксации ферромагнитного резонанса в пленках ЖИГ с селекцией волновому вектору спиновых волн.</p>
По-15	<p>Салюлев А.Б., Вовкотруб Э.Г.</p> <p>Применение микроспектроскопии КРС для исследования взаимодействия компонентов солевых систем Метод микроспектроскопии КРС положен в основу разработанной нами методики, позволяющей достаточно быстро и просто получать дополнительную информацию о характере взаимодействия компонентов в солевых системах, содержащих легколетучие реакционноспособные вещества, и о структуре образующихся двойных (комплексных) соединений. Созданная методика вещественного анализа апробирована при структурных и аналитических исследованиях <i>in situ</i> некоторых галогенидов и их смесей (преимущественно хлоридов).</p>
По-16	<p>Nasara R.N., Слаутин Б.Н., Govindarajan K., Lin S.-K., Пелегов Д.В.</p> <p>Особенности интерпретации нехарактеристических пиков на примере статистического анализа спектров КРС титаната лития Спектры комбинационного рассеяния света могут содержать как характеристические пики, соответствующие колебаниям, специфичным для исследуемого материала, так и дополнительные пики, природа которых до конца не ясна. Эти дополнительные пики могут быть вполне типичны для материала, но их интерпретация обычно довольно ограничена. В данной работе используется подход статистического анализа параметров локальных спектров, полученных не в одной, в ста точках образца. При помощи такого подхода на примере титаната лития, легированного хромом, показано что большая часть дополнительных пиков, наблюдаемых для титаната лития, может быть интерпретирована как колебательные моды, связанные с дефектностью материала.</p>
По-17	<p>Телегин А.В., Бессонов В.Д., Калашникова А.М., Хохлов А.Е.</p> <p>Мандельштам–Бриллюэновская спектроскопия оптически-возбужденных спиновых волн Создана оригинальная комбинированная установка, и на примере тонкопленочных магнитных гетероструктур опробована методика Мандельштам–Бриллюэновской спектроскопии спиновых волн, возбужденных с помощью фемтосекундных лазерных импульсов.</p>
По-18	<p>Слатинская О.В., Лунева О.Г., Деев Л.И., Максимов Г.В.</p> <p>Изменение конформации гема и глобина в эритроците и растворе при изменении парциального давления кислорода Методом спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) установлено, что конформация гема и глобина гемоглобина (Гб) при p_{O_2} меняется и различна в клетке и в растворе. В клетке конформация гема различно меняется в области 0–15 мм рт.ст., в области 15–60 мм рт.ст. и в области 70–120 мм рт.ст. При изменении p_{O_2} конформация гема, характеризующая сродство к лигандам, снижается и аналогична как для гема Гб в эритроците, так и Гб в растворе, но изменения конформации гема, характеризующие способность Гб образовывать комплексы с NO в растворе и в клетке, различны. В клетке, при увеличении p_{O_2} изменения конформации глобина Гб сопровождаются увеличением вклада колебаний Н-метиновых групп аминокислот (при 40–50 мм рт.ст.) и симметричных концевых метиленовых групп (области 40–60 мм рт.ст.). В растворе, при увеличении p_{O_2} изменение конформации глобина Гб обусловлено обратимым снижением вклада симметричных колебаний СН-метиленовых групп аминокислот и колебаний Н-метиновых групп аминокислот Гб.</p>

По-19	<p>Неволина Л.А., Королева О.Н. Структура трехкомпонентных оксидных систем по данным спектроскопии комбинационного рассеяния</p>
По-20	<p>Матвеева К.И., Зюбин А.Ю., Демишкевич Е.А., Рафальский В.В., Цибульникова А.В., Моисеева Е.И., Кундалевич А.А., Ханкаев А.А., Бутова В.В., Самусев И.Г.</p> <p>Исследование спектральной гетерогенности тромбоцитов человека методом гигантского комбинационного рассеяния света В работе представлены результаты исследования спектров гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС) тромбоцитов, полученных от одного здорового добровольца. В результате выполнения работы были зарегистрированы и проанализированы 120 спектров ГКРС тромбоцитов, полученных от одного здорового добровольца. Показано, что вне зависимости от места падения лазерного излучения на образец и пространственной ориентации тромбоцитов, зарегистрированные спектры ГКРС идентичны.</p>
По-21	<p>Окотруб К.А., Сажина Е.А., Амтиславский С.Я., Суровцев Н.В.</p> <p>Исследование эффекта низких температур на клеточное дыхание методом резонансного комбинационного рассеяния света цитохромов</p>
По-22	<p>Резвухин Д.И., Алифирова Т.А.</p> <p>КР-исследование природных хромистых титанатов из групп кричтонита, магнетоплюмбита и голландита Методом КР-спектроскопии изучены природные хромистые титанаты из групп кричтонита, магнетоплюмбита и голландита, являющиеся важными концентраторами несовместимых элементов в литосферной мантии древних кратонов. Материалом для исследования служили включения титанатов в ксеногенных силикатах (пироп, орто- и клинопироксен) из кимберлитов и лампрофиров Сибирского кратона, а также зерна в ксенолитах. Для всех трех групп редких титанатов характерна выраженная мода в интервале 670–720 см⁻¹, отражающая симметричные колебания октаэдрических катионных групп TiO₆, CrO₆ и др. Метод КР-спектроскопии хорошо применим для идентификации редких титанатов и позволяет различать минералы трех изученных групп как между собой, так и отличать их от других титан- и хромсодержащих минералов, встречающихся в мантийных ксенолитах и ксенокристаллах в небольших объемных пропорциях.</p>
По-23	<p>Мороз Т.Н., Беликова Г.И., Горайнов С.В.</p> <p>Спектры комбинационного рассеяния пиритов в черных сланцах и газонефтяных отложениях Методом микро-спектроскопии комбинационного рассеяния света (КР) проведен сравнительный анализ пирита и ассоциирующих минералов в черных сланцах и в газонефтеносных выделениях на примерах углеродсодержащих отложений Улуелгинско-Кудашмановской зоны Западного склона Южного Урала и битумов асфальтитовой жилы Садкинского месторождения. Бугурусланского района, Оренбургская область, Россия. Помимо углеродистых веществ (УВ) в микро и нано-шкале зафиксированы минералы, которые находятся в тесном сростании с пиритом и УВ. Определены характеристические параметры КР спектров УВ. Было показано, что углеродистое вещество в рудоносных черносланцевых отложениях Улуелгинско-Кудашмановской зоны представлено графитом, неоднородным по степени кристалличности и содержанию углерода с многочисленными вкраплениями кристаллического пирита, слюдистых и кварцевых частиц. Методами микро-спектроскопии и дифрактометрии в пирите из асфальтитовой жилы Садкинского месторождения установлены такие минералы-примеси как кварц, марказит, рансомит, бразилианит. КР спектроскопия была использована в качестве геотермометра углеродистых веществ. Выделены интервалы температур метаморфических преобразований: порядка 500–450 °С для черносланцевых пород Улуелгинско-Кудашмановской зоны и около 360 °С для асфальтитов Садкинского месторождения, что соответствует наличию зарегистрированных ассоциирующих минералов и подтверждено термодинамическими расчетами. Пирит из нефтеносных выделений отличается несовершенством структуры, нестехиометричен, содержит краевые и винтовые дислокации дефектов, имеет микропримеси многих элементов, что указывает на меняющиеся условия роста кристаллов.</p>
По-24	<p>Тахтин В.Ю., Пономарева Д.В., Зейналова С.З., Тимошук Е.И.</p> <p>Влияние состава газовой среды при термообработке на упорядоченность структуры и прочностные характеристики стеклоуглеродных высокопористых открытоячеистых</p>

	<p>материалов</p> <p>Стеклоуглеродные высокопористые открытоячеистые материалы находят широкое применение в различных областях промышленности, в том числе могут быть использованы в медицине в качестве скаффолдов или остеопластических материалов. Стандартная технология получения подобных материалов включает в себя термообработку при повышенных температурах (900 – 1000 °С) в контролируемой газовой среде: восстановительной (пары летучих полимерного связующего), инертной (аргон или азот), реакционной (углеводороды, например, метан), при этом среда термообработки вносит вклад в упорядоченность углеродной структуры. В ходе работы было установлено, что, несмотря на то, что после термообработки в различных газовых средах стеклоуглерод (в основном) присутствует в аморфном и низкоупорядоченном состоянии, при обработке в инертной и реакционной среде наблюдается рост углеродных кристаллитов, что сказывается на прочностных характеристиках стеклоуглеродных высокопористых открытоячеистых материалов.</p>
По-25	<p>Кунилова И.В., Лавриненко А.А.</p> <p>Влияние температуры сжигания бурых углей на структуру золы</p> <p>Методами КР- и ИК-спектроскопии изучено влияние температуры сжигания образцов угля Экибастузского угольного бассейна на изменение структуры зольного материала. В результате исследований сделан вывод о том, что золошлаковые отходы, полученные при более высокой температуре сжигания угля (1200 °С), будут давать меньшую полноту извлечения ценных элементов из-за образования более трудновыщелачиваемых фаз, имеющих большую степень кристалличности (муллита и оксида циркония).</p>
По-26	<p>Никифоров А.Н., Горшков В.С., Nasara R.N., Govindarajan K., Lin S.-K., Пелегов Д.В.</p> <p>Деградация $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, индуцированная лазерным излучением мощностью 0.09-4.9 мВт</p> <p>Спектроскопия комбинационного рассеяния света зачастую рассматривается как неразрушающий метод исследования структуры, и вопросам взаимодействия лазерного излучения с объектом исследования не всегда уделяется должное внимание. Особенно хорошо это заметно для тех публикаций, где этот метод является вспомогательным и используется для подтверждения целевой фазы. Объектом данного исследования является титанат лития $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO), который используется как анодный материал литиевых аккумуляторов. Можно найти большое число публикаций со спектрами титаната лития, но в большинстве своём такие исследования проводятся специалистами в области химии твердого тела и электрохимии, и поэтому вопрос влияния лазерного излучения на исследуемый материал в этих работах, как правило, не рассматривается. Отсутствие публикаций по теме дегградации LTO под действием лазерного излучения отчасти вызвано тем, что этот материал имеет структуру шпиннели, устойчивую к разного вида воздействиям. Однако чистый LTO имеет крайне низкую электронную проводимость и в качестве решения предлагается его легирование для создания дополнительных центров проводимости в объеме материала. В данной работе представлены результаты исследования эффектов воздействия лазерного излучения с длиной волны 633 нм и различной мощностью на отдельные частицы $\text{Li}_{3.95}\text{Mn}_{0.05}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. Выявлены быстрый и медленный процессы индуцированной дегградации, в том числе для малых значений возбуждающего лазерного излучения, а также продемонстрирован эффект переосаждения углерода для номинально чистых образцов LTO.</p>
По-27	<p>Находнова А.В., Самойлов В.М., Гончарова Н.Н.</p> <p>Применение метода рамановской спектроскопии для контроля качества карбидокремниевых материалов</p> <p>Целью данной работы работы являлось исследование карбидокремниевых материалов, полученных по технологии силицированного графита (СГ) и сырьевых материалов для их производства методом рамановской спектроскопии для обоснования возможности разработки методики контроля распределения компонентов композиционных материалов на основе SiC. По результатам проведенного исследования был сделан вывод, что метод рамановской спектроскопии позволяет определять фазы, входящие в состав карбидокремниевых материалов и может быть использован для разработки методики контроля распределения компонентов композиционных материалов на основе SiC.</p>
По-28	<p>Закирьянова И.Д.</p> <p>Использование спектроскопии комбинационного рассеяния света для исследования кинетики взаимодействия оксидов РЗМ с хлоридными расплавами.</p> <p>Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-03-00561 – а).</p>

По-29	<p>Кориневская Г.Г., Лебедева С.М., Кориневский Е.В.</p> <p>Исследование стекол методом спектроскопии комбинационного рассеяния света</p>
По-30	<p>Низамова А.В., Гареев Б.И., Баталин Г.А., Куликова А.В.</p> <p>Рамановская спектроскопия тяжелой фракции В тяжелой фракции закодирован значительный объем информации о происхождении осадочных пород. Идентификация тяжелой фракции обычно выполняется вручную с использованием поляризационного оптического микроскопа, данный метод основан на оптических свойствах минералов. Точность анализа существенно зависит от исследователя и его компетентности. Использование современного аналитического оборудования позволяет значительно уменьшить длительность анализа, а также исключить ошибки, вызванные человеческим фактором, что даёт более объективную оценку состава минералов тяжелой фракции. Рамановская спектроскопия чувствительна к молекулярным колебаниям, поэтому разновидности минералов распознаются уверенно, что устраняет предвзятость оператора, влияющую на процесс идентификации минералов во время оптического исследования. В данной работе описан метод полуавтоматического анализа тяжелой фракции. Анализ проводился на рамановском конфокальном спектрометре inVia Qontor (Renishaw, Великобритания). Выделение тяжелой фракции проводилось стандартными методами.</p>
По-31	<p>Ульянова Е.С., Замятин Д.А., Красильников В.Н., Гырдасова О.И., Булдакова Л.Ю., Липина О.А., Меленцова А.А., Шалаева Е.В.</p> <p>Спектроскопическое исследование структурных и фотолюминесцентных свойств фотоактивных композитов TiO₂/C со смешанными матрицами диоксида титана Диоксид титана является основой для большого круга фотоактивных материалов. Для улучшения его фотоактивности в видимой области и снижения рекомбинации фотогенерированных носителей создают композиты со свойствами гетеропереходов второго рода, среди них композиты TiO₂/C. При формировании композитов TiO₂/C термолизом органических прекурсоров протекают фазовые превращения из аморфного состояния в нанокристаллический TiO₂ с различной полиморфной структурой. Для таких композитов процессы рекомбинации фотогенерированных носителей и типы структурных дефектов – ловушек, а, следовательно, и фотолюминесцентные свойства могут зависеть от типа полиморфов и содержания свободного углерода. Особый интерес вызывает люминесцентное поведение композитов при облучении видимым светом с энергией меньше ширины запрещенной зоны (E_g). Макроскопическая и локальная структура, а также фазовые превращения в композитах TiO₂/C изучены рентгенофазовым анализом, просвечивающей электронной микроскопией и КР-микроспектроскопией. Люминесцентные свойства исследованы КР-спектроскопией при возбуждении в видимой части спектра и сопоставляются с данными флуоресцентной спектроскопии. В работе получены композиты TiO₂/C с матрицами анатаз/брукит, анатаз/брукит/рутил и различным содержанием углерода в зависимости от условий синтеза и последующих отжигов. Выделены полосы люминесценции, связанные с полиморфами TiO₂ и углеродом, в видимой и близкой инфракрасной области. Получены корреляционные зависимости фотолюминесценции композитов от содержания углерода и локальной структуры. Обсуждаются основные типы дефектов ловушек в смешанных матрицах TiO₂ и механизмы излучательной рекомбинации композитов при облучении энергиями менее E_g.</p>

Конференция будет проходить в Конференц-зале (2 этаж) ИГГ УрО РАН по адресу:

Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского, 15.

До ИГГ УрО РАН от Южного автовокзала идут автобусы 014, 23, 50, 050, 054, троллейбус 14, от железнодорожного вокзала и Северного автовокзала – автобусы 21 и 23, остановка «Академика Вонсовского».

Уважаемые коллеги! В связи с проведением Интернет-трансляции заседаний, убедительная просьба активно пользоваться микрофонами во время вопросов докладчику и дискуссий!

Страница трансляции:

http://www.igg.uran.ru/videoportal/2021_08_23_Ur-Sib_XII_vmnk/

