

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ГЕОХИМИИ им. А.П.ВИНОГРАДОВА
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИГХ СО РАН)

УДК 535.343.2
Рег. № 121051300032-0
Номер проекта № 0284-2021-0004

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИГХ СО РАН,

Д.Г-М-Н _____ А.Б. Перепелов

«26» декабря 2025 г.

**ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
по теме:**

по теме:

**МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ РАДИАЦИОННЫХ
ДЕТЕКТОРОВ, ЛЮМИНОФОРОВ И ОПТИЧЕСКИХ СТЕКОЛ**
(заключительный)

Приоритетное направление 1.5.3. Минералогия и петрология.

1.5.3.2. Экспериментальная минералогия и петрология

Протокол ученого совета ИГХ СО РАН

№ 10 от 26. 12. 2025

Руководитель проекта д.ф.-м.н. профессор

А.И. Непомнящих

Иркутск 2025

СПИСОК ОСНОВНЫХ ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Г.н.с., доктор физико-математических наук, профессор

Г.н.с., доктор физико-математических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат геолого-минералогических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

С.н.с., кандидат технических наук

С.н.с., кандидат физико-математических наук

Н.с., кандидат физико-математических наук

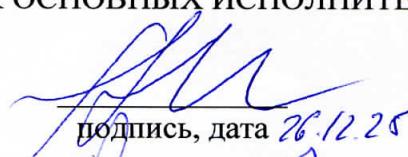
Н.с., кандидат физико-математических наук

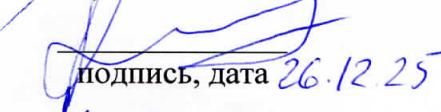
М.н.с.

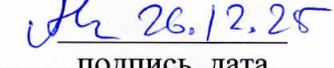
М.н.с.

М.н.с.

Нормоконтроль

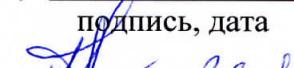

подпись, дата 26.12.25

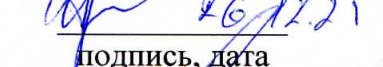

подпись, дата 26.12.25


подпись, дата


подпись, дата

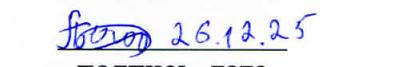

подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата

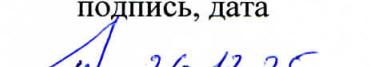

подпись, дата

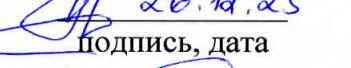

подпись, дата


подпись, дата

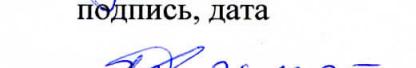

подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата


подпись, дата

А.И. Непомнящих
(введение, заключение,
1.9; 1.10; 4.1; 4.2)

Е.А. Раджабов
(1.4; 1.5)

А.С. Мысовский
(2.5)

А.С. Мясникова
(2.1, 2.2)

Р.Ю.Шендрик
(1.6-1.8)

А.М. Федоров
(3)

А.А.Шалаев
(4.2)

Т.Ю. Гармышева
(1.9; 4.2)

А.И.Богданов
(2.3; 2.4)

А.П.Жабоедов
(4.1; 4.2)

Д.О.Софич
(1.1 - 1.3)

Р.В.Пресняков
(1.10)

Н.Г.Чуклина
(2.5)

М.Д. Зимин
(3.2)

А.Г.Чуешова
(4.3)

С.Ю.Теренин
(4.1)

Т. Ю. Гармышева

РЕФЕРАТ

Отчет 77 с., 29 рис., 4 табл., 59 источн., 2 прил.

РОСТ КРИСТАЛЛОВ, ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ, СЦИНТИЛЛЯТОРЫ, КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, КВАРЦИТЫ, КВАРЦЕВОЕ СТЕКЛО, КРЕМНИЙ

В продолжении модернизации и усовершенствования экспериментальной базы разработан универсальный тепловой узел для получения высокочистого сырья методом вакуумной дистилляции и выращивания кристаллов фторида церия методом Бриджмена.

Открыт новый тип сверхбыстрой люминесценции в кристаллах $\text{BaF}_2\text{-LaF}_3$, связанный с излучательной рекомбинацией электронов оставной зоны бария с дырками оставной зоны лантана с временем затухания люминесценции 150 пс.

Разработано веб-приложение АрДИ, которое позволяет проводить обработку, деконволюцию колебательных спектров, а также проводить по ИК- и КРС спектрам фазовый анализ минералов с использованием методов машинного обучения и нейронных сетей.

Проведено детальное исследование сульфидных анион-радикалов в минералах группы содалита и канкринита. Установлено, что положение полосы люминесценции S_2^- -анион-радикалов зависит от типа полости, в которой находится анион-радикал.

Разработаны рекомендации для повышения стабильности процесса выращивания термolumинесцентных монокристаллических детекторов на основе LiF:Mg,Ti .

На основе квантово-химических расчетов предсказано наличие кросслюминесценции в кристаллах BaCaF_4 , BaLiF_3 и BaSrF_4 .

Полисульфидные группы в минерале сапожниковит $\text{Na}_8(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{HS})_2$ со структурой содалита были исследованы с помощью теории функционала плотности. Спектроскопические характеристики полисульфидной группы зависят от размера полости, в которой она находится: уменьшение размеров полости приводит к увеличению колебательных частот.

Сравнительный геологический, геохимический, минералого-петрографический анализ проявлений и месторождений кварцевых жил и кварцитов Восточного Саяна и Южного Забайкалья показывает, что протолитом для изученных жил и кварцитов были высококремниевые терригенные и хемогенные осадки и магматические породы.

При наплаве кварцевого стекла показано, что для получения прозрачного кварцевого стекла на основе суперкварцитов необходимо повышение температуры в тигле на ~ 100 К по сравнению с концентратами из гранулированного кварца Кыштымского месторождения.

СОДЕРЖАНИЕ

Список основных исполнителей	2
Реферат	3
Содержание	4
Определения, обозначения и сокращения	5
Введение	6
1 Радиационные и фототермические процессы в ионных кристаллах	8
1.1 Разработка счетчика фотонов	8
1.2 Разработка универсального теплового узла для вакуумной дистилляции и выращивания монокристаллов фторида церия.....	8
1.3 Синхротронные исследования CsI:Eu.....	9
1.4 Апконверсионные материалы	10
1.5 Свечение F-центров	11
1.6 Сверхбыстрая люминесценция.....	12
1.7 Веб-приложения для обработки колебательных спектров	15
1.8 Анион-радикалы серы в микропористых канкринит и содалит подобных минералах	16
1.9 Термолюминесцентные монокристаллические детекторы.....	18
1.10 Особенности получения кристаллов LiF:Mg,Ti.....	21
2 Квантово-химические исследования твердотельных материалов	23
2.1 Квантово-химические расчеты зонной структуры кристаллов.....	23
2.2 Классификация спектров комбинационного рассеяния.....	24
2.3 Полисульфидные группы в содалит- и канкринитподобных материалах	28
2.4 Квантово-химические расчёты структурных и спектроскопических свойств центров Sm ²⁺ в CsI.....	31
2.5 Неэмпирический метод встроенного кластера	32
3 Высокочистое кварцевое сырье Восточной Сибири	35
3.1 Модель образования кварцитов Восточного Саяна	36
3.2 Кварцевые жилы и кварциты Ундинской зоны Забайкалья	36
4 Оптическое кварцевое стекло и мультикремний для солнечной энергетики	40
4.1 Полиморфные превращения в диокside кремния	40
4.2 Кварцевое стекло	42
4.3 Кристаллографическая реконструкция ориентаций зёрен по EBSD данным в мультикриSTALLическом кремнии.....	45
Заключение.....	49
Основные результаты исследований 2025 года	49
Основные результаты исследований 2021-2024 года	52
Список использованных источников.....	59
Приложение А. Опубликованные статьи по проекту	64
Опубликованные статьи по проекту в 2025 году	64
Опубликованные статьи по проекту – 2024 г.....	66
Опубликованные статьи по проекту – 2023 г.....	69
Опубликованные статьи по проекту – 2022 г.....	71
Опубликованные статьи по проекту – 2021 г.....	74
Приложение Б Список сотрудников, задействованных в проекте	77

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

В настоящем отчете применяют следующие определения, сокращения и обозначения:

Термин	Определение
Σ	период совпадающих узлов (атомов) в решётках образующих МЗГ зёрен
BHLYP	гибридный функционал плотности, отличается от известного функционала B3LYP вкладом обменной энергии Хартри-Фока, составляющим 50%. Включает также обменную поправку B88 (Becke) и корреляционный функционал LYP (Lee-Yang-Parr)
CASSCF	метод полного наложения конфигураций в пространстве активных орбиталей (complete active space self consistent field)
DFT	теория функционала плотности (density functional theory)
DFT+U	приближенный метод в расчетах по функционалу плотности, позволяющий скорректировать степень локализации электронных состояний для атомных оболочек
EBSD/ДОРЭ	Electron Back-Scattered Diffraction/Дифракция обратно-рассеянных электронов
F-центр	собственный дефект в ионных кристаллах, представляет собой анионную вакансию с захваченным электроном
GGA	обобщенное градиентное приближение (generalized gradient approximation)
GW и GW0	приближения в теории функционала плотности, используемые для расчета спектра возбужденных состояний системы
K-сетка	набор векторов обратного пространства кристалла в пределах первой зоны Бриллюэна, используемый для моделирования заселенности состояний кристалла в расчетах по методам DFT в периодической модели
LBIC/EBIC	Light/Electron Beam Induced Current (методы наведенного тока, индуцированного лазером/электронами)
LDA	приближение локальной плотности (local density approximation)
PBE	один из распространенных функционалов плотности в обобщенном градиентном приближении, назван по фамилиям авторов (Perdew-Burke-Ernzerhof)
PBE+U	метод DFT+U применительно к функционалу PBE
PBESol	функционал плотности в обобщенном градиентном приближении на основе функционала PBE, оптимизированный для расчета твердых тел
PZT	твердый раствор материалов PZ ($PbZrO_3$) и PT ($PbTiO_3$)
Vk-центр	автолокализованная дырка в ионных кристаллах
АЛЭ	автолокализованный экситон
МЗГ	межзёренные границы
РСУ	решётка совпадающих узлов
СТЭМ	сканирующая трансмиссионная электронная микроскопия

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность решаемых в проекте проблем определяется необходимостью поиска и создания новых эффективных функциональных материалов и технологий их получения для решения насущных задач в области детекторов ионизирующего излучения, люминофоров, термостойкой кварцевой керамики. Для этого предполагается получение и детальное исследование кристаллических материалов содержащих ионы щелочноземельных материалов и галогенов, а также кварцевых концентратов и оптических кварцевых стекол

Основной целью проекта является поиск новых высокоэффективных материалов для создания детекторов ионизирующего излучения, люминофоров в синей и ультрафиолетовой области спектра, апконверсионных преобразователей инфракрасного излучения в видимое, радиопрозрачной термостойкой кварцевой керамики для высокоскоростных летательных аппаратов, оптически однородного и легированного кварцевого стекла для силиковой оптики.

Для достижения цели проекта в 2025 году решались следующие основные задачи:

Исследование апконверсии в смешанных фторидах с примесями лантаноидов.
Спектроскопия радиационных дефектов в термолюминесцентных детекторах LiF.

Экспериментальное и теоретическое исследование анион-радикалов серы в микропристых канкринит и содалит подобных минералах.

Теоретические исследования методами квантовой химии, включая новый гибридный метод SML и традиционные периодические расчеты с помощью функционала плотности, кварцевых стекол и ряда галоидных кристаллов, таких как LaF₃, CaSrBaF₆, CsI и др.

Обобщение данных по продуктивным кварцевым телам гранулированного жильного и пегматитового типов и построить геолого-генетические модели образования высокоочистых разновидностей кварца Восточносибирском и забайкальском сегментах Центрально-Азиатского складчатого пояса.

Разработка методов глубокой очистки кварцевого сырья и получения оптического кварцевого стекла. Описание различных типов межзеренных границ мультикремния и их влияние на время жизни неосновных носителей заряда.

В отчете представлены основные результаты исследований, выполненных в 2025 году, а заключении приведены краткие итоги всей научно-исследовательской работы и отдельных её этапов.

За предыдущие 4 года были представлены промежуточные отчеты по годам:

Регистрационный номер 222022100004-7 от 24 марта 2022 г. «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол» 121051300032-0.

Регистрационный номер 223020800267-4 от 23 марта 2023 г. «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол» 121051300032-0.

Регистрационный номер 224021300390-0 от 22 марта 2024 г. «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол» 121051300032-0.

Регистрационный номер 225021310030-1 от 26 марта 2025 г. «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стекол» 121051300032-0.

1 РАДИАЦИОННЫЕ И ФОТОТЕРМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

1.1 Разработка счетчика фотонов

Был разработан и собран счетчик коротких электрических импульсов от фотоумножителей (счетчик фотонов). Его разработка обусловлена необходимостью регистрировать очень слабые световые сигналы при исследованиях экспериментальных кристаллов. Разработанный счетчик фотонов (рисунок 1) имеет несколько протоколов связи для подключения к существующей в ИГХ СО РАН лабораторной инфраструктуре, выход 5 В с фильтрацией напряжения для питания фотомодулей (Hamamatsu), выход встроенного генератора импульсов и выход компаратора для подключения к модулю время – цифрового преобразователя. В связке с время- цифровым преобразователем два счетчика фотонов могут формировать стартовый и стоповый импульсы для время коррелированного счета фотонов, для измерения субнаносекундных времен затухания люминесценции [1].



Рисунок 1 – Фотографии счетчика фотонов

1.2 Разработка универсального теплового узла для вакуумной дистилляции и выращивания монокристаллов фторида церия

Монокристаллы фторида церия являются перспективными магнитооптическими изоляторами [2] для мощных волоконных лазеров. В ходе выполнения Договора НИР, за-

ключенного с ООО «ВПГ Лазеруан», – крупнейшим в России производителем волоконных лазеров, было установлено, что данные кристаллы значительно превосходят по своим характеристикам используемые в данный момент кристаллы тербий галлиевого граната, однако, требования к качеству таких кристаллов очень высоки, и для их выращивания требуется сырье высокой степени очистки. Так как процесс наработки шихты занимает достаточно небольшое время по сравнению с выращиванием кристалла, то требуется разработать тепловой узел, который можно с одной стороны использовать для очистки шихты, а с другой стороны без существенных временных затрат он может быть модифицирован в узел для выращивания кристаллов. Таким образом, для получения монокристаллов фторида церия высокого оптического качества была поставлена задача разработать такой узел, совместимый с ростовой установкой СЗВН-20.

Разработанная конструкция теплового узла из графита для печи СЗВН-20 представлена на рисунке 2. Она обеспечивает возможность очистки сырья путем вакуумной дистилляции в значительных объемах. Легкая замена нескольких деталей теплового узла позволяет быстро перевести печь в режим роста кристаллов методом Бриджмена. Эксперименты по очистке сырья и выращиванию кристаллов запланированы на начало 2026 г.

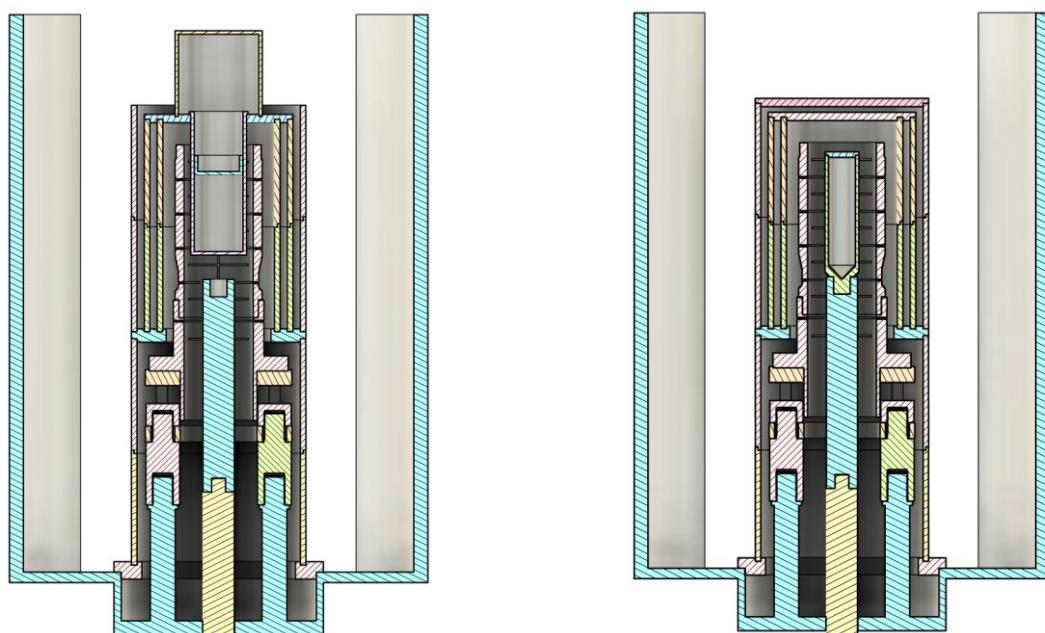


Рисунок 2 – Модели теплового узла в продольных разрезах
Слева – конфигурация для экспериментов по «дистилляции», справа – конфигурация для роста кристаллов CeF_3

1.3 Синхротронные исследования $\text{CsI}:\text{Eu}$

Для установления механизмов возбуждения примесных центров, кристалл $\text{CsI}:\text{Eu}^{2+}$, выращенный в ИГХ СО РАН методом Киропулоса, был исследован при возбуждении в области вакуумного ультрафиолета на синхротроне MAX IV (Швеция, г. Лунд), станция

FinEstBeAMS. В ходе исследований было установлено, что между спектрами возбуждения в полосах автолокализованного экситона и двухвалентного европия существует значимая корреляция в области высоких энергий (рисунок 3). Учитывая, что полоса свечения автолокализованных экситонов перекрывается с одной из полос поглощения Eu^{2+} , был сделан вывод о наличии в кристаллах CsI эффективного экситонного механизма передачи возбуждения с кристаллической матрицы на центры свечения [3-5].

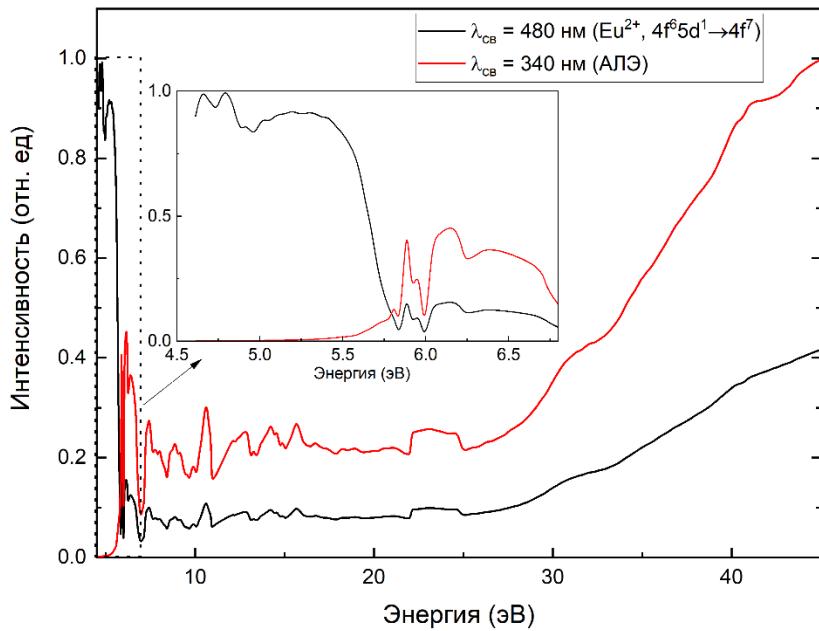


Рисунок 3 – Спектры возбуждения CsI:Eu в ВУФ-диапазоне

1.4 Апконверсионные материалы

Кристаллы (твердые растворы) состава $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_4$, $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_4$ и CaSrBaF_6 являются малоизученными оптическими материалами, прозрачным в среднем ИК-, видимом и УФ-диапазонах. Смешанные двух и трехкомпонентные составы щелочноземельных фторидов изучаются в последнее время как возможные лазерные и апконверсионные материалы.

В настоящей работе исследовались апконверсионная люминесценция кристаллов $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_4$. И проведено сравнение с CaSrBaF_6 и $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ активированных лантаноидами Er, Ho и Yb. Пары ионов 3% ErF_3 -5% YbF_3 являются наиболее эффективными апконверсионными примесями в кристаллах фторидов [6]. Нами изучены спектры и выход апконверсии в кристаллах твердых растворов $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_4$ с примесями Er-Yb. Выход апконверсии линейно растет с увеличением концентрации Sr от 2.6 в BaF_2 до 4.6 в SrF_2 (квантовый выход 10.5%). Выход измерен в интегрирующей сфере с возбуждением лазера 980 нм и нормирован на интенсивность свечения $\text{SrF}_2\text{-}0.1\text{HoF}_3\text{-}5\text{YbF}_3$ (рисунок 4).

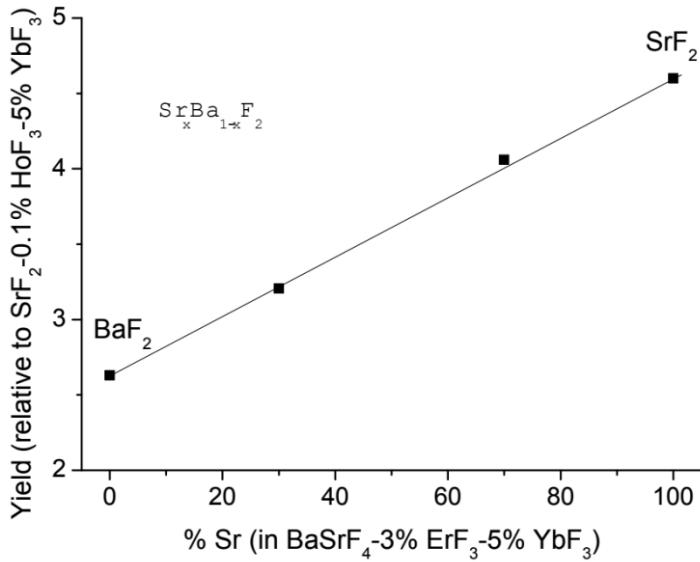


Рисунок 4 – Выход апконверсии в смешанных фторидах $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_2$ в зависимости от содержания SrF_2

Сравнение эффективности апконверсии в кристаллах щелочноземельных фторидов с одним катионом и смешанных фторидов показывает, что наиболее эффективным материалом является SrF_2 -3% ErF_3 -5% YbF_3 . В составах $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_2$ и CaSrBaF_6 эффективность апконверсии меньше. Составы $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ и CaSrBaF_6 с примесями 3% ErF_3 -5% YbF_3 показывают меньшую эффективности апконверсии.

1.5 Свечение F-центров

Оптические спектры F центров различных кристаллах хорошо изучены. Тем не менее свечение F центров в щелочно-земельных фторидах исследовано всего лишь в двух работах [7, 8]. В работе [1] исследованы полосы поглощения и свечения F-центров в аддитивно и радиационно окрашенных кристаллах щелочно-земельных фторидов CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 . Указывается что F центр в BaF_2 имеет полосу свечения с максимумом около 1030 нм [7]. В более поздней работе [8] предполагается, что F центры в BaF_2 имеют полосу свечения с максимумом при 626.5 нм. Следует отметить, что стоксов сдвиг между полосами поглощения и свечения в BaF_2 по данным работ [7,8] значительно меньше чем для F-центров в кристаллах CaF_2 , SrF_2 . Исходя из близости стоксового сдвига для F центров в CaF_2 , SrF_2 следует ожидать люминесценцию F центров в BaF_2 в области 1500-2000 нм. В настоящей работе исследовано свечение аддитивно окрашенных кристаллов BaF_2 в интервале длин волн до 800-3200 нм.

В аддитивно-окрашенных кристаллах BaF_2 при низких температурах обнаружены полосы свечения при 1050 и 1700 нм. Соотношение полос является разным в разных кристаллах BaF_2 . Более того в спектре возбуждения полосы 1030 нм нет пика F-центров

при 611 нм. Все это указывает на то, что полоса свечения при 1030 нм не принадлежит F центрам в BaF₂, как было предположено ранее [7].

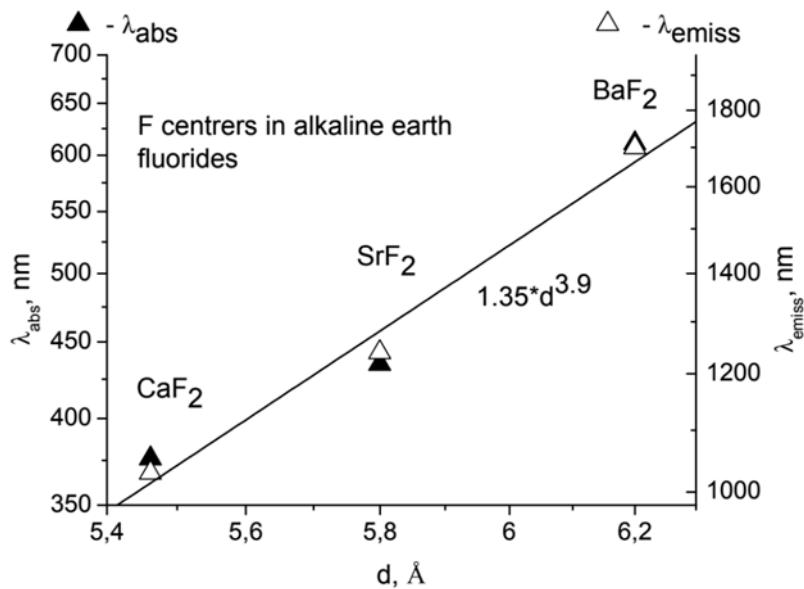


Рисунок 5 – Положение полос поглощения [9] и испускания F-центров в зависимости от постоянной решетки кристаллов фторидов щелочноземельных металлов

При температуре 6.8К полоса с максимумом 1700 нм имеет полуширину около 230 нм. Полоса уширена в длинноволновую сторону. В коротковолновой области от максимума полосы 1700 нм обнаружены узкие пики свечения при 1522, 1538, 1551 нм, очевидно обусловленные фононами. Спектр возбуждения свечения при 1700 нм показывает отчетливую полосу при 610 нм максимум которой совпадает с максимумом полосы поглощения F центров в BaF₂. Относительный стоксов сдвиг для полосы 1700 нм близок к стоксову сдвигу для F-центров в CaF₂, SrF₂ (Рисунок 5). Несомненно, полоса при 1700 нм обусловлена свечением F центров в кристаллах BaF₂.

Эффективная инфракрасная широкополосная люминесценция F-центров в аддитивно окрашенных кристаллах щелочноземельных фторидов может быть использована для разработки источников света с длиной волны 1–2,5 мкм, лазеров с перестраиваемой длиной волны и других люминофоров.

1.6 Сверхбыстрая люминесценция

Целью работы было установление механизма обнаруженной ранее сверхбыстрой люминесценции в кристаллах фторида бария, активированных ионами лантана [10]. Постоянная затухания этой сверхбыстрой люминесценции составляет 150 пс, тогда как постоянная затухания кросс-люминесценции составляет 650 пс в кристаллах фторида бария.

Исследование быстрой компоненты кросс-люминесценции в кристаллах BaF₂–LaF₃ проводилось на установке FinEstLumi станции FinEstBeams синхротрона MAX IV (Лунд, Швеция). Измерения были выполнены в однобанчевом режиме. Спектры люминесценции регистрировались с помощью кварцевого оптического волокна, соединенного с гибридным фотодетектором HPM-100-07. Форма возбуждающего импульса определялась на длине волны 225 нм.

На рисунке 6 показан спектр с временным разрешением, измеренный при возбуждении 45 эВ. Спектр не скорректирован на спектральную чувствительность фотодетектора, поэтому высокоэнергетические полосы немного смещены в область низких энергий (не более чем на 0.3 эВ). Компонента с постоянной затухания 650 пс, соответствующая «обычной»

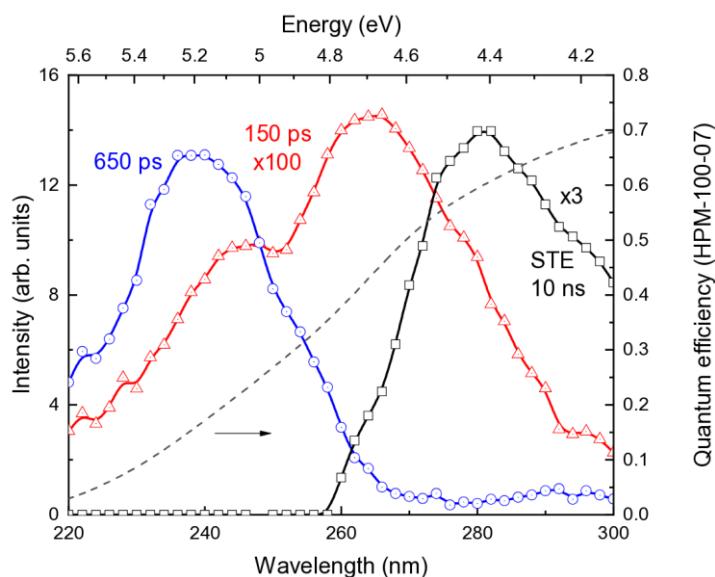


Рисунок 6 – Спектры кросс-люминесценции с временным разрешением, измеренные при комнатной температуре в кристалле BaF₂–30 мол.% LaF₃ при возбуждении синхротронным излучением с энергией 45 эВ и кривая чувствительности фотоприемника

кросс-люминесценции, имеет максимум в области 5.2 эВ; в скорректированном спектре положение полосы смещается к 5.5 эВ. Полоса свечения, связанная со «сверхбыстрой» компонентой 150 пс, смещена в область меньших энергий и имеет два характерных максимума при 5.0 эВ и 4.7 эВ. Медленная компонента с постоянной затухания 10 нс имеет максимум при 4.4 эВ и связана со свечением автолокализованных экситонов. Сверхбыстрая компонента появляется в кристаллах фторида бария, активированных более чем 5 мол.% фторида лантана. С увеличением концентрации лантана ее вклад в общее затухание люминесценции растет.

На рисунке 7а показаны кривые затухания в беспримесном и кристалле фторида бария и кристалле, активированном 30 мол.% фторида лантана. Спектр возбуждения сверхбыстрой компоненты приведен на рисунке 2б. «Обычная» полоса кросс-люминесценции

($\lambda_{em}=230$ нм) с временем затухания 650 пс возбуждается при энергиях выше 17.5-18.0 эВ. Этот порог соответствует разности энергий между оственной зоной, образованной $5p$ -состояниями Ba^{2+} , и зоной проводимости. Спектр возбуждения «сверхбыстрой» 150 пс компоненты имеет порог при 24 эВ, что примерно на 6 эВ выше порога возбуждения «обычной» кросс-люминесценции. Эта разница близка к разности между вторым потенциалом ионизации бария и третьим потенциалом ионизации лантана или расстоянию между оственной зоной, образованной $5p$ -состояниями La^{3+} , и оственной зоной Ba^{2+} . На основании экспериментальных данных и квантово-химических расчетов было установлено, что наблюдаемая сверхбыстрая люминесценция относится к новому типу люминесценции, связанному с излучательной рекомбинацией электронов оственной зоны бария с дырками оственной зоны лантана. Эта люминесценция была названа оствено-остовная люминесценция.

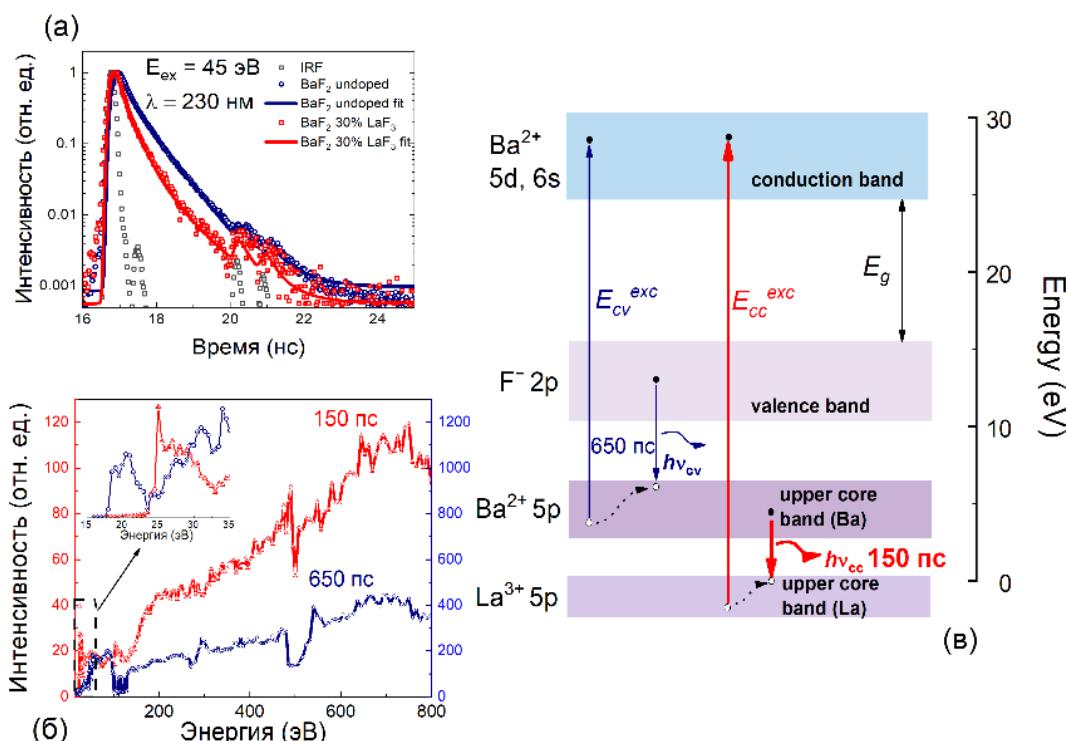


Рисунок 7 – Кривые затухания и спектры возбуждения
Кривые затухания (а) и спектры возбуждения (б) кросс-люминесценции и оствено-остовной люминесценции. На вставке (в) приведена схема, объясняющая наблюданную оствено-остовную люминесценцию

В номинально беспримесном кристалле фторида бария, как видно из рисунка 7а, на кривой затухания можно выделить две компоненты, одна из которых существенно короче 650 пс. Её вклад незначителен и связан с поверхностным тушением кросс-люминесценции. Спектры люминесценции и возбуждения этой компоненты совпадают с таковыми для обычной 650 пс компоненты кросс-люминесценции. При этом с увеличением энергии вклад этой компоненты уменьшается из-за того, что начинает возбуждаться

больший объем кристалла. Однако в кристаллах $\text{BaF}_2\text{--LaF}_3$ сверхбыстрая компонента показывает иное поведение. Во-первых, её спектры свечения (рисунок 6) и возбуждения существенно отличаются от обычной 650 пс компоненты. Положение полосы 150 пс люминесценции сдвинуто в область меньших энергий. Кроме того, порог возбуждения 150 пс компоненты имеет более высокую энергию. Интенсивность этой компоненты растет как с увеличением концентрации LaF_3 , так и с ростом энергии возбуждения. Все указанные факторы свидетельствуют о том, что появление 150 пс компоненты в кристаллах $\text{BaF}_2\text{--LaF}_3$ не связано с процессами поверхностного тушения, в отличие от беспримесного кристалла BaF_2 .

На основании экспериментальных данных и квантово-химических расчетов было установлено, что наблюдаемая сверхбыстрая люминесценция относится к новому типу люминесценции, связанному с излучательной рекомбинацией электронов оставной зоны бария с дырками оставной зоны лантана. Эта люминесценция была названа оставно-остовная люминесценция.

Постоянная времени затухания оставно-остовной люминесценции составляет 150 пс, что делает материалы, где она может наблюдаваться, перспективными детекторами для времепролетной компьютерной и позитрон-эмиссионной томографии. Кристаллы BaF_2 , активированные 20 мол.% и 30 мол.% LaF_3 , демонстрируют малые значения интервала регистрации совпадений (ИРС). Для неполированного кристалла без светорассеивающего покрытия и оптической смазки значения интервала регистрации совпадений составили 79 пс для $\text{BaF}_2\text{--}20$ мол.% LaF_3 и 59 пс для $\text{BaF}_2\text{--}30$ мол.% LaF_3 . Полировка образца, использование светоотражающего покрытия и оптической смазки существенно увеличивают светосбор и, соответственно, световой выход. Таким образом, достигнуты значения ИРС = 24 пс, вместе с тем возможно их дальнейшее улучшение при повышении оптической однородности кристаллов. Столь высокие значения ИРС обусловлены появлением сверхбыстрой оставно-остовной люминесценции, характеризующейся практически нулевым временем разгорания [11], что приводит к значительному снижению ИРС. Кроме того, оставно-остовная люминесценция смещена в область меньших энергий, где чувствительность полупроводниковых фотоприемников выше.

1.7 Веб-приложения для обработки колебательных спектров

Целью работы является автоматизированная идентификация компонентов различных минералов в колебательных спектрах- фазовый анализ с помощью колебательной спектроскопии. Для достижения этой цели было разработано веб-приложения ArDI (<https://ardi.fmm.ru>), которое позволяет проводить предварительную обработку спектров,

раскладывать спектр на компоненты. Также в приложение интегрированы базы данных truff.net и база данных колебательных спектров, создаваемая совместно с Минмузеем РАН и ИГМ СО РАН.

На основе кластеризации, выполненной методами машинного обучения по алгоритму Faiss [11], а также с использованием обученной сверточной нейронной сети, были разработаны эффективные алгоритмы фазового анализа включений в минералах. На рисунке 8 приведен пример работы приложения. На рисунке изображено флюидное включение в кварце, которое имеет сложный минеральный состав, с помощью разработанного алгоритма удалось установить его состав.

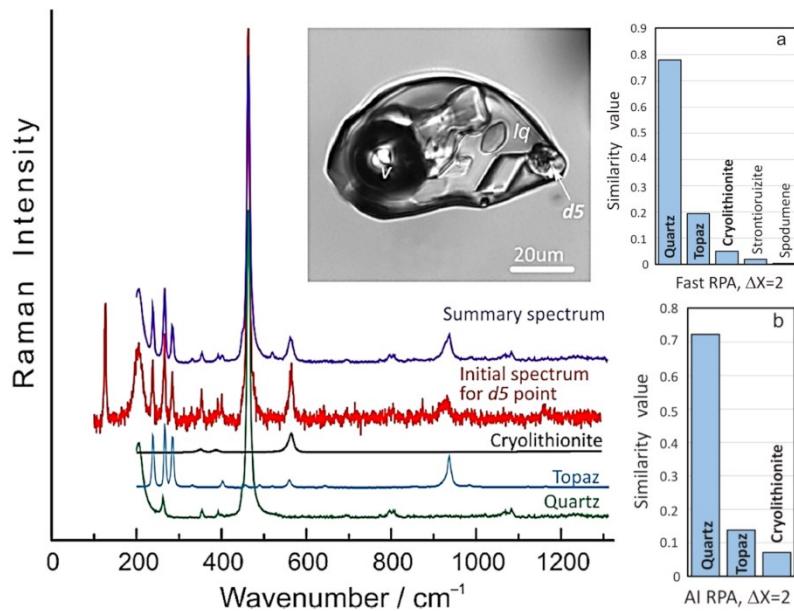


Рисунок 8 – Результат фазового анализа КРС спектра включения в кварце, которое содержит топаз и криолитионит. На вставке (а) показан результат анализа с помощью алгоритма машинного обучения Faiss, на вставке (б) – анализ фазового состава включения, выполненный с помощью свёрточной нейронной сети

1.8 Анион-радикалы серы в микропористых канкринит и содалит подобных минералах

Микропористые материалы со структурой типа канкринита и содалита являются перспективными матрицами для иммобилизации жидких радиоактивных отходов [13]. Канкринитоподобные материалы демонстрируют перспективные фотокаталитические свойства. Материалы на основе содалита являются перспективными фотохромными матрицами [14].

Данные материалы характеризуются алюмосиликатным каркасом, что обусловливает их повышенную радиационную стойкость по сравнению с ранее рассмотренными галоидами. Однако в полостях таких материалов могут присутствовать анионы галогенов, координированные катионами щелочных или щелочноземельных металлов.

В этом году проведено детальное экспериментальное и теоретическое исследование возможных конфигураций сульфидных анионов, нейтральных комплексов и анион-радикалов в содалитовой и канкринитовой полостях.

В частности, исследовалась природа зеленой окраски гаюина с уникальной соразмерно модулированной кристаллической структурой и параметром ячейки 45,36 Å, который был назван гаюином-45Å. Методами оптической и колебательной спектроскопии совместно с квантово-химическими расчетами было установлено, что он содержит редкую полисульфидную группу S_5^{2-} -гош-конформера, которая придаёт ему зелёный цвет. В спектре поглощения гаюина-45Å (Рисунок 9) можно выделить три полосы с максимумами при 16 900 см⁻¹ (590 нм), 21 900 см⁻¹ (455 нм) и 25 600 см⁻¹ (390 нм). Самая интенсивная полоса при 25 600 см⁻¹ соответствует радикал-анионам $S_2^{\bullet-}$. Полоса при 16 900 см⁻¹ может быть связана с поглощением радикал-анионов $S_3^{\bullet-}$ и/или одновременным поглощением двух конформеров нейтральных молекул цис-S₄ и транс-S₄. Полоса при 21 900 см⁻¹ находится в области поглощения различных конформеров аниона S_5^{2-} .

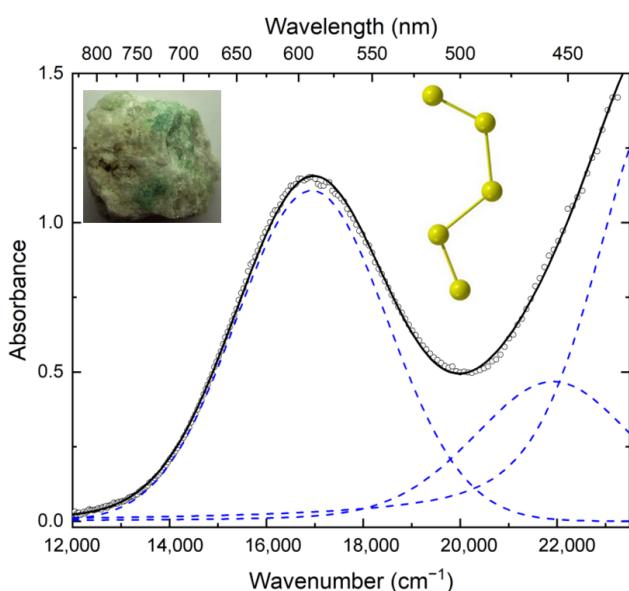


Рисунок 9 – Спектр поглощения гаюина-45Å, на вставках приведены фотография образца и гош-конформера аниона S_5^{2-}

Как показали квантово-химические расчеты, для изолированных пента-анионов серии, волновые числа наиболее интенсивных полос поглощения конформеров гош- S_5^{2-} -1 и гош- S_5^{2-} -2 равны 21 916 и 21 422 см⁻¹ соответственно. Последняя полоса гош- S_5^{2-} сопровождается слабой полосой при 22 477 см⁻¹. Наличие пентасульфидных анионов указывает на формирование в восстановительных условиях при температурах ниже 400°C.

Также были исследованы анион-радикалы $S_2^{\bullet-}$ в различных минералах группы содалита и канкринита. Люминесценция данных анион-радикалов находится в красной области спектра. Была построена цветовая диаграмма, характеризующая их люминесценцию

(рисунок 10). Показано, что геометрия полости влияет на положение полосы люминесценции анион-радикалов $S_2\bullet^-$.

CIE 1931

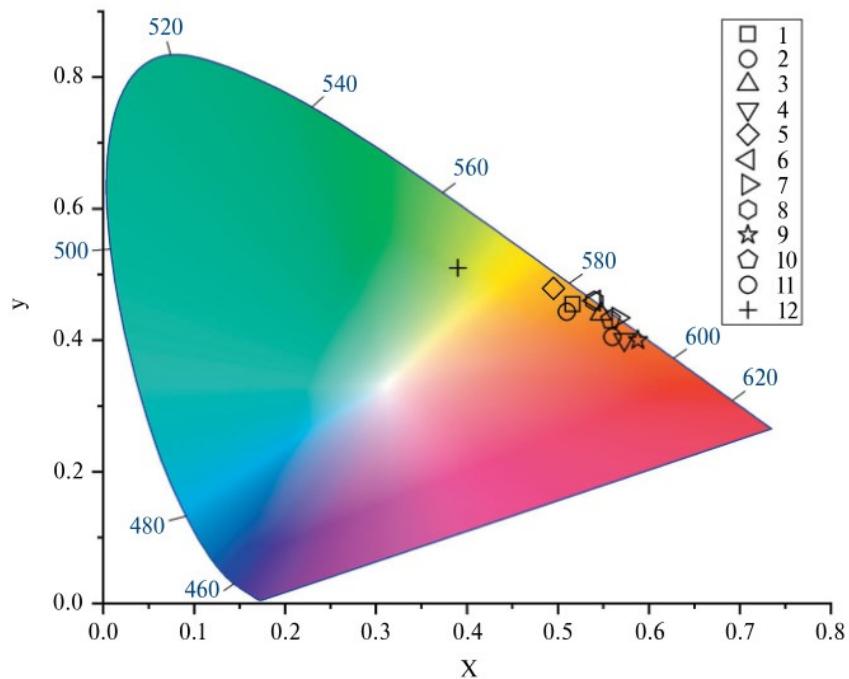


Рисунок 10 – Цветовые координаты люминесценции $S_2\bullet^-$ -содержащих минералов: афганита из месторождения Сари Санг, Афганистан (1), афганита из месторождения Ляджвардара, Таджикистан (2), нозеана из Айфеля, Германия (3), кианоксалита из Ловозерского массива, Кольский полуостров (4), голотипа слюдянкита (5), маринелита из палеовулкана Сакрофано, Италия (6), бъякелайта из Сакрофано (7), тутгупита из щелочного комплекса Илимаусак, Гренландия (8), баллираноита из Малобыстринского месторождения, Прибайкалье (9), гакманита из Инаглинского массива, Алданский щит (10), синего гаюина из Малобыстринского месторождения (11) и везувиана из Монцони, Италия (12)

Стабильность других сульфидных анион-радикалов и карбонатных групп будет показана ниже.

1.9 Термолюминесцентные монокристаллические детекторы

В Институте геохимии СО РАН в начале восьмидесятых годов прошлого столетия впервые в мире были разработаны монокристаллические термолюминесцентные детекторы (ДТГ-4) ионизирующего излучения на основе LiF:Mg,Ti [15,16]. Детекторы обладают широким комплексом уникальных свойств: широким диапазоном измеряемых доз и энергий (тканеэквивалентность), длительным хранением запасенной светосуммы (более года), многократностью использования (не менее 500 раз), высокой точностью измерения, избирательностью для смешанных полей гамма-нейтронного излучения, что и обеспечило их широкой применение в дозиметрической практике. В настоящее время все выпускаемые в России термолюминесцентные комплексы для индивидуального дозиметрического контроля комплектуются детекторами ДТГ-4. При использовании их в работах по ликвидации

последствий Чернобыльской аварии детекторы ДТГ-4 показали высокие характеристики и в 1986 году на основании специального Постановления СО АН СССР в Институте геохимии был организован опытный участок по производству детекторов ДТГ-4 с правом поставки их потребителям. Опытный участок продолжает работать в настоящее время с выпуском порядка 50 000 детекторов в год. Уникальный комплекс технических характеристик детекторов предъявляет очень жесткие требования к исходному сырью LiF, особенно в части кислородсодержащих примесей, концентрация которых не должна превышать 0,1 ppm. Для этих целей совместными усилиями с Институтом химии АН ТАДЖ ССР была разработана специальная технология получения фтористого лития, включающая получение гидрофторида лития из карбоната лития марки ОСЧ с последующей сушкой, прокалкой для разложения гидрофторида лития и последующего плавления LiF во фторирующей атмосфере [17]. Такая технология получения исходного фторида лития позволяет по созданной нами технологии [15] получать детекторы ДТГ-4, соответствующие техническим требованиям разработанных нами ТУ. Основные характеристики и механизмы термостимулированной люминесценции кристаллов LiF изложены в монографии [18].

В настоящее время вопрос исследования дефектов (центров захвата) в данных кристаллах, участвующих в механизме термolumинесценции, не теряет свою актуальность в связи с дефицитом сырья фторида лития в РФ и потребности в получении высокочувствительных детекторов на основе кристаллов LiF:Mg,Ti (ДТГ-4).

Магниевые центры окраски с полосой поглощения при 4,1 эВ (рисунок 11 а) ответственны за пик ТСЛ при 473К, (пик 5) используемый в дозиметрии гамма-бета-излучения [18], (рисунок 11 б). Наличие примеси Ti^{4+} приводит к увеличению интенсивности дозиметрического пика. Ионы Mg^{2+} замещают часть ионов Li^+ , при этом избыточный заряд компенсируется катионной вакансией (V_c). Ион Ti^{4+} может замещать ион Li^+ (при этом избыточный заряд компенсируется ионом кислорода O^{2-} в анионном узле и двумя катионными вакансиями V_c [18,19]. Спектр поглощения кристаллов LiF:Mg, Ti после рентгеновского облучения при комнатной температуре характеризуется полосами при 4.1 эВ, 4.96 эВ, и 6.2 эВ (рисунок 11 а). Полоса 4.96 эВ связана с поглощением F центров. Полоса 4.1 эВ связана с центрами магния (диполь $Mg^{2+}V_c$ захватывает электрон, и образуется Mg^+V_c центр)[18]. Полоса 6.2 эВ связана с титановыми центрами, в состав которых кроме Ti^{4+} (захватывающего один или два электрона) входят ионы O^{2-} [19].

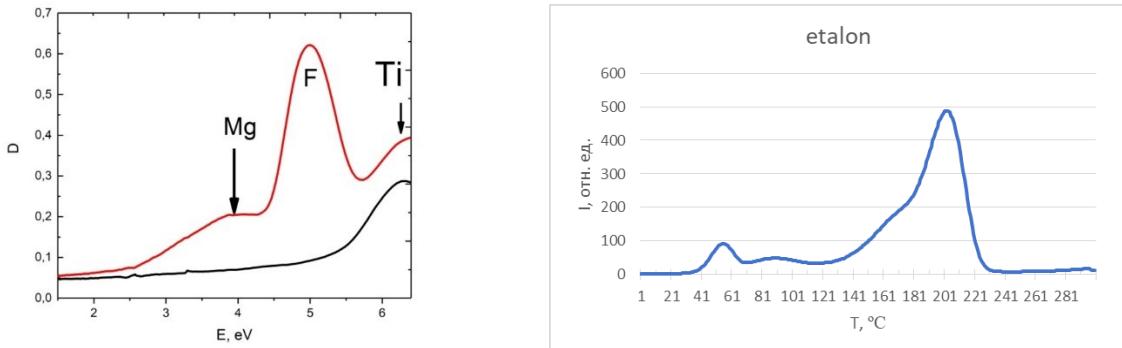


Рисунок 11 – а) Спектр поглощения радиационно-окрашенного кристалла LiF:Mg,Ti. черный – до облучения красный – после рентгеновского облучения при комнатной температуре. Спектр измерен при комнатной температуре. б) Кривая ТСЛ детектора ДТГ-4

Анализ спектров поглощения, измеренных при ступенчатом нагреве кристаллов в диапазоне температур 300-750 К позволил выявить различия в преобразовании центров наведенных при рентгеновском облучении в кристаллах LiF:Mg, Ti с различной чувствительностью. На рисунке 12 приведены спектры поглощения для радиационно - окрашенных при комнатной температуре кристаллов LiF:Mg, Ti с различной чувствительностью (от 0.3 до 0.85 относительно эталона). Спектры регистрировались при 300 К на спектрофотометре Lambda 950 Perkin Elmer. Кристаллы окрашивались рентгеновскими лучами (Pd анод, 25 мВ, 20 мА, 20 мин). После облучения при комнатной температуре кристалл нагревался до указанной температуры и снова охлаждался до 300 К, и повторялась регистрация спектра поглощения.

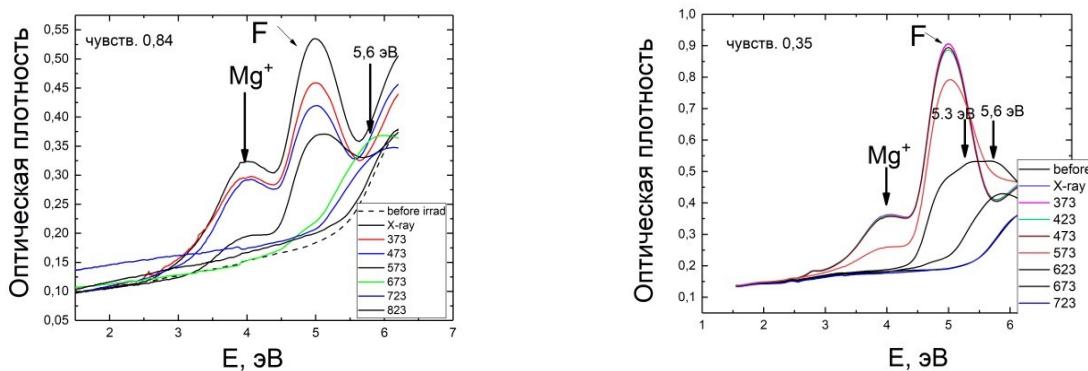


Рисунок 12 – Термическое разрушение радиационно-окрашенных кристаллов LiF:Mg, Ti с различной чувствительностью в температурном диапазоне 300-750 К. Измерения проводились при комнатной температуре после прогрева в течение 3 мин при указанных температурах

При нагревании до температуры 550 К наблюдается отжиг F-центров (полоса поглощения 4.96 эВ). При этом в спектрах высокочувствительных кристаллов LiF:Mg, Ti, (рисунок 12а) растет интенсивность полосы 5.62 эВ, полностью отжигаемая около 750 К. Полосу 5.6 эВ связывают с двухэлектронным центром с участием магния, а также анионной и катионной вакансий. Эти центры создаются при облучении в результате распада экситона

вблизи магниевого центра или благодаря сложному преобразованию F-центров при последующих нагревах и охлаждениях [18,20].

В кристаллах LiF:Mg,Ti с более низкой чувствительностью (менее 0.5) при нагревании до температуры 550К с отжигом F центров, помимо роста поглощения при 5.62 эВ, наблюдается вклад в полосу поглощения полосы с максимумом 5.3 эВ (рисунок 2 б). Эта полоса поглощения вероятно связана с образованием Ti²⁺ центров [21].

1.10 Особенности получения кристаллов LiF:Mg,Ti

В 2024 году были начаты исследования по вакуумной дистилляции фторида лития, с целью получения высококачественного сырья для изготовления термolumинесцентных монокристаллических детекторов ДТГ-4 на основе LiF:Mg,Ti. В 2025 году исследования были продолжены. Проведено 39 процессов очистки/дезактивации фторида лития методом вакуумной дистилляции. Получаемая в каждом процессе масса дистиллята позволяет провести 1-2 процесса (в среднем $\approx 1,6$) получения монокристаллических стержней для термolumинесцентной дозиметрии. В 2025 г. также проведено более 25 процессов по получению монокристаллических стержней на основе кускового LiF от процессов вакуумной дистилляции. По результатам менее 20 процессов стержни имели требуемый световой выход ТСЛ.

Стандартной схемой получения детекторов будем считать процедуру, начинающуюся с размещения внутри каналов формообразователя затравочных кристаллов, а сверху на формообразователе размещения предварительно активированного слитка LiF:Mg,Ti. Однако, при легировании кусков дистиллята LiF чистыми MgF₂, TiO₂ в ходе выплавки исходного для ростового процесса слитка есть особенности, выявленные в сравнении процедурой активации LiF, используемого в форме порошка (например, от процесса термического разложения LiHF₂).

Стартовый температурный профиль плавления шихты. Легирующие компоненты MgF₂, TiO₂ располагаются либо перед загрузкой LiF на самом дне тигля, либо после загрузки не более 1/4 массы порошкового или кускового LiF. В отличие от кускового LiF в случае с порошком допускается, что тигель может находиться в «конечном» верхнем положении, в котором максимальную температуру имеет дно тигля («холодный» старт). Когда основу шихты составляет кусковой LiF, то вместо «холодного» старта требуется постепенное поднятие тигля в горячую зону, при котором плавление загрузки начинается с верхних её слоёв. В «холодном» режиме дно тигля, где находится "подушка" из мелкого LiF с легирующими добавками, нагревается быстрее всего. LiF плавится, образуя локальный расплав. Поскольку тепло подводится снизу, а верхние слои крупных кусков LiF

остаются относительно холодными, дно тигля и пристеночная зона могут значительно перегреваться относительно средней температуры шихты до 100 гр. над Т_{пл}. Если исходить из того, что для реакций разложения координационных комплексов E_a = 80 - 160 кДж/моль, то в этих зонах локального перегрева возможно ускоренное в 2-4 раза термическое разложение комплексов (TiO)²⁺. При разложении образуются продукты, которые растворяясь в расплаве, образуют стабильные комплексы на основе нестехиометрических оксидов титана (Ti_nO_{2n-1}). Эти формы могут работать, как центры тушения или как центры паразитного свечения, когда слиток имеет либо голубую, либо светло-зелёную ФЛ. Также возможно восстановление TiO₂ углеродом, особенно той его части, что успела осесть на стенке графитового тигля прежде, чем на кусках LiF. Кроме того, чисто физическое растворение TiO₂ в расплаве LiF ускоряется с температурой. При резком, неравномерном растворении в зоне перегрева могут создаваться локальные области с перенасыщением по титану, что приводит к быстрому образованию кластеров (зародышей) именно тех фаз, которые термодинамически выгодны в этих нестационарных условиях, но к которым не относится необходимый нам ион (TiO)²⁺. При активации кускового дистиллята LiF с более мягким режимом плавления («горячий» старт) слитки имели синюю ФЛ.

Уровень вакуума до момента напуска инертного газа. Его экспериментально наблюдаемое влияние объясняется исходя из конкуренции между образованием комплекса (TiO)²⁺, как целевого процесса для синей ФЛ и нужных характеристик ТСЛ, и восстановлением титана. При выключенном паромаслянном насосе остаточного давления ~10⁻² мм.рт.ст хватает для обеспечения следового количества кислорода, необходимого и достаточного, чтобы стабилизировать титан в степени окисления +4 в формирующемся комплексе (TiO)²⁺. При включённом паромаслянном насосе (~10⁻³ мм.рт.ст.) возникают восстановительные условия (отсутствие O₂, контакт с углеродом тигля), при которых TiO₂ становится неустойчивым. Он начинает восстанавливаться на поверхности частиц TiO₂ или в расплаве. Образуются нестехиометрические оксиды титана с более низкой валентностью (Ti³⁺ и др.) или даже элементарный титан. Эти формы могут работать, как центры тушения или как центры паразитного свечения, когда слиток имеет не синюю, а голубую или светло-зелёную ФЛ.

Дистиллированному LiF в сравнении с порошком LiF не хватает большой реакционноспособной поверхности, равномерного предварительного контакта с легирующими добавками и некоторых химических компонентов. В процессе высоковакуумной сушки порошка на полках 100-150 °C, 400-450 °C, 700-750 °C, происходит выделение различных форм воды, что предотвращает макрокинетические проблемы при плавлении (гидролиз, пузыри в расплаве, вспенивание шихты).

2 КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

2.1 Квантово-химические расчеты зонной структуры кристаллов

В продолжении поиска перспективных сцинтилляторов с возможностью оставно-остовной люминесценции в этом отчетном периоде было проведено исследование смешанных фторидных кристаллов (BaLiF_3 , BaCaF_4 , BaSrF_4 , SrCaF_4), активированных разными примесями. Расчеты проводились с помощью программного продукта VASP. Для расчетов были построены суперячейки $2\times 2\times 2$ на основе элементарных ячеек. Позиции атомов в элементарных ячейках были частично взяты из кристаллографических баз (при наличии), либо построены по аналогии со SrF_2 и оптимизированы программой. Здесь необходимо отметить, что для кристалла BaSrCaF_6 постоянная решетки очень близка к кристаллу SrF_2 , поэтому логично предположить, что для смешанных кристаллов щелочноzemельных фторидов постоянная решетки будет средней величиной от постоянных решетки составляющих фторидов. Результаты расчетов подтвердили это предположение. Кроме того, нами были произведены серии расчетов по поиску наиболее энергетически выгодной структуры смешанных кристаллов. Были созданы и оптимизированы 50 структур смешанных кристаллов каждого типа. Однако, оказалось, что энергетически выгодной структуры не существует и разница полных энергий оказалась менее 0.1 эВ. Таким образом, в изучаемых нами кристаллах BaCaF_4 , BaSrF_4 , SrCaF_4 катионы расположены случайным образом. Для компенсации избыточного заряда трехвалентной примеси был добавлен ион фтора. Расчеты оптимизации геометрии были проведены в рамках градиентной аппроксимации с использованием обменно-корреляционного псевдопотенциала PBEsol. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось по Г-центрированной сетке из 8 k-точек в неприводимой части зоны Бриллюэна. Оптимизация геометрии проводилась с сохранением формы и объема ячейки. Сходимость считалась достигнутой, если разница в полных энергиях между двумя итерациями не превышала 10-6 эВ. Расчеты ширины запрещенной зоны кристаллов щелочноземельных фторидов были выполнены с помощью гибридного потенциала PBE0. Известно, что использование функционала плотности с потенциалом PBEsol для расчетов в полупроводниках и диэлектриках приводит к делокализованным электронным состояниям и, соответственно, к заниженным величинам энергии запрещенной зоны. Однако использование гибридного функционала дает величину запрещенной зоны для ионных кристаллов, сопоставимую с экспериментальными данными.

Результаты проведенного исследования приведены на рисунке 13 и в таблице 1. При этом для матриц BaCaF_4 , BaLiF_3 и BaSrF_4 расчеты предсказывают наличие кросслюминесценции, характеризующейся эффективным переносом энергии возбуждения с ка-

тионной подрешетки матрицы на оставные уровни примесных центров. Анализ электронной структуры показал, что введение примесных ионов в катионные позиции кристаллической решетки приводит к формированию локализованных состояний под оставной зоной, которые выступают эффективными центрами рекомбинации. Полученные результаты позволяют рекомендовать эти кристаллы для дальнейшего экспериментального исследования - синтеза монокристаллов и комплексного изучения их люминесцентных характеристик, включая квантовый выход, кинетику свечения и радиационную стойкость. В частности, системы на основе BaLiF_3 демонстрируют наиболее сбалансированное сочетание электронных характеристик и разнообразие активаторных центров, что делает их особенно перспективными для разработки новых эффективных сцинтилляторов.

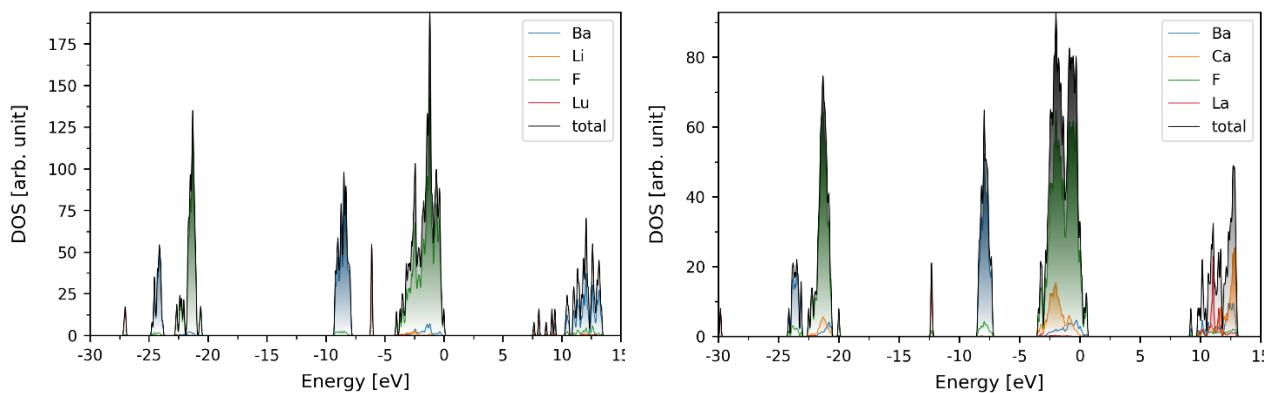


Рисунок 13 – Рассчитанные плотности состояний (DOS - the Density of States) для смешанных фторидов $\text{BaLiF}_3\text{-Lu}^{3+}$ (слева) и $\text{BaCaF}_4\text{-La}^{3+}$ (справа)

Таблица 1 – Сводная таблица результатов согласно проведенным расчетам. Плюсом отмечена возможность перехода с оставных уровней примеси на валентную/остовную зону кристалла

Кристалл	Нет примеси	La^{3+}	Lu^{3+}	Y^{3+}	Cd^{2+}
BaLiF_3	остовно-валентная	+	+		+
BaCaF_4	остовно-валентная, остовно-остовная	+			+
BaSrF_4	остовно-валентная, остовно-остовная			±	+
SrCaF_4	остовно-валентная			±	+

2.2 Классификация спектров комбинационного рассеяния

В этом году также были проведены работы по поиску лучшей архитектуры для классификации спектров комбинационного рассеяния с помощью методов глубокого обучения. В рамках данного исследования была предпринята попытка классификации спектров с использованием библиотеки Faiss (Facebook AI Similarity Search), которая представляет собой мощный инструмент для эффективного поиска и классификации данных в задачах, связанных с большими объемами информации. Faiss предлагает широкий спектр

методов, включая поиск по косинусному расстоянию, евклидову расстоянию и манхэттенскому расстоянию, а также продвинутые методы, такие как IVFlat, PQ и HNSW, которые позволяют оптимизировать процесс поиска и снизить вычислительные затраты [22].

Для сравнения эффективности различных методов поиска были проведены эксперименты с использованием косинусного, евклидова и манхэттенского расстояний. Косинусное расстояние, которое основано на косинусе угла между векторами в многомерном пространстве, показало наилучший результат с метрикой $\text{Recall}@5 = 75,5\%$. Это согласуется с исследованиями, демонстрирующими, что косинусное расстояние эффективно для задач, связанных с определением сходства между объектами, такими как тексты или изображения [23]. Евклидово расстояние, измеряющее "прямое" расстояние между точками, и манхэттенское расстояние, основанное на сумме абсолютных разностей координат, показали несколько меньшую эффективность в данной задаче [24]. Необходимо отметить, что для инфракрасных спектров метрика $\text{Recall}@5$ при использовании косинусного расстояния превышает значение 90%, что связано с тем, что ИК спектры для одного минерала хорошо воспроизводимы. При исследовании же спектров комбинационного рассеяния эта же метрика становится существенно ниже, что связано со спецификой эксперимента по регистрации спектров.

Одной из ключевых особенностей Faiss, обеспечивающей её гибкость и удобство использования, является механизм "фабрик индексов" (index factories). Этот механизм позволяет пользователям конфигурировать сложные индексы с помощью простого текстового описания, что значительно упрощает процесс экспериментирования с различными методами индексирования. Фабрики индексов в Faiss позволяют комбинировать различные методы в единый конвейер. Например, строка конфигурации "IVF4096,PQ64" создаёт индекс, который использует IVF для грубого поиска и PQ для сжатия векторов. Такой подход позволяет достичь оптимального баланса между точностью поиска и вычислительной эффективностью, что особенно важно при работе с данными большого объёма. Это делает Faiss универсальным инструментом, который может быть адаптирован под различные задачи и требования к производительности. Подобная гибкость особенно полезна в задачах, где необходимо учитывать ограничения на вычислительные ресурсы и память, такие как поиск в миллиардных наборах данных [25]. В данной работе мы также провели исследования на наших данных используя фабрику индексов от Faiss. Результаты представлены на рисунке 14. Видно, что сочетание дают большую метрику чем косинусное расстояние (отмеченное на рисунке красным пунктиром), при этом время обработки данных и занимаемая память не выходят за рамки разумных для этих задач значений. Однако, метрика остается

достаточно низкой, поэтому следующим шагом стало использование методов глубоко обучения, включая простые и сверточные нейронные сети.

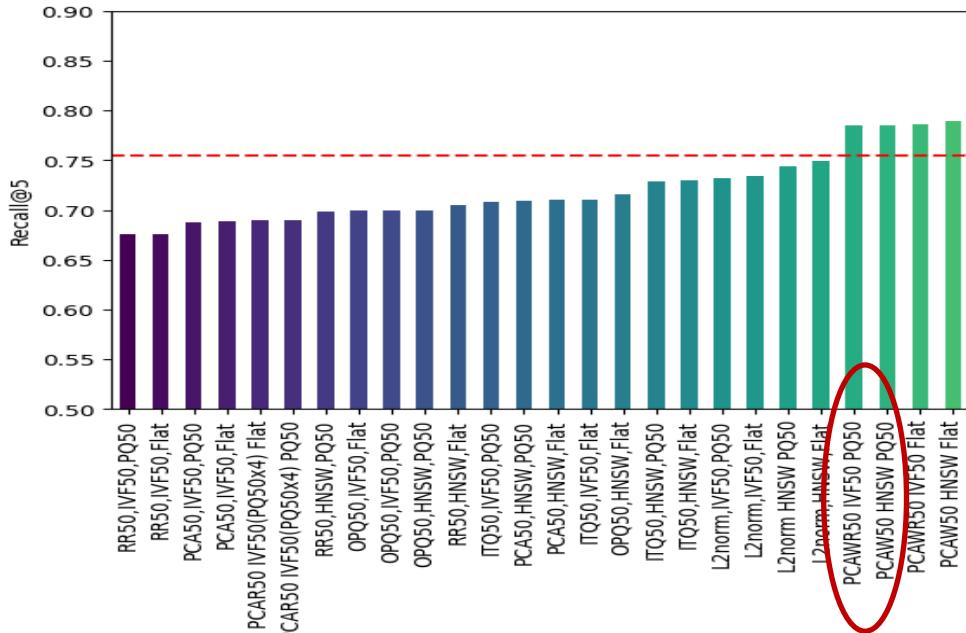


Рисунок 14 – Recall@5 поиска по Index Factory of FAISS

В отчете рассматриваются три архитектуры нейронных сетей, каждая из которых демонстрирует различные подходы к обработке данных и решению задач классификации. Первая модель представляет собой многослойный перцептрон (MLP), вторая — классическую сверточную нейронную сеть (CNN), а третья — расширенную версию CNN с дополнительными слоями нормализации и регуляризации (рисунок 15).

Многослойный перцептрон (MLP) является базовой архитектурой, состоящей из трёх полносвязных слоёв. Первый слой преобразует входные данные размерности в скрытое представление размерности 256, второй слой уменьшает размерность до 128, а третий слой выполняет финальную классификацию, выдавая выход размерности равной количеству классов. В качестве функции активации используется ReLU (Rectified Linear Unit), что позволяет сети эффективно обучаться за счёт устранения проблемы затухающих градиентов. MLP подходит для задач, где данные имеют низкую размерность и не требуют учёта пространственных зависимостей [25].

Вторая модель представляет собой классическую одномерную сверточную нейронную сеть (CNN), которая эффективно обрабатывает данные с пространственной структурой, такие как временные ряды или последовательности. Архитектура включает два сверточных слоя с ядрами размерности 3 и 16/32 фильтрами соответственно, за которыми следуют слои макс-пулинга с размером окна 2. После сверточных слоёв данные преобразуются в одномерный вектор и передаются в полносвязные слои для классификации. CNN де-

монстрирует высокую эффективность в задачах, где важно учитывать локальные зависимости в данных, таких как обработка сигналов или текстов [26].

Третья модель представляет собой расширенную версию CNN, которая включает три сверточных слоя с увеличенным количеством фильтров (32, 64 и 128 соответственно), а также слои пакетной нормализации (Batch Normalization) и dropout для улучшения обобщающей способности сети. Пакетная нормализация ускоряет обучение и стабилизирует процесс градиентного спуска, а dropout (с вероятностью 0.5) предотвращает переобучение. Такая архитектура особенно полезна в задачах с ограниченным объёмом данных, где важно избежать переобучения и улучшить качество модели [27].

Результаты использования обученных нейросетей представлены на рисунке 16.

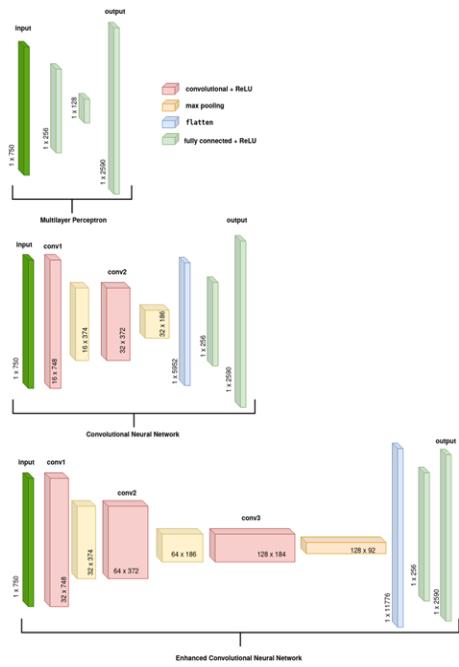


Рисунок 15 – Архитектуры нейронных сетей: (а) Многослойный персепtron (MLP), (б) Свёрточная нейронная сеть (CNN), (с) Улучшенная сверточная нейронная сеть (CNN)

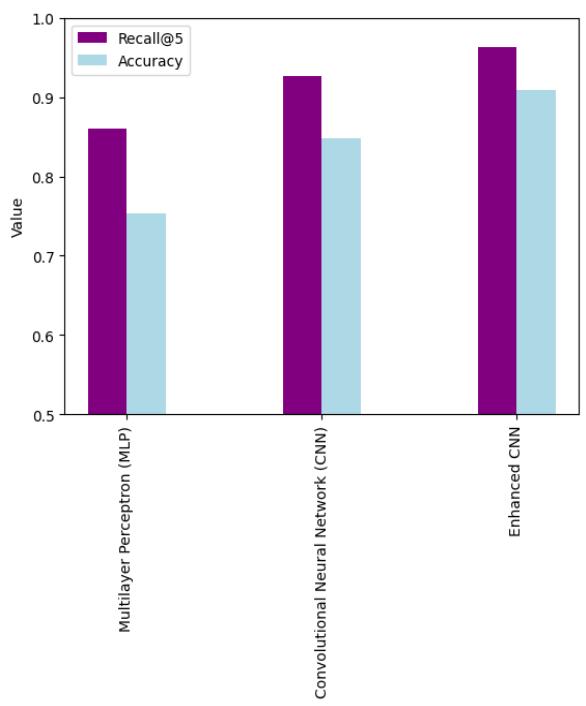


Рисунок 16 – Сравнение производительности архитектур нейронных сетей: Accuracy и Recall@5 для моделей MLP, CNN, и улучшенной CNN

Расширенная сверточная нейронная сеть продемонстрировала наилучшие результаты по метрикам accuracy (0.9086) и recall@5 (0.9627) по сравнению с базовыми архитектурами MLP и CNN. Метрика accuracy показывает, что модель корректно классифицирует более 90% образцов, что является высоким результатом для задач анализа спектров комбинационного рассеяния. Наши результаты находятся на одном уровне с результатами, представленными в работах [28,29], а как будет показано далее при комбинации с методом главных компонент даже превосходят их. Метрика recall@5 (0.9627) указывает на то, что в 96.27%

случаев правильный класс находится среди пяти наиболее вероятных предсказанных классов. Это подтверждает, что наша модель эффективно справляется с задачей ранжирования классов, что особенно важно для задач, где критично минимизировать количество пропущенных целевых классов, например, при диагностике заболеваний или идентификации химических веществ.

Для дальнейшего улучшения результатов можно рассмотреть несколько подходов. Во-первых, использование более сложных архитектур, таких как ResNet или DenseNet, которые показали высокую эффективность в задачах анализа спектров [30]. Во-вторых, применение методов аугментации данных, таких как добавление шума или сдвигов спектров, что позволит увеличить разнообразие обучающей выборки. В-третьих, использование трансферного обучения на предобученных моделях, что может быть особенно полезно при ограниченном объёме данных.

Таким образом, наша модель демонстрирует конкурентоспособные результаты в сравнении с современными работами в области анализа спектров комбинационного рассеяния, а предложенные подходы к улучшению открывают перспективы для дальнейшего повышения точности и надёжности модели.

2.3 Полисульфидные группы в содалит- и канкринитподобных материалах

Микропористые материалы со структурой содалита и канкринита находят применение в различных технологических областях и исследуются в качестве перспективных материалов для использования в качестве фильтров [31,32]; материалов для обращения с радиоактивными отходами [33,34], материалов для создания внутри содалитовой полости квантовых точек с высоконелинейными оптическими свойствами [35], материалов для сверхпроводимости [36] и др. Их уникальные свойства обусловлены способностью размещать в структурных полостях гостевые анионы, радикалы и нейтральные молекулы.

Полисульфидные комплексы S_2^{2-} , S_3^{2-} , S_4^{2-} , S_4 , S_5^{2-} , S_6 (в слюдянкаите) - наиболее распространенные центры окраски в полевых шпатах [37]. Установлено, что S_2^{2-} , S_5^{2-} , S_6 придают желтую окраску, S_3^{2-} - голубую, S_4 является красным хромофором [38-40]. Одновременное присутствие полисульфидных комплексов дает результирующие оттенки. До недавнего времени теоретические расчеты полисульфидных комплексов в содалитовой полости не проводились, что осложняло интерпретацию спектроскопических данных. В частности, оставалось неизвестным, как катионное окружение влияет на спектроскопические свойства.

В содалитовой полости минерала сапожниковит $Na_8(Al_6Si_6O_{24})(HS)_2$ были изучены структурные и спектроскопические свойства полисульфидных анионов, анион-радикалов

и нейтральных молекул Sn^{2-} , Sn^+ , Sn ($n = 1 - 6$). Теоретические расчеты проводились по двухэтапной схеме: оптимизация геометрии в рамках периодического расчета и расчет спектроскопических характеристик с помощью метода встроенного кластера. На первом этапе использовался программный комплекс VASP [41], на втором - комплекс ORCA [42], все расчеты проводились в рамках теории функционала плотности. В ходе оптимизации геометрии вектора решетки были фиксированы на экспериментальных значениях, а позиции атомов оптимизировались до сил не более 0.001 эВ/Å. Анион-радикалы моделировались в содалитовой полости путем замены аниона HS^- на исследуемый анион-радикал, анионы и нейтральные молекулы моделировались в ячейках с заменой Na на Ca либо с вакансией Na для компенсации заряда. Оптимизация геометрии проводилась с функционалом PBEsol. Расчеты ЭПР, рамановских спектров и спектров поглощения в видимой области выполнялись с функционалом B3LYP. Колебательные частоты вычислялись по методу центральных разностей, оптические спектры рассчитывались по методу TDDFT.

Катионное окружение в содалитовой полости приводит к стабилизации множества структурных конформаций полисульфидных комплексов (Рисунки 17, 18). Кроме того, геометрия

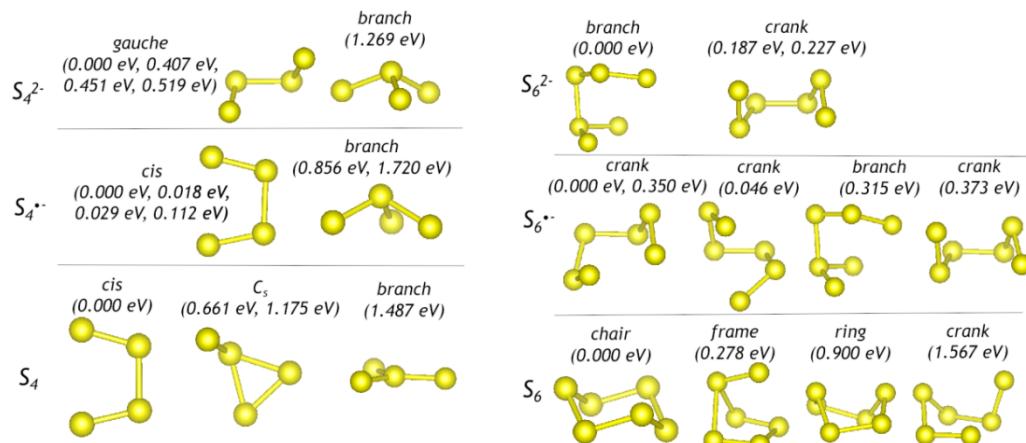


Рисунок 17 – Структуры и относительные энергии тетра- и гексасульфидных групп в сапожниковите

комплекса искажается в зависимости от его ориентации в полости. Так, для S_4^{2-} были оптимизированы искаженные конформации gauche с относительными энергиями от 0.000 эВ до 0.519 эВ на ячейку моделирования, они имеют двугранные углы от 47° до 63° . Для S_4^+ оптимизированы конформации cis с энергиями от 0.000 эВ до 0.112 эВ и двугранными углами от 0.5° до 6° и две конформации branch с относительной энергией 0.856 эВ (вершинный угол 27°) и 1.720 эВ (вершинный угол 13°). Подобное разнообразие характерно и для других комплексов. Для S_5 получен ряд структур, принадлежащих к одному типу (crank либо branch), но различающихся ориентацией в полости и относительной энергией, а также положениями полос в рамановских и оптических спектрах. Для S_6 также рассчитаны

разветвленные, неразветвленные и кольцевые конформации. В зависимости от заряда и состава катионного

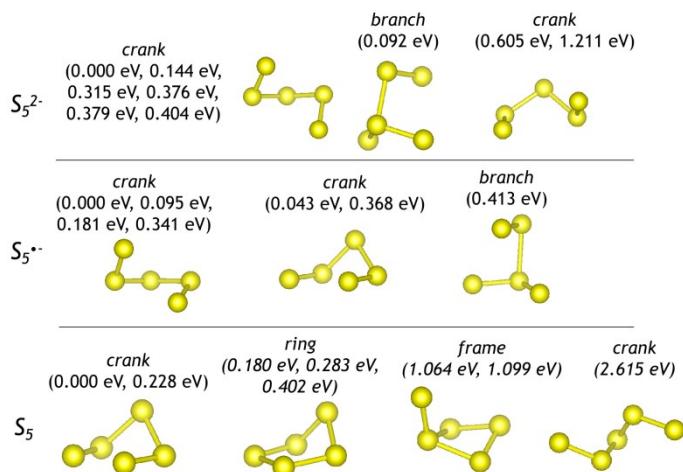


Рисунок 18 – Структуры и относительные энергии пентасульфидных групп в сапожниковите

окружения, стабильными оказываются разные конформации полисульфидных групп. Так, для S_6^{2-} (с тремя Na и одним Ca в полости) наиболее стабильной будет разветвленная конформация branch; для S_6^{+-} - неразветвленная crank, а для нейтральной молекулы S_6 (с вакансиею Na) конформация crank замыкается и превращается в кольцевую chair. Таким образом, согласно расчетам, при вариации катионного состава в содалитовой полости могут стабилизироваться различные по геометрии конформации полисульфидных комплексов.

Спектроскопические характеристики наиболее стабильных конформаций для каждой полисульфидной группы представлены в таблице 2. По результатам сопоставления расчетных и экспериментальных данных, полосы около $442\text{--}447\text{ см}^{-1}$ и $506\text{--}508\text{ см}^{-1}$ в спектрах минералов группы канкринита, принадлежащих к твердым растворам быстрита–сульфигидрилбыстрита, соответствуют различным crankshaft (crank) конформациям S_5^{2-} аниона. Полосы около 284 см^{-1} и 477 см^{-1} в рамановских спектрах слюдянкита соответствуют деформационным и валентным колебаниям молекул S_6 . В оптических спектрах полосы поглощения около $350\text{--}450\text{ нм}$ были соотнесены с S_2^{2-} ; $590\text{--}610\text{ нм}$ - с S_3^{2-} ; $\sim 300\text{ нм}$ - с S_6 , а полосы ниже 460 нм - с S_5^{2-} группами в полевых шпатах. В частности, полосы около 380 нм и 456 нм , относящиеся к S_5^{2-} , присутствуют в спектрах быстрита и S_5^{2-} -содержащего гаюина- 45 \AA .

Таблица 2 – Качественные характеристики рамановских и оптических спектров наиболее стабильных конформаций для каждой из полисульфидных групп.

	Волновое число, см^{-1} (рамановская активность, $\text{\AA}^4/\text{amu}$)	Длина волны, нм (молярный коэффициент поглощения, $\text{M}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$)
HS^-	2568 (122.3)	224 (1730), 223 (1818), 181 (2226), 179 (4390)
S_2^{2-}	501 (37.8)	368 (174), 327 (119), 271 (106), 250 (12), 241 (413)
S_2^{+-}	603 (37.8)	370 (1675), 308 (169), 305 (140), 282 (89), 220 (78)
S_2	673 (21.4)	282 (5), 267 (140)

Продолжение Таблицы 2

S_3^{2-}	303 (2.0), 512 (10.9), 521 (3.5)	405 (53), 284 (453)
S_3^{-}	283 (5.1), 553 (60.1), 611 (28.8)	571 (1642), 257 (308), 248 (616)
S_3	273 (13.3), 545 (32.4), 696 (13.1)	378 (2046)
$gauche^1-S_4^{2-}$	262 (4.3), 278 (2.6), 303 (3.7), 461 (7.0), 507 (7.2), 552 (7.7)	348 (11), 345 (41), 322 (15), 312 (61)
$cis^1-S_4^{-}$	229 (2.0), 253 (3.7), 312 (13.7), 364 (70.1), 598 (6.5), 640 (23.1)	790 (1067), 685 (55), 359 (333), 331 (27)
$cis-S_4$	198 (6.1), 234 (0.2), 343 (8.1), 411 (31.8), 643 (2.6), 676 (22.5)	372 (3239)
$crank^1-S_5^{2-}$	245 (4.0), 268 (1.1), 279 (1.1), 283 (2.5), 313 (5.8), 424 (10.2), 486 (13.9), 547 (3.3), 561 (6.0)	412 (20), 381 (190), 341 (59)
$crank^1-S_5^{-}$	206 (10.3), 233 (7.8), 242 (5.1), 270 (1.6), 306 (13.2), 427 (17.8), 486 (26.4), 544 (9.7), 597 (19.3)	918 (1029), 734 (58), 617 (236), 532 (264), 490 (35), 435 (96), 412 (101), 343 (44), 342 (86)
$crank^1-S_5$	215 (1.1), 234 (1.2), 292 (8.5), 304 (12.4), 305 (11.2), 387 (3.6), 488 (7.6), 556 (21.5), 562 (0.7)	451 (28), 344 (832)
$branch-S_6^{2-}$	226 (3.8), 233 (3.9), 244 (7.7), 252 (0.5), 259 (6.2), 287 (3.7), 310 (52.7), 333 (3.8), 510 (7.5), 564 (11.0), 566 (4.92), 634 (4.3)	459 (1388), 394 (97), 369 (80), 338 (82)
$crank^1-S_6^{-}$	191 (2.9), 208 (2.3), 223 (12.9), 244 (35.4), 279 (24.8), 286 (1.0), 310 (2.2), 459 (6.1), 482 (1.4), 501 (16.4), 546 (6.2), 561 (7.8)	721 (576), 561 (47), 492 (465), 443 (32), 416 (123), 400 (358), 390 (111), 368 (135), 337 (119)
$chair-S_6$	168 (2.6), 186 (0.2), 221 (7.8), 223 (7.2), 294 (10.2), 345 (1.1), 422 (0.2), 482 (2.6), 488 (2.7), 494 (0.4), 498 (2.0), 508 (28.2)	296 (14), 290 (4), 287 (2)

2.4 Квантово-химические расчёты структурных и спектроскопических свойств центров Sm^{2+} в CsI .

В кристалле CsI были исследованы два типа дипольных комплексов $\text{Sm}^{2+}-\text{Vac}_{\text{Cs}}$, определен характер колебательных мод комплекса $[\text{Sm}^{2+}\text{I}_8]^{6-}$.

Расчёты проводились с помощью теории функционала плотности. На первом этапе геометрия кристалла CsI , содержащего примесный ион Sm^{2+} , оптимизировалась в рамках периодических граничных условий с помощью программного пакета CP2K [43]. На втором этапе колебательные частоты рассчитывались на основе оптимизированной геометрии с помощью программного пакета ORCA. Расчеты показали, что при замещении $\text{Cs}^+\rightarrow\text{Sm}^{2+}$ с вакансационной компенсацией заряда симметрия центра снижается до C_{2v} . Рассчитанные спектры комбинационного рассеяния кластера SmI_8 состоят из четырёх отдельных групп полос (рисунок 19). Первая группа, расположенная около 30 cm^{-1} , соответствует деформационным колебаниям октаэдра SmI_8 с симметрией T_{2g} . Вторая группа, наблюдаемая в диапазоне $50\text{--}63 \text{ cm}^{-1}$, связана с валентными колебаниями симметрии E_g . Полоса при 80 cm^{-1} соответствует симметричным валентным колебаниям. Четвёртая группа, находящаяся в диапазоне $100\text{--}120 \text{ cm}^{-1}$, в первую очередь активна в инфракрасном поглощении и относится к асимметричным валентным колебаниям.

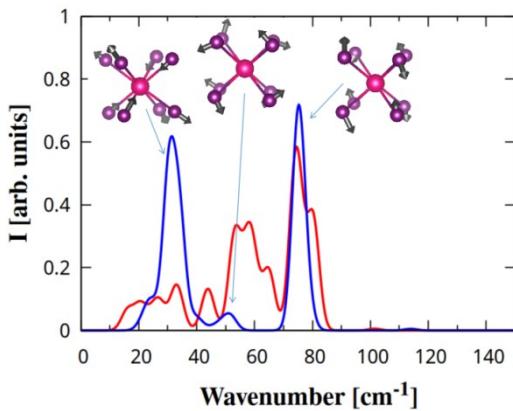


Рисунок 19 – Рассчитанный спектр комбинационного рассеяния кластера $[\text{Sm}^{2+}\text{I}_8]^{6-}$. Красная линия соответствует расчету с ионом Sm^{2+} и вакансиеей Cs в ближайшем узле, синяя линия соответствует более симметричному случаю, когда компенсация заряда достигалась за счет равномерно распределенного отрицательного заряда

2.5 Неэмпирический метод встроенного кластера

В ходе выполнения проекта нам удалось существенно продвинуться в развитии методов расчета точечных дефектов в твердотельных материалах [44]. А именно, нами была предложена новая формулировка метода встроенного кластера, или, несколько шире, гибридных методов типа QM/MM. Данные методы широко применяются в расчетах биомолекул, и число работ растет из года в год, однако в физике конденсированного состояния эти методы переживают определенный упадок. Чаще всего вместо встроенного кластера используются периодические расчеты методом функционала плотности, так как они не требуют сложной подготовительно работы, необходимой для расчетов QM/MM. Несколько не умаляя ценности таких расчетов, следует также сказать и о присущих им ограничениях. В периодических расчетах DFT невозможно, как правило, оптимизировать геометрию в возбужденном состоянии системы, поэтому невозможен расчет люминесценции. Высокоточные расчеты дефектов, содержащих редкоземельные элементы, требуют учета релятивистских поправок и корреляционных эффектов, т.е. использования методов хотя бы на уровне CASSCF или CASPT2. Все это в периодических расчетах DFT недоступно, поэтому метод встроенного кластера надо приспособить к эффективному применению в современных условиях в физике материалов.

Что же мешает его применению? Причин несколько: 1) Для расчета QM/MM необходимы классические потенциалы для области MM. Если для биомолекул имеются общепризнанные силовые поля типа AMBER или CHARMM, то для материала, содержащего потенциально любые элементы периодической таблицы, ничего подобного нет. Так называемые «универсальные» силовые поля типа UFF, к сожалению, не позволяют описать структуру даже достаточно простых кристаллов. Итак, первая проблема - где взять потен-

циалы для области MM. 2) Гибридный метод типа QM/MM требует состыковать области системы с разным уровнем расчетно-теоретического описания (т.е., чаще всего - квантово-механическое и молекулярно-механическое). Идеально согласовать силы на границе кластера, как правило, невозможно, что приводит к ряду искажений на этой границе. Взвесив данные недостатки кластерных методов и поняв, что даже в расчете бездефектного кристалла получаться нефизические искажения геометрии, потенциальный пользователь этих методов делает выбор в пользу периодического DFT.

В 2025 г. для решения упомянутой проблемы метода встроенного кластера - искажений на его границе - нами предложен метод, который можно назвать методом устранения несогласованных сил (Force Inconsistency Elimination - FIE). Как отмечалось, если в качестве кластера выбрать фрагмент бездефектного кристалла в идеальной геометрии, то различия между силами внутри и снаружи кластера приведут к тому, что суммарные силы окажутся ненулевыми по величине (мы будем дальше называть их "несогласованными силами" или Force inconsistency), что, в свою очередь, создаст при оптимизации геометрии отклонения от геометрии идеального кристалла. Данные отклонения безусловно являются артефактом метода встроенного кластера.

Обозначим положения атомных ядер в системе $R = \{R_i\}$, $i = 1..N$. Идеальная геометрия, в который заведомо силы должны равняться нулю, будет обозначаться $R_{(0)}$. Несогласованные силы, от которых необходимо избавиться, обозначим $F_{(0)}$. Поскольку силы связаны с потенциальной энергией обычным образом: $F = -\partial U / \partial R$,

то для этого достаточно было бы использовать добавку к потенциальной энергии в виде

$$\Delta U = F_{(0)} \cdot (R - R_{(0)})$$

Произведение здесь подразумевается скалярное. Нетрудно видеть, что такая добавка к энергии дает поправку к силам, в точности равную $-F_{(0)}$. Однако это вряд ли можно назвать удачным решением, поскольку это означает, что ко всем атомным силам добавили однородное силовое поле, а потенциальная энергия, в свою очередь, получила линейную зависимость от коллективной координаты, отвечающей за смещение всех атомов в направлении силы $F_{(0)}$. Абсолютная величина этой добавки растет неограниченно при изменении данной координаты, при этом может быть как положительной, так и отрицательной. Появление нефизических минимумов потенциальной энергии при таком подходе - вопрос времени.

Однако, можно поступить более изощренно. Возьмем функцию $f(x)$, представляющую собой сглаженную ступеньку, т.е. $f(-\infty) = 0$, $f(+\infty) = 1$, $f'(x) > 0$. x будет той самой коллективной координатой

$$x = F_{(0)} \cdot (R - R_{(0)}) / |F_{(0)}|$$

Рассмотрим добавку к потенциальной энергии в виде

$$\Delta U = A f(\alpha x)$$

Здесь A и α - некоторые константы.

Дифференцирование данной поправки по ядерным координатам при $x = 0$ ($R = R_{(0)}$) показывает, что при $\alpha = |F_{(0)}| / (f'(0)A)$ добавка к силам тоже получится равной $-F(0)$. При этом величина $A = \Delta U_0$ – это максимальное значение поправки к потенциальной энергии, ее нужно подобрать из каких-то дополнительных соображений.

Удобно выбрать в качестве “сглаженной ступеньки” функцию Ферми-Дирака $f(x) = (1 + e^x)^{-1}$, тогда ее производная в нуле $f'(0) = 1/4 = 0.25$, и обозначив, получаем $\alpha = 4|F_{(0)}| / \Delta U_0$.

Данный метод чрезвычайно прост в реализации.

Для его тестирования мы использовали периодический расчет DFT, заведомо свободный от подобных искажений, и целенаправленно «испортили» его энергию добавкой нефизических парных потенциалов, а затем пронаблюдали, как поправка FIE исправляет эти искажения. Тестирование проводилось на таких объектах, как нейтральная кислородная вакансия и E'-центр в кристаллическом кварце. Результаты тестирования вполне обнадеживающие - предложенная поправка действительно справляется с задачей устранения описанных искажений. Данные результаты готовятся к публикации.

В ходе тестирования мы реализовали интерфейс между нашим кодом SEAMLESS и пакетом CP2K. Это открывает дополнительные новые возможности. Пожалуй, наилучшим выходом из описанного ранее тупика (отсутствие надежных параметризаций классических потенциалов для большинства кристаллов) является гибридный метод QM/PDFT, т.е. квантовый кластер, встроенный в периодический расчет DFT (PDFT - periodic DFT). Разумеется, расчет PDFT тоже квантовомеханический, поэтому его противопоставление методам QM некорректно. Однако этот расчет и в идейном, и в алгоритмическом плане сильно отличается от молекулярных квантовохимических методов. Наличие интерфейса между пакетом CP2K для периодических расчетов и нашей оболочкой SEAMLESS для кластерных расчетов открывает возможность реализовать подобный гибридный метод QM/PDFT, тем самым вдохнув в методы эмбеддинга новую жизнь

3 ВЫСОКОЧИСТОЕ КВАРЦЕВОЕ СЫРЬЕ ВОСТОЧНОЙ СИБИРИ

За период с 2021 по 2025 гг. проведено изучение кварцевых жил и кварцитов Гарганской кварцитоносной зоны Восточносаянского кварценосного района, получены первые изотопно-геохимические данные о кварцевых жилах и кварцитах Ундинской кварцевожильной зоны (южная часть хр. Борщовочный) и кварцевых и пегматитовых жил Кулиндинской зоны Аргунского блока Монголо-Охотского складчатого пояса [45] и начато исследование силекситов месторождения Гора Кварцевая, расположенного в зоне сочленения Удино-Витимской островодужной системы и Яблоново-Малханского террейна [46] (рисунок 20).

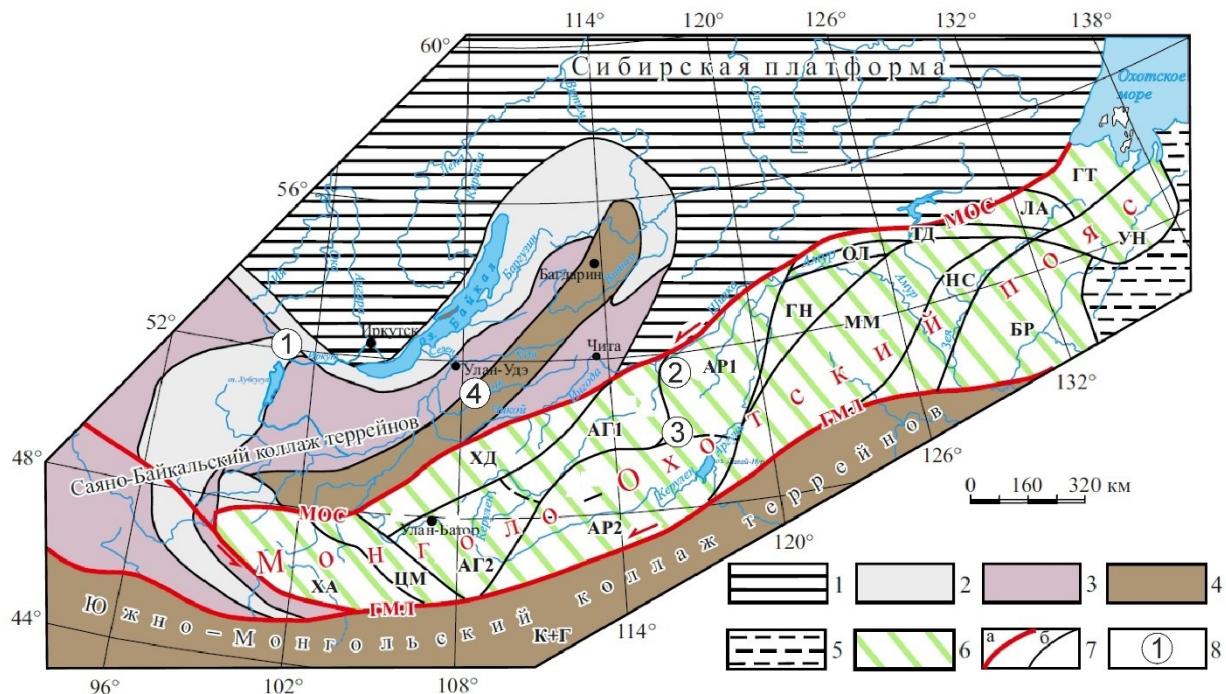


Рисунок 20 – Схема тектонического районирования Монголо-Охотского складчатого пояса и смежных структур обрамления Сибирской платформы (Гордиенко и др., 2019). 1 – Сибирская платформа; 2 – 4 прилегающие аккреционно-коллизионные системы: 2 – байкальские (NP); 3 – каледонские (V-PZ1); 4 – герцинские (PZ2-3); 5 – киммерийские (MZ) Сихотэ-Алинского орогенного пояса; 6 – коллаж террейнов Монголо-Охотского складчатого пояса: АГ – Агинский (АГ1 - Восточно-Забайкальский субтеррейн, АГ2 - Восточно-Хэнтэйский субтеррейн), AP – Аргунский (AP1 – Северное Приаргунье, AP2 – Южное Приаргунье), БР – Буреинский, ГТ – Галамско-Тугурский, ЛА – Ланский, НС – Нора-Сухотинский, ОЛ – Олдойский, ГН – Гонжинский, ММ – Мамынский, ТД – Тукурингро-Джагдинский, УЛ – Ульбанский, ХА – Хангайский, ХД – Хэнтэй-Даурский, ЦМ – Центрально-Монгольский; 7 – крупные системы разломов, сутуры (а): МОС - Монголо-Охотская, ГМЛ – Главный Монгольский линеамент; границы складчатых сооружений и террейнов (б); 8 – участки детальных работ: 1- Восточносаянский; 2 – Ундинский; 3 – Кулиндинский; 4 – Петровск-Забайкальский

3.1 Модель образования кварцитов Восточного Саяна

На основе обобщения геологических, минералого-петрографических и изотопно-геохимических данных по основным разновидностям кварцитов, в первую очередь уникальным порфиробластическим суперкварцитам, из трех проявлений (Ока-Урикский узел с месторождением Бурал-Сардык, Урдагарганский и Урунгэнурский узлы) в иркутской свите предлагается усовершенствованная модель образования высокочистых кварцитов. Наиболее вероятным вариантом формирования тел высокочистых кварцитов можно считать модель динамометаморфогенного преобразования исходной кремнистой пачки в результате коллизии и последующей обдукции пород океанического бассейна и Дунжугурской островной дуги на окраину Гарганского континента. Перекристаллизация и очистка кварцитов происходила вследствие превышения давления субгоризонтальных сдвиговых деформаций над литостатическим в локальных линзо- или лентообразных зонах с формированием тел максимально перекристаллизованных суперкварцитов и менее перекристаллизованных мелкозернистых кварцитов в раме темно-серых и серых тонкозернистых кварцитов.

3.2 Кварцевые жилы и кварциты Ундинской зоны Забайкалья.

Дана первая детальная характеристика минералогических, петрографических и геохимических особенностей кварца Ундинской зоны. Пробы жильного кварца и кварцитов, отобранные на тектоническом контакте разгнейсовых среднепозднеюрских гранитоидов борщовочного комплекса и перекрывающих их вулканогенно-осадочных пород аккреционного комплекса среднеюрского возраста (талангуйская свита), интенсивно деформированы и милонитизированы. Кварцевые жилы, формирующиеся в метаморфических породах расположены на удалении от тектонизированной зоны (Джидинский участок) и, вследствие этого, слабо гранулированы. Изучены флюидные включения в жильном кварце на Борщовочном и Талангуйском участках. Флюидные включения Борщовочного участка отличаются по минимальным условиям захвата ($230\text{--}270\ ^\circ\text{C}$ при $0.99\text{--}1.26$ кбар) от Талангуйского ($205\text{--}215\ ^\circ\text{C}$ при $0.017\text{--}0.021$ кбар). Кварцевые жилы и кварциты генетически связаны с вмещающими их породами и наследуют их геохимические и изотопные черты. В результате наложенных деформационных процессов в кварцевых жилах и кварцитах уменьшается содержание и изменяется соотношение элементов-примесей.

Полученные первые данные о минеральном и изотопно-геохимическом составе кварцодержащих жил Кулиндинского узла позволяют сделать заключение об общем источнике вещества для пегматитовых и, возможно, кварцевых жил. В жилах выявлены такие минералы как: мусковит и Fe-мусковит, гидрослюды, биотит, гидроокислы железа, калиевые полевые шпаты, кислые плагиоклазы, каолинит и галлуазит, титанит и лей-

коксен, апатит, циркон и монацит, рудный минерал. Температуры гомогенизации флюидных включений в кварце составляют 300 ± 5 °С. Р-Т условия захвата включений достигают 340°С при 1 кбар. Жилы подверглись перекристаллизации и грануляции, что вызвало вынос минеральных включений в межзерновое пространство. Низкие содержания титана и германия в отдельных пробах могут говорить о невысоких температурах перекристаллизации кварца и низких содержаниях структурных примесей и, следовательно, перспективах получения качественных кварцевых концентратов.

Начато исследование наиболее значимого по ресурсам кварцевого объекта Забайкалья - месторождения Гора Кварцевая. Жила кварца представляет собой вытянутое в субмеридиональном направлении штокообразное тело длиной около 230 метров и шириной около 90 м. С восточной стороны жила имеет субвертикальный контакт, а с западной падение в западном направлении под углами 30-45°. Кроме основного тела с западной стороны отмечается еще несколько жил меньшего размера (от 0,5 до 8 метров по мощности), но с таким же падением. Контакт кварцевой жилы с вмещающими гранитами четкий, контрастный, но неровный. Были оценены параметры включений состава $H_2O-NaCl-CO_2$. Температура гомогенизации CO_2 варьировалась от 31 до 31,7 °С, для применения для расчетов модели Steele-MacInnis [47] была использована максимально возможная температура в 31,1 °С. Декрепитация включений начинается с температуры 280 °С, когда вскрываются наиболее крупные включения и активно происходит до 350 °С, при этом отдельные небольшие включения, размером менее 5 мкм гомогенизируются в жидкую fazу до 325 °С. Параметры включений состава $H_2O-NaCl$ были оценены на основе двух измерений. Для расчёта изохоры и давления была применена модель HokieFlincs_ $H_2O-NaCl$ [48]. Декрепитация включений происходит при нагреве до 350 °С. При нагреве выше 350 °С наблюдалось два двухфазных включения размером до 4 мкм с температурой гомогенизации в жидкость 353,4 °С и 361 °С, которые сохранялись при нагреве до 480 °С и одно аномальное включение размером около 8 мкм с температурой гомогенизации в газ при 470 °С. При предположении, что высокотемпературные включения до 4 мкм были захвачены одновременно с включениями состава $H_2O-NaCl-CO_2$, минимальные условия захвата включений оцениваются в $357,2 \pm 5$ °С и $2 \pm 0,1$ кбар.

Получены результаты по концентратам, изготовленным из кварца месторождения Гора Кварцевая. Высокие содержания в концентрате алюминия (94,4 ppm), титана (11,7 ppm), лития (6,6 ppm) и бора (0,4 ppm) позволяют сделать заключение о вхождении этих элементов в кристаллическую структуру кварца, а высокие содержания натрия (17,2 ppm) о нахождении внутри зерен кварца в виде флюидных включений.

Полученные первые данные о минеральном и изотопно-geoхимическом составе кварца месторождения Гора Кварцевая в Забайкалье позволяют сделать заключение об общем магматогенном источнике вещества для всех проб кварца. В пробах кварца выявлены такие минералы как кислые плагиоклазы, калиевые полевые шпаты, мусковит, биотит и гидроокислы железа. Рудные минералы представлены молибденитом и, возможно, молибдитом, баритом и пиритом. Жила подверглась хрупким деформациям с последующим залечиванием трещин. Полученные данные позволяют отнести месторождение Гора Кварцевая к высокотемпературному магматогенному силекситовому типу.

В 2025 получены дополнительные изотопно-geoхимические данные по исходным пробам кварцевых и пегматитовых жил и изготовленным концентратам проявлений Забайкалья. Проведен сравнительный геологический, geoхимический, минералогопетрографический анализ кварца жил и кварцитов Восточного Саяна и Южного Забайкалья который позволяет сделать ряд выводов об их генезисе. Протолитом для изученных кварцевых гидротермальных, пегматитовых и силекситовых жил и кварцитов были высококремниевые терригенные и хемогенные осадки и магматические породы. Большая часть кварцевых проявлений тяготеет к границам крупных тектонических объектов и деформационных зон, испытавших несколько фаз активации. Значительная часть кварцевых тел испытала наложенную деформацию, в результате которой они были перекристаллизованы или раздроблены. При перекристаллизации жильный и пегматитовый кварц и кварциты испытали автолизию с выносом элементов-примесей и, возможно, фракционированием изотопов кислорода в сторону повышения $\delta^{18}\text{O}$ (рисунок 21). Некоторые корректировки изотопного состава кварца и кварцитов со снижением $\delta^{18}\text{O}$ могут объясняться поздней проработкой метеорными или эндогенными флюидами. Механизмы и условия миграции элементов и фракционирования изотопов кислорода при перекристаллизации, видимо, связаны с переуравновешиванием в новых Р-Т-условиях и требуют дополнительного изучения на статистически значимом объёме материалов.

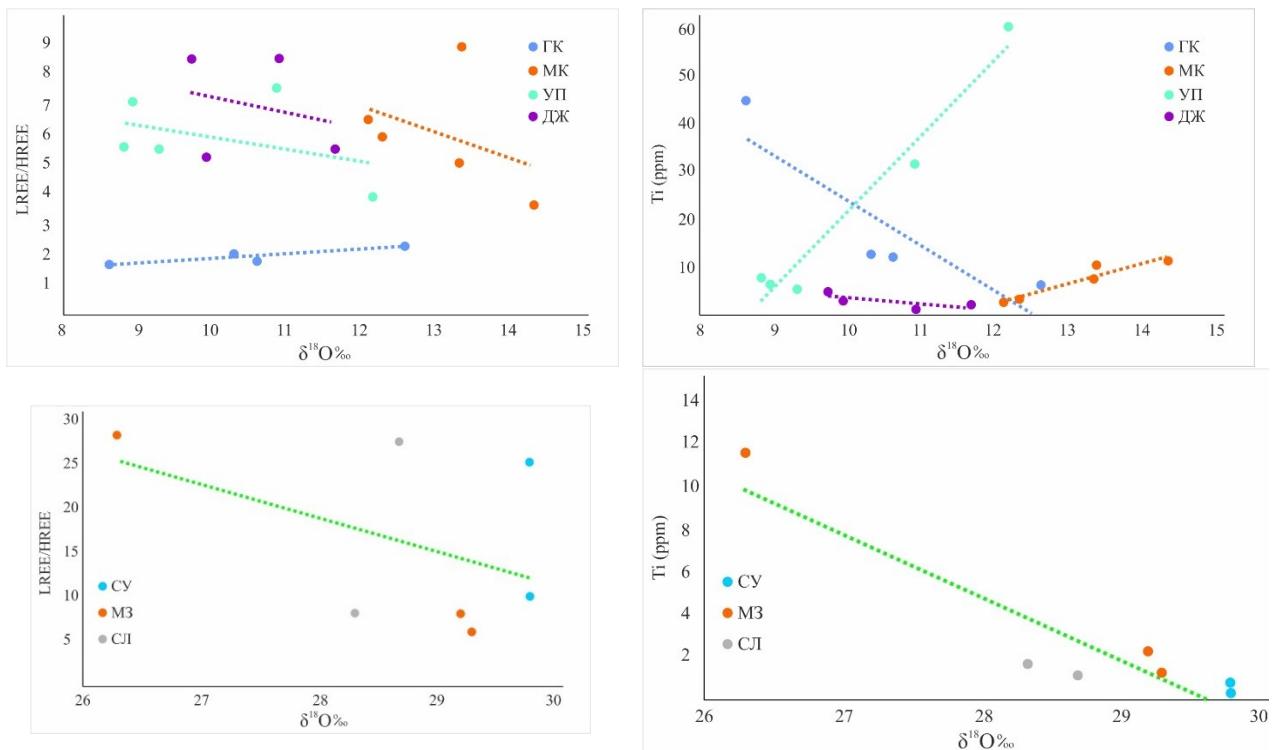


Рисунок 21 – Диаграммы соотношений LREE/HREE и $\delta^{18}\text{O}_{\text{‰}}$ (V-SMOW) (а, в) и Ti (ppm) и $\delta^{18}\text{O}_{\text{‰}}$ (V-SMOW) (б, г) в кварце и кварцитах Забайкалья (а, б) и в кварцитах Восточного Саяна (в, г). Условные обозначения: ГК – Гора Кварцевая; МК – Малая Кулинда Кулиндинской зоны; УП – кварц и кварциты Борщовочного и Талангуйского участков Ундино-Посельской зоны; ДЖ – кварц Джидинского участка Ундино-Посельской зоны; СУ – суперкварциты Восточного Саяна; МЗ – мелкозернистые кварциты Восточного Саяна, СЛ – сливные кварциты Восточного Саяна

4 ОПТИЧЕСКОЕ КВАРЦЕВОЕ СТЕКЛО И МУЛЬТИКРЕМНИЙ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Особо-чистый природный кварц имеет широкое промышленное применение. Он является исходным материалом для получения кварцевых концентратов высокой и ультравысокой степени чистоты. На основе кварцевых концентратов производится оптическое кварцевое стекло для видимой и ближней инфракрасной областей спектра, а также термостойкая кварцевая керамика самого широкого применения, включая радиопрозрачные обтекатели ракет. Диоксид кремния, благодаря своим свойствам, широкая область прозрачности от вакуумного ультрафиолета до ИК области, термостойкость, низкий коэффициент температурного расширения получил широкое промышленное применение в качестве оптического материала, термостойкой кварцевой керамики и других применений. Полиморфные превращения кварц-кристобалит-стекло во многом определяют особенности процессов обогащения кварцевого сырья и получения кварцевых концентратов. Институтом геохимии выявлен и достаточно детально изучен новый тип особо-чистого кварцевого сырья – высокочистые кварциты Восточного Саяна [49-55]. На базе этого сырья разработаны процессы получения кварцевых концентратов высокой степени чистоты и получено «сухое» кварцевое стекло.

4.1 Полиморфные превращения в диоксида кремния

Целью работы являлась оценка фазового перехода кварц кристобалит в кварцевом сырье различного генезиса и химического состава, а также различной структуры. Объектом исследования были: суперкварцит и сливой кварц Ока-Урикского участка Восточного Саяна, бразильский горный хрусталь (БГХ), гранулированный жильный кварц Мало-Чипикетской зоны Патомского кварценосного района (Чипикет) (рисунок 22).



Рисунок 22 – Кварцевое сырье различного генезиса, (а) суперкварцит и (б) сливной кварц Ока-Урикского участка Восточного Саяна, (в) бразильский горный хрусталь, (г) гранулированный жильный кварц Мало-Чипикетской зоны Патомского кварценосного района

В таблице 3 приведены содержание элементов примесей в исходных образцах. Бразильский горный хрусталь содержит наибольшее количество алюминия, причем в структуре БГХ концентрация Al, более 20 ppm.

Таблица 3 – Содержание элементов примесей в исходных образцах кварцевого материала

Тип кварца	Примесный элемент, ppm										
	Fe	Al	Ti	Ca	Mg	Cu	Mn	Na	K	Li	Σ
Суперкварцит	6	27	1,7	0,8	1	0,17	0,02	3,5	6,3	0,13	46,6
Сливной	4,9	10,4	0,3	7,3	0,9	0,2	0,1	19,3	6,2	0,3	50
БГХ	1,4	72,2	2,4	0,7	0,5	0,1	0,2	12,3	4,8	5,4	100
Чипикет	2,9	23,9	1,8	0,3	0,4	0,01	0,01	1,9	4	1,4	37

Для проведения эксперимента образцы кварцевого материала разрезались на кубики одинаковых размеров, обрабатывали в 20 % HCl в течение часа, после чего помещали в муфельную печь и выдерживались в течение 2 часов при 1400, 1450, 1500°C. Пример исходных и отожжённых образцов представлены на рисунке 23. По результатам отжига видно, что БГХ растрескивается на мелкие фрагменты, вероятнее всего это связано с флюидными включениями, размер которых достигает 50 мкм.

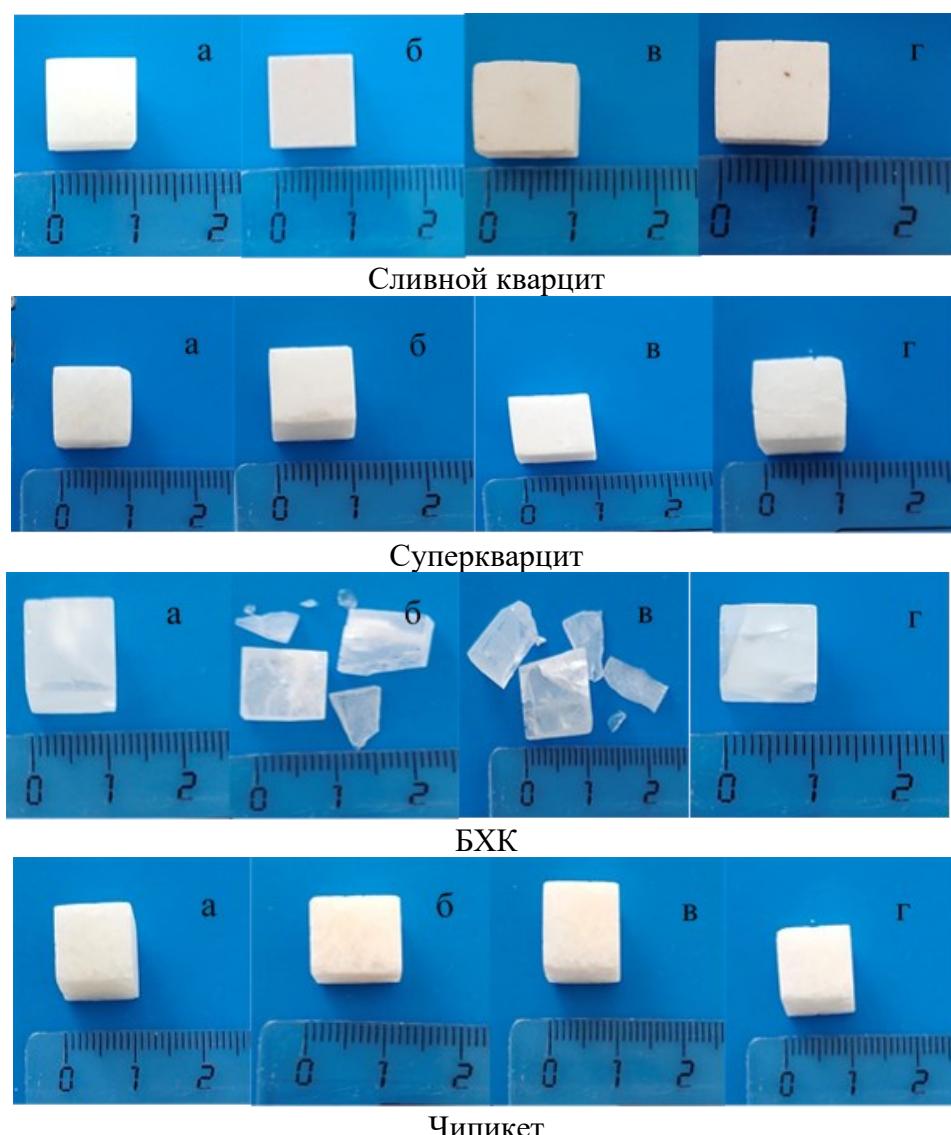


Рисунок 23 – Образцы кварца различного генезиса. а- исходный, б -1400°C, в - 1450°C, г - 1500°C

Отожженные образцы при температуре 1500°C анализировали рентгеноструктурным анализом, для уточнения соотношения фаз кварц и кристобалита. Результаты анализа представлены в таблице 4. Из результатов анализа видно, что наиболее эффективно кристобалитизируются образцы сливного кварцита и суперкварцит. БГХ наиболее устойчив к кристобалитизации, по результатам анализа в фазу кристобалита перешло 22%. Таким образом можно сделать вывод, что при низких концентрациях примесей минерализаторов, кинетика кристобалитизации зависит от текстурных параметров кварцевой породы. Мелкокристаллические породы обладают наибольшей удельной поверхностью, по которой идет образование фазы кристобалита.

Таблица 4 – Рентгенофазовый анализ отожженных образцов

Тип кварцевого сырья	кварц, %	кристобалит, %
Сливной кварц	1-2	Не менее 98-99
Суперкварцит	1-2	Не менее 98-99
БГХ	78	22
Чипикет	37	63

4.2 Кварцевое стекло

Кварцевое стекло имеет широкое промышленное применение как для оптических применений, так и для получения термостойкой кварцевой керамики. Были отработаны режимы получения прозрачного кварцевого стекла. В качестве материала использовалась кварцевая крупка высокочистых кварцевых концентратов на основе суперкварцитов Восточного Саяна. Для сравнения использовались также кварцевые концентраты RQ-2К Кыштымского месторождения гранулированного кварца. Прозрачное кварцевое стекло на основе суперкварцитов получено при следующих условиях. Температура плавления 1900-2000°C, время нагрева 140 минут, напуск аргона после 10 минутной выдержки при температуре ~ 1850°C до давления 2 бар. На рисунке 24 приведена фотография прозрачного кварцевого стекла, полученного на основе суперкварцитов Ока-Урикского блока.



Рисунок 24 – Прозрачное кварцевое стекло

Прозрачное кварцевое стекло на основе концентратов RQ-2K получено при нагреве в вакууме до температуры 1850^0C . Это говорит о том, что концентраты на основе кварцитов Восточного Саяна являются более термостойкими, и для наплава прозрачного стекла требуются более высокие температуры по сравнению с концентратами Кыштымского месторождения. Этот вывод был подтвержден результатами получения кварцевого стекла из концентратов на основе суперкварцитов на заводе «Коралл» в г. Гомель. Температура в тигле была поднята на 100^0C по сравнению с режимами получения кварцевого стекла на основе RQ-2K.

Кроме того, отработаны режимы получения легированного европием кварцевого стекла на основе суперкварцитов. На рисунке 25 приведена фотография стекла, легированного европием.



Рисунок 25 – Прозрачное кварцевое стекло, легированное европием

Спектры поглощения легированного кварцевого стекла приведены на рисунке 26.

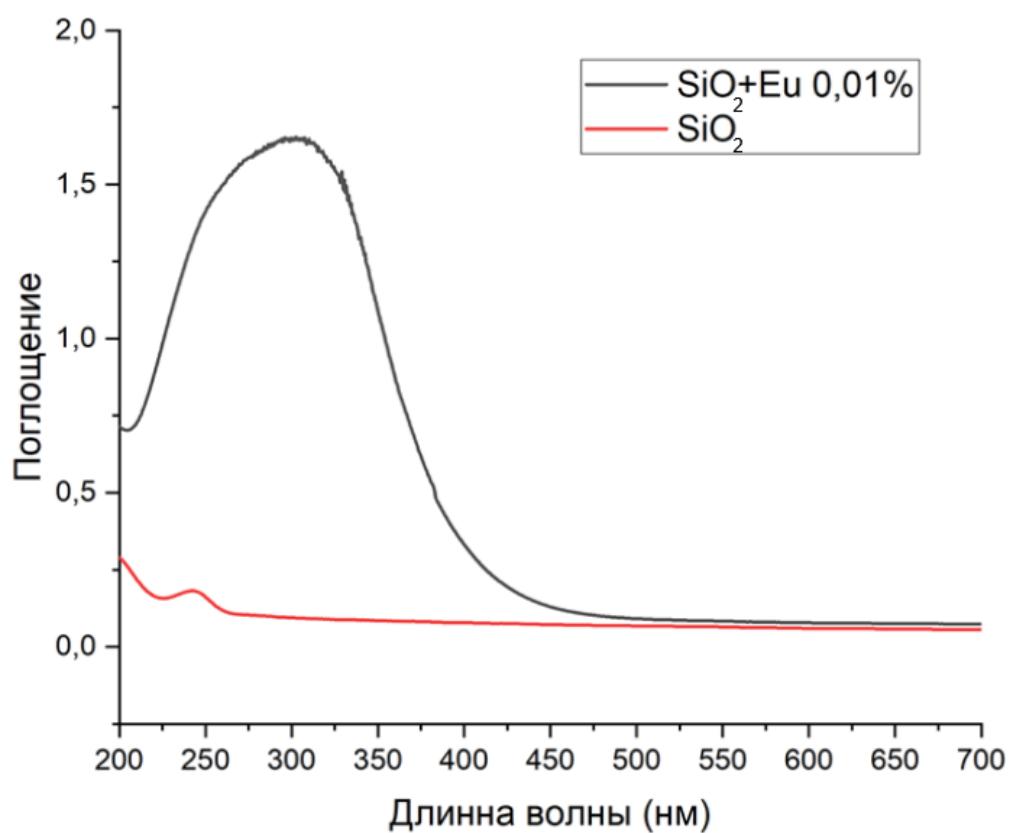


Рисунок 26 – Спектры поглощения кварцевых стекол из суперкварцита чистого (красная линия) и легированного европием в 0,01% (черная линия)

Как видно из рисунка, европий входит в стекло в двухвалентном состоянии.

4.3 Кристаллографическая реконструкция ориентаций зёрен по EBSD данным в мультикристаллическом кремнии

В материаловедении метод дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD) служит для получения детальных кристаллографических данных на микроуровне, что делает его незаменимым инструментом для картирования структуры материалов. Широкое распространение и важность этого метода возросли с его автоматизацией [56]. Именно от качества реконструированных карт напрямую зависит точность анализа пространственного распределения фаз и ориентационных соотношений — ключевых параметров микроструктуры поликристаллов. Однако, данные, получаемые методом EBSD, содержат искажения, обусловленные артефактами прибора и детектора и не идеальностью состояния поверхности, что приводит к значительным ошибкам в интерпретации кристаллографических ориентаций и границ [57]. То есть, ориентационные изображения, полученные экспериментальным путём подвержены потере важной информации, которая необходима для полного понимания формирования структуры поликристаллического материала [58]. Таким образом, в данной работе представлен метод кристаллографической реконструкции ориентаций зёрен в мультикристаллических материалах (на примере кремния) на основе данных EBSD. В качестве инструмента была предложена модель генеративно-состязательной сети (GAN), поскольку она позволяет эффективно восстанавливать кристаллографическую информацию [58], что в перспективе снижает потребность в дорогостоящих повторных экспериментах и сокращает временные затраты.

GAN представляет собой метод машинного обучения, основанный на противостоянии двух нейронных сетей: генератора и дискриминатора. Такой соревновательный процесс позволяет системе научиться производить реалистичные синтетические данные.

Весь процесс обучения GAN для восстановления кристаллографических данных можно представить следующим образом (рисунок 27).

В качестве архитектуры нейронной сети выбрана Deepfill, которая эффективна в задачах заполнения отсутствующих участков изображений [59]. Генератор реализован в виде двух нейросетевых моделей с encoder-decoder структурой с модификациями. На вход генератора подаются данные EBSD с масками. Маски чересстрочных пропусков и маски дефектов (50 видов дефектов) создаются в растровом графическом редакторе GIMP2 при помощи специально встроенных функций. Генератор восстанавливает ориентационные данные, анализируя окружающие пиксели для определения локального контекста: какие ориентации уже присутствуют, где проходят границы зёрен и каковы общие паттерны микроструктуры.

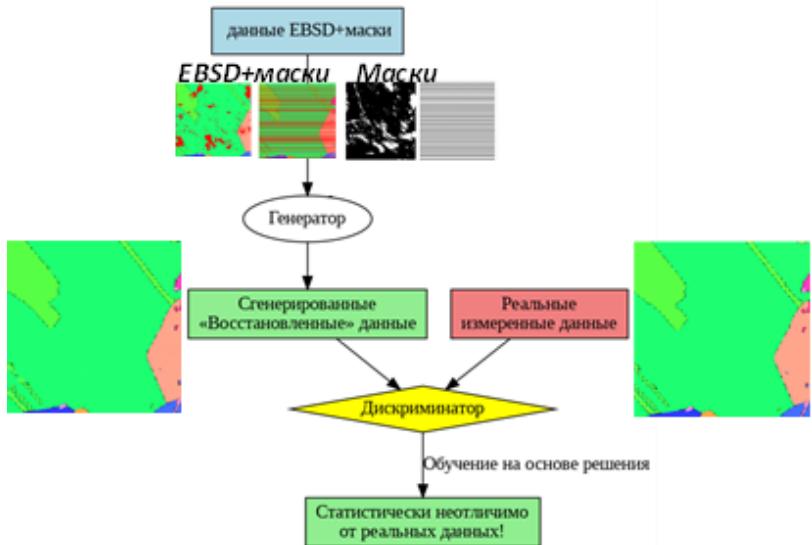


Рисунок 27 – Схема процесса обучения GAN

На основе этого анализа он подбирает наиболее корректные значения, обеспечивающие плавность переходов внутри зёрен и естественность границ между ними. Дискриминатор представляет собой свёрточную нейронную сеть, выполняющую функцию бинарного классификатора. Его задача различить реальные экспериментальные данные от сгенерированных “восстановленных” данных (рисунок 27). Если дискриминатор не сможет отличить синтетические данные от экспериментальных, то считается обучение прошло успешно. Конечная цель генеративных моделей — это не просто "обмануть" дискриминатор, а добиться статистической неотличимости. Размер обучающей выборки составил 50 образцов, тестовой—20.

На рисунке 28 показаны результаты тестирования модели на независимой выборке данных, которая не использовалась в процессе обучения нейронной сети. Красные области на Рисунке 2а обозначают отсутствие информации- в данных точках линии Кикучи не были идентифицированы. Максимальная потеря кристаллографических данных зафиксирована в зонах 1 и 2, где сохранились лишь разреженные кластеры корректно индексированных точек. На основе этих ограниченных данных была выполнена процедура восстановления микроструктуры, направленная на реконструкцию отсутствующих ориентационных значений с учётом локального контекста и закономерностей микроструктуры. Для верификации результатов проведено сравнение с целевыми данными (полноценным EBSD-анализом того же участка без потери информации), которое демонстрирует, что восстановленные ориентации зёрен корректно воспроизводят исходную кристаллографическую структуру. Как показано на рисунке 28, в зоне 1 модель корректно определила ориентационный переход от синего зерна к розовому. При этом был верно исключён физически невозможный последовательный переход "розовый → красный → синий". Для сравнения, алгоритм интерполяции ближайшего соседа в программном пакете ATEX в тех

же условиях воспроизвёл именно эту ошибочную цепочку переходов. В зоне 2 модель успешно идентифицировала и восстановила полную последовательность ориентационных переходов от фиолетового зерна к оранжевому. Однако, следует отметить, что при корректном восстановлении ориентаций наблюдается погрешность в определении наклона границы между синим и розовым зерном. Таким образом, генератор успешно реконструировал как доминирующие текстуры, так и некоторые локальные ориентационные градиенты.

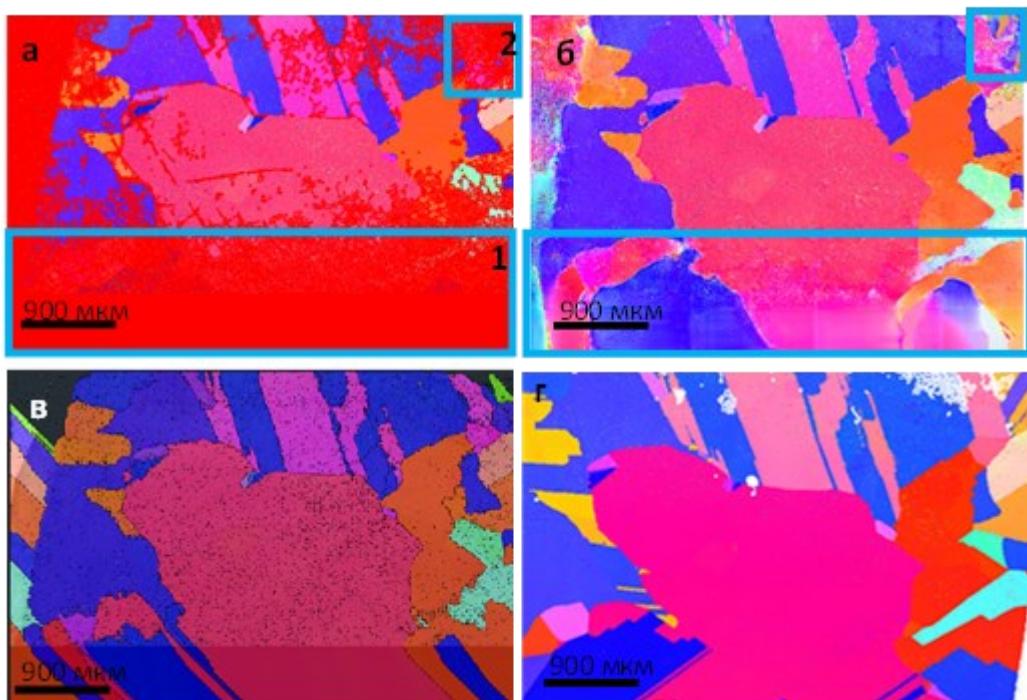


Рисунок 28 – Результат реконструкции тестовых данных с высокой степенью потери информации (60%)
 а) неполная ориентационная карта по исходным данным EBSD; б) реконструкция данных в ПО ; в) реконструкция данных в ПО atex; г) реальная карта

Adversarial Loss был использован для количественной оценки способности генератора создавать ориентационные данные, статистически неотличимые от реальных экспериментальных измерений, а также для обеспечения состязательного обучения, в ходе которого генератор оптимизируется с целью минимизации вероятности обнаружения своих выходных данных дискриминатором. По графику (рисунок 29) видно, что потери быстро снижаются в первые 10000 итераций (от 0.25 до 0.1), затем стабилизируются на низком уровне(0.02-0.05). Это указывает на успешное обучение: модель учится генерировать реалистичные изображения так, что дискриминатор принимает синтетические данные за настоящие экспериментальные. О качестве обучения также свидетельствует и стабильность состязательных потерь после 20000 итераций, что указывает на достижение сбалансированного взаимодействия между генеративной и дискриминативной компонентой модели.

В результате работы создано готовое к использованию веб-приложение, реализующее все разработанные алгоритмы. Программа позволяет загружать дефектные EBSD-изображения и получать восстановленные результаты в режиме онлайн. Ключевое преимущество данного подхода заключается в его способности не только точно реконструировать утраченные ориентационные данные (EBSD-карты), но и моделировать структуру материала. Интеграция теории марковских цепей в анализ данных электронной обратно-рассеянной дифракции (EBSD) и существующий метод восстановления ориентаций позволит оценить вероятности перехода между кристаллографическими ориентациями, что значительно повышает надёжность статистического вывода о микроструктуре материала. Последовательное послойное EBSD-сканирование, визуализированное на рисунке 28, предоставит экспериментальную основу для построения трёхмерной модели, в которой пространственная эволюция ориентации может быть описана как марковский процесс.

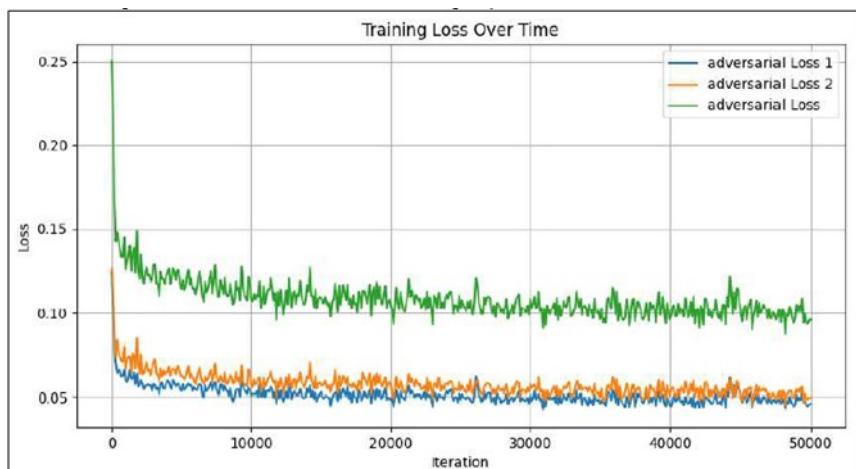


Рисунок 29 – Оценка генерации

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении выделим наиболее важные результаты, полученные в 2025 году и в целом по проекту.

Основные результаты исследований 2025 года.

В продолжении модернизации и усовершенствования экспериментальной базы Разработан счетчик фотонов с возможностью интеграции в систему время коррелированного счета фотонов для измерения субнаносекундных времен затухания люминесценции. Разработан универсальный тепловой узел для получения высокочистого сырья методом вакуумной дистилляции и выращивания кристаллов фторида церия методом Бриджмена. В рамках исследования сцинтилляционных кристаллов установлен механизм передачи возбуждения на примесные центры свечения в кристаллах $\text{CsI}:\text{Eu}^{2+}$.

Исследования оптических спектров ряда двухвалентных (Tm^{2+} , Sm^{2+}) и трехвалентных лантаноидов (Yb^{3+}), во фторидных кристаллах (LaF_3 , CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 , CdF_2) в интервале длин волн от 100 нм до 3000 нм позволили детально изучить узкие линии f-f, f-d переходов (Tm^{2+} , Yb^{3+}) и широкополосную люминесценцию F центров в BaF_2 , SrF_2 и Sm^{2+} центров в LaF_3 .

Открыт новый тип сверхбыстрой люминесценции в кристаллах $\text{BaF}_2\text{-}\text{LaF}_3$, связанный с излучательной рекомбинацией электронов оставной зоны бария с дырками оставной зоны лантана. Эта люминесценция была названа оставно-остовная люминесценция. Постоянная времени затухания оставно-остовной люминесценции составляет 150 пс, что делает материалы, где она может наблюдаться, перспективными детекторами для времепролетной компьютерной и позитрон-эмиссионной томографии.

Совместно с ИГМ СО РАН и Минералогическим музеем РАН было разработано веб-приложение АрДИ, которое позволяет проводить обработку, деконволюцию колебательных спектров, а также проводить по ИК- и КРС спектрам фазовый анализ минералов с использованием методов машинного обучения и нейронных сетей.

Проведено детальное исследование сульфидных анион-радикалов в минералах группы содалита и канкринита. Установлено, что положение полосы люминесценции S_2^- анион-радикалов зависит от типа полости, в которой находится анион-радикал. В минералах группы содалита максимум люминесценции смешен в красную область спектра. Впервые был обнаружен стабильный сульфидный анион гош- S_8^{2-} , наличие которого может свидетельствовать о низкотемпературных восстановительных условиях минералообразования.

Разработаны рекомендации для повышения стабильности процесса выращивания термolumинесцентных монокристаллических детекторов на основе LiF:Mg,Ti: Использовать лигатурный метод активации дистиллята и порошок хорошего качества для изготовления лигатуры LiF:Mg,Ti, используя полученный после вакуумной дистилляции фтористый литий.

Свести к минимуму температуру и длительность выдержки расплава.

Внедрить «щадящую» механическую очистку поверхностей графита перед каждым циклом активации и дистилляции.

Для вакуумной дистилляции внедрить периодическую замену стеклоуглеродных элементов поверхности (не более 20 процессов между заменами).

Отказаться от процедуры механической чистки внутренней поверхности СУ-2000 от прилипшей смеси десублимата и капель конденсата LiF.

Квантово-химические расчеты предсказывают наличие в кристаллах BaCaF₄, BaLiF₃ и BaSrF₄ кросс-люминесценции, характеризующейся эффективным переносом энергии возбуждения с катионной подрешетки матрицы на оставные уровни примесных центров. Введение примесных ионов в катионные позиции кристаллической решетки приводит к формированию локализованных состояний под оставной зоной, которые выступают эффективными центрами рекомбинации. Полученные результаты позволяют рекомендовать эти кристаллы для дальнейшего экспериментального исследования - синтеза монокристаллов и комплексного изучения их люминесцентных характеристик, включая квантовый выход, кинетику свечения и радиационную стойкость.

В ходе исследования для классификации спектров комбинационного рассеяния был проведён сравнительный анализ методов на основе библиотеки Faiss и архитектур глубокого обучения. Наилучший результат среди методов Faiss показало косинусное расстояние (Recall@5 = 75,5%). Для повышения точности были разработаны и протестированы три нейросетевые архитектуры: многослойный перцепtron, классическая и расширенная свёрточная сеть. Расширенная CNN с использованием пакетной нормализации и dropout продемонстрировала наивысшую эффективность, достигнув accuracy 0,9086 и recall@5 равной 0,9627. Полученные результаты сопоставимы с современными исследованиями, а их комбинация с методом главных компонент позволяет превзойти аналогичные работы. Для дальнейшего улучшения модели перспективными направлениями являются применение более сложных архитектур, аугментация данных и использование трансферного обучения.

Полисульфидные группы в минерале сапожниковит Na₈(Al₆Si₆O₂₄)(HS)₂ со структурой содалита были исследованы с помощью теории функционала плотности. Для S_n²⁻,

S_n^{+-} , S_n ($n = 1 - 6$) были рассчитаны структурные характеристики, рамановские спектры и оптические спектры поглощения. Результаты расчетов согласуются с накопленными экспериментальными данными. Спектроскопические характеристики полисульфидной группы зависят от размера полости, в которой она находится: уменьшение размеров полости приводит к увеличению колебательных частот. Результаты указывают, что варьирование химического состава в части катионов щелочных щелочноземельных металлов, а также выбор кристалла с определенным размером содалитовой полости позволяет модифицировать спектроскопические свойства полисульфидных групп.

Спектроскопическими и теоретическими методами был исследован кристалл CsI:Sm²⁺, впервые выращенный методом Киропулоса. Кристалл является перспективным сцинтиллятором для “красной” области спектра. Установлено, что в кристалле есть по крайней мере два излучательных центра, различающихся окружением иона Sm²⁺. Анализ температурной зависимости люминесценции подтвердил значительную электрон-фононную связь и перенос энергии между двумя центрами Sm²⁺. Однако отсутствие спектрального перекрытия между состояниями $4f^6$ и $4f^55d^1$ приводит к неэффективной передаче энергии от решетки к ионам Sm²⁺.

Проведен сравнительный геологический, геохимический, минералогопетрографический анализ проявлений и месторождений кварцевых жил и кварцитов Восточного Саяна и Южного Забайкалья. Протолитом для изученных жил и кварцитов были высококремниевые терригенные и хемогенные осадки и магматические породы. В результате наложенных деформаций жильный и пегматитовый кварц и кварциты испытали автомализацию с выносом элементов-примесей и, возможно, фракционированием изотопов кислорода в сторону повышения $\delta^{18}\text{O}$ в новых Р-Т-условиях. В условиях быстрых деформаций кварц месторождения Гора Кварцевая в Забайкалье был катализирован без самоочищения.

При низких концентрациях примесей минерализаторов, кинетика кристобалитизации зависит от текстурных параметров кварцевой породы. Мелкокристаллические породы обладают наибольшей удельной поверхностью, по которой идет образование фазы кристобалита.

Отработаны режимы наплава прозрачного кварцевого стекла на основе суперкварцитов Восточного Саяна. Показано, что для получения прозрачного кварцевого стекла на основе суперкварцитов необходимо повышение температуры в тигле на ~100 К по сравнению с концентратами из гранулированного кварца Кыштымского месторождения. Получены стекла, легированные двухвалентным европием.

Применительно к мультикристаллическому кремнию создано веб-приложение, реализующее разработанные нами алгоритмы. Программа позволяет загружать дефектные EBSD-изображения и получать восстановленные результаты в режиме онлайн. Ключевое преимущество данного подхода заключается в его способности не только точно реконструировать утраченные ориентационные данные (EBSD-карты), но и моделировать структуру материала. Интеграция теории марковских цепей в анализ данных электронной обратно-рассеянной дифракции (EBSD) и существующий метод восстановления ориентаций позволит оценить вероятности перехода между кристаллографическими ориентациями, что значительно повышает надёжность статистического вывода о микроструктуре материала. Последовательное послойное EBSD-сканирование, визуализированное на рисунке 28, предоставит экспериментальную основу для построения трёхмерной модели, в которой пространственная эволюция ориентации может быть описана как марковский процесс.

Основные результаты исследований 2021-2024 года.

Произведена глубокая модернизация установки для выращивания монокристаллов СЗВН-20. На современной элементной базе собран щит управления и автоматики, создан алгоритм работы и интерфейс пользователя. Модернизация установки позволила значительно повысить научность и повторяемость процессов выращивания монокристаллов, поскольку обеспечивается непрерывная запись лог-файлов физических параметров, а также, некоторые действия оператора.

Были выращены и исследованы монокристаллы иодида цезия с примесью двухвалентного самария. Измерены и интерпретированы спектры люминесценции при различных температурах, а также, определена температурная зависимость и энергия барьера между 4f и 5d оболочками ионов самария. Наличие излучательных $4f^55d^1-4f^6$ переходов самария при комнатной температуре предполагает быстрое время затухания люминесценции, а высокая плотность иодида цезия делают этот материал достаточно перспективным для дальнейшего изучения в качестве сцинтиллятора.

Совместно с ИГМ СО РАН и БИП СО РАН изучены люминесцентные характеристики серии сложных боратов $Rb_3Y_2(BO_3)_3:Er,Yb$; $Rb_3Y_2(BO_3)_3:Eu^{3+}$; $KSrY_{1-x}Er_{3+x}(BO_3)_2$, содержащих редкоземельные ионы. Данные соединения имеют потенциал использования в качестве люминофоров в видимой и инфракрасной области спектра.

При синхротронном возбуждении обнаружены узкие спектральные провалы, вызванные $4f^n-4f^{n-1}5d$ поглощением ионов Yb^{3+} , Er^{3+} в спектрах возбуждения f-f люминесценции или аномальной люминесценции в кристаллах щелочноземельных фторидов. Малая ширина линий поглощения 4f-5d переходов Yb^{3+} , Er^{3+} во всех щелочноземельных

фторидах подтверждает предположение Шлезингера и др. [3] о сильном экранировании 5d состояний состояниями 5p⁶ оболочек.

Спектры f-f-излучения Tm²⁺ в кристаллах щелочноземельных фторидов при низких температурах состоят из двух резких линий, обусловленных переходами из низшего состояния ²F_{5/2} в основные состояния ²F_{7/2}, расщепленных кристаллическим полем. Относительное расщепление атомных состояний Tm²⁺ в щелочноземельных фторидах было оценено достаточно точно с помощью ab-initio расчета CASSCF-NEVPT2. Линейное уменьшение расщепления уровней Tm²⁺ кристаллическим полем с увеличением постоянной решетки обусловлено релаксацией ближайших атомов фтора.

Определена эффективность и механизмы возникновения апконверсионной люминесценции в дважды активированных фторидах с одним, двумя и тремя лантаноидами.

Установлена природа широкополосной инфракрасной люминесценции в LaF₃-Sm²⁺ как переходов из состояний зоны проводимости на f уровни Sm²⁺ (аномальная люминесценция).

Обнаружено, что в кристаллах щелочноземельных фторидов, активированных редкоземельными ионами, в спектрах возбуждения в области вакуумного ультрафиолета (ВУФ) 4f-4f свечения наблюдаются провалы, связанные поглощением 4fⁿ-4fⁿ⁻¹5d¹. На основании полученных результатов установлено положение расщепленных 4fⁿ-15d¹ состояний Dy, Er и Yb в кристаллах CaF₂, SrF₂ и BaF₂ относительно вакуума.

В кристаллах щелочноземельных галоидов с пространственной группой Pnma существуют два типа автолокализованных экситонов, представляющих собой F–H пары. Экситон типа А, образуемый парой F(I)–(I₂)⁻, обуславливает резонансную передачу энергии на примесные ионы Ce³⁺, Eu²⁺ и Yb²⁺. Экситоны типа Б, представленные двумя близкими конфигурациями F(I)–(BrI)⁻ и F(Br)–(IBr)⁻, ответственны за перенос энергии на ионы Sm²⁺.

При исследовании механизмы радиационного дефектообразования в каркасных силикатах, содержащих ионы галогенов показано, что безызлучательный распад экситонных возбуждений вблизи карбонатного и галоген-анионов в полостях каркасных силикатов приводит к образованию пар дефектов. Электронной ловушкой является F-подобный центр, а дырочной – карбонатный анион-радикал.

Разработан метод очистки LiF на основе процессов кипения, испарения и конденсации. Предложено и изготовлено устройство сборного тигля, позволяющее за счёт данных процессов выделять до 80% конденсата LiF, очищенного от Mg, Ti и др. примесей. Установлено, что Ti и другие металлы, связанные с кислородом, в процессе кипения и испарения LiF концентрируются кубовом (тигельном) остатке, а Mg в процессе кипения и испарения в виде летучего компонента покидает рабочий объём тигля, поскольку не обна-

руживается ни в конденсате, ни в кубовом остатке. Чистота конечного продукта позволяет не учитывать остаточные концентрации Mg и Ti при проведении повторной активации LiF данными элементами для получения материала с заданными свойствами. На основе полученного материала в 2024 г. была выращена серия кристаллов LiF (в формообразователе на 120 стержней), повторно активированных примесями Mg и Ti (на 500 ppmw и 5 ppmw, соответственно) и показавших высокий световой выход ТСЛ.

Разработан метод обогащения фтористого лития на основе его перевода в гидрофторид лития с последующим разложением. Получено порядка 16 образцов кристаллов, позволяющих изготовить около 35 000 детекторов ДТГ-4.

Проведены комплексные теоретические исследования зонной структуры кристаллов с целью объяснения механизма сверхбыстрой кросс-люминесценции и поиска новых перспективных материалов для сцинтилляторов, в результате которых объяснен механизм кросс-люминесценции в BaF₂ предложены конкретные пути создания нового поколения быстрых сцинтилляторов. Показано, что, осознанно варьируя три ключевых параметра — химический состав сложной матрицы, тип активирующей примеси (Cd²⁺ — наиболее предпочтительна) и внешнее давление — можно проектировать материалы со сверхбыстрым откликом и заданным спектром свечения в сине-зеленом диапазоне.

Расчеты выявили, что возможность быстрой люминесценции кардинально зависит от тонкого сочетания энергетических уровней матрицы и примеси:

Разный эффект одной и той же примеси: В то время как в BaF₂ ионы La³⁺ были перспективны, в кристалле BaSrCaF₆:La³⁺ они теряют эту способность. Их уровни перекрываются с основной зоной стронция, что «гасит» нужный переход.

Универсальная примесь — кадмий (Cd²⁺): для всех изученных смешанных фторидов активация ионами Cd²⁺ показала теоретическую возможность возникновения низкоэнергетической быстрой люминесценции. Это делает Cd²⁺ наиболее универсальной и многообещающей примесью в этом семействе материалов.

Локальные эффекты и перспективные системы:

В BaLiF₃ и BaCaF₄ быстрая люминесценция также возможна с ионами La³⁺.

В системе BaSrCaF₆:Y³⁺ уровни иттрия располагаются рядом с уровнями кальция матрицы, что создает условия для быстрых основных переходов между ними при сильном возбуждении.

Таким образом, теоретическое моделирование не только объяснило механизм кросс-люминесценции в BaF₂, но и позволило предложить конкретные пути создания нового поколения быстрых сцинтилляторов. Показано, что, осознанно варьируя три ключевые параметра — химический состав сложной матрицы, тип активирующей примеси (Cd²⁺

— наиболее предпочтительна) и внешнее давление — можно проектировать материалы со сверхбыстрым откликом и заданным спектром свечения в сине-зеленом диапазоне.

Квантово-химические расчеты проводились в рамках комплексного экспериментального и теоретического подхода к исследованию природных и синтетических функциональных материалов. Для природных минералов эльпидит, карлтонит и фторкарлтонит моделировались спектры поглощения в ИК-области, что позволило детально расшифровать колебательные спектры. Для карлтонита и фторкарлтонита расчеты позволили установить форму вхождения молекул воды и параметры их координации в структуре минералов. Расчет спектров поглощения анион-радикалов CO_3^{2-} был использован для установления природы окраски минералов. Для минерала скаполит были рассчитаны параметры электронного парамагнитного резонанса, колебательные и оптические спектры CO_3^{2-} , CO_3^{2-} , S_2^- , S_3^- и F-центров в различных катионных (Ca , Na) окружениях. Это позволило детально установить природу различных оттенков минерала, которые обусловлены одновременным проявлением данных комплексов.

Для дигалоидов смешанного анионного состава BaBrI , BaClII , BaClBr , BaFBr , SrBrI , SrClII с двухвалентными Eu , Sm высокоточными квантово-химическими методами GW и TD-DFT с гибридным функционалом PBE0 были рассчитаны электронная структура и оптические спектры поглощения. Это позволило определить положение уровней примесных ионов в запрещенной зоне и подтвердить перспективность данных материалов для сцинтилляционных приложений. Также в кристаллах CaF_2 , SrF_2 были рассчитаны теоретические спектры поглощения трехвалентных примесных ионов тяжелых редкоземельных элементов Gd , Tb , Dy , Ho , Er , Tm , Yb .

Предложен, реализован и протестирован новый неэмпирический метод гибридных квантово-химических расчетов. Новому методу дано название SML (Seamless Multilayer, «Бесшовный многоуровневый метод»).

Одной из заявленных целей проекта является поиск новых высокоэффективных материалов для создания радиопрозрачной термостойкой кварцевой керамики для высокоскоростных летательных аппаратов, оптически однородного и легированного кварцевого стекла для силовой оптики, кремния для солнечной энергетики. Для достижения цели проекта планировался поиск и геолого-геохимические исследования новых нетрадиционных источников природного особо-чистого кварцевого сырья. За период с 2021 по 2025 гг. проведено изучение кварцевых жил и кварцитов Восточносаянского кварценосного района, получены первые данные о кварцевых и пегматитовых жилах и кварцитах Аргунского блока Монголо-Охотского складчатого пояса и начато исследование силекситов месторождения Гора Кварцевая, расположенного в зоне сочленения Удино-Витимской островово-

дужной системы и Яблоново-Малханского кратонного террейна. Проведены минералого-петрографические и изотопно-геохимические исследования нетрадиционного типа кварцевого сырья – суперкварцитов Восточного Саяна. Уточнена модель образования тел высокочистых кварцитов в условиях динамометаморфогенного преобразования исходной кремнистой пачки в результате коллизии и последующей обдукции пород океанического бассейна и Дунжугурской островной дуги на окраину Гарганского континента. Даны первая детальная характеристика минералогических, петрографических и геохимических особенностей кварца Ундинской и Кулиндинской зоны Аргунского блока Монголо-Охотского пояса. Сделано заключение о том, что кварцевые и пегматитовые жилы генетически связаны с вмещающими их породами и наследуют их геохимические и изотопные черты. В результате наложенных деформационных процессов в кварце пегматитовых и гидротермальных жил и в кварцитах сокращается содержание и изменяется соотношение элементов-примесей и, в отдельных случаях, происходит фракционирование изотопов кислорода в сторону повышения $\delta^{18}\text{O}$. Получены первые данные о минеральном и изотопно-геохимическом составе кварца месторождения Гора Кварцевая в Забайкалье которые позволяют сделать заключение о магматогенном источнике вещества. Поставленные задачи выполнены полностью, а полученные результаты имеют и фундаментальное и прикладное значение и могут быть использованы для уточнения механизмов миграции элементов и условий фракционирования изотопов кислорода в кварце, разработки методов обогащения высокочистого кварцевого сырья, определения геологических и геохимических предпосылок для формирования тел высокочистого кварцевого сырья различных генетических типов и их качественной и количественной оценки.

На примере суперкварцитов показано, что для повышения степени очистки кварцитов необходимо использовать этап термодробления, степень очистки повышается на 18 %. Предварительная прокалка приводит к увеличению концентрации структурного AL, содержание Al в кварцевом концентрате увеличивается с 4 ppm до 20 ppm. Степень очистки снижается с 78% до 46%.

Электроимпульсное дробление способствует эффективному снижению содержания Na, вероятнее всего дробление сопровождается декрепетацией флюидных включений. Также отмечено, что для электроимпульсного дробления не требуется первичное термодробление куска, также отмечено, что можно использовать электрод из технически чистого железа.

Кварцевые агрегаты, полученные при механическом истирании, содержат большое количество флюидных включений, тогда как в кварцевых агрегатах, полученных при электроимпульсном дроблении, флюидные включения не обнаружены.

При электрогидравлической дезинтеграции кварцитов Восточного Саяна показана высокая селективность разделения на минеральные индивидуумы с сохранением границ зерен, вскрытие флюидных включений, снижение количества переизмельченного материала по сравнению с механическим измельчение. Не требуется предварительное термо-разупрочнения кварца. Исключение данной операции упрощает технологическую схему передела кварцевых пород.

Из специально подготовленного кварцевого концентрата на основе кварцитов месторождения Бурал-Сардык были получены образцы высококачественного кварцевого стекла с высоким светопропусканием в широкой области спектра, характеристики которого соответствуют параметрам так называемого «сухого» стекла марки КИ и легированного кварцевого стекла с примесью церия и титана. Установлен наиболее оптимальный способ легирования, при котором используется раствор хлорид церия гидрата, и суспензия диоксида титана в воде, которым обрабатывается исходный концентрат перед наплавом стекла. Легирование кварцевого стекла примесью титана приводит к практически полному поглощению образцов в УФ области начиная от 230 нм. Оптимальная концентрация примеси Ti составляет порядка 100 ppm. При активировании стекла церием в спектре поглощения образцов появляется полоса с пиком около 320 нм, интенсивность которой увеличивается с увеличением концентрации примеси. Оптимальная концентрация Ce в образцах составляет 1000 ppm.

В кварцевых стеклах, полученных из кварцевых концентратов с различным содержанием фазы α -кварца и кристобалита в спектрах возбуждения и люминесценции наблюдаются существенные различия Ge-ODC (II). Это свидетельствует о том, что ближний порядок в стеклах, полученных из кварцевых концентратов с различным содержанием фазы α -кварца и кристобалита, отличается. Можно сделать вывод о том, что стекло наследует структуру исходной шихты. Более того, люминесценция примесных центров Ge является чувствительной к изменению в ближнем порядке кварцевого стекла и может быть использована как зонд при исследовании структуры стекла.

На основе исследования процессов кристаллизации стекол показано, что наибольшей устойчивостью к кристаллизации обладает стекло, полученное на основе высокочистых кварцитов Восточного Саяна по сравнению со стеклом, полученным на основе гранулированного кварца Кыштымского месторождения (Урал). Стекла, полученные из суперкварцитов и гранулированного жильного кварца Чипикетского месторождения, обладают наибольшей устойчивостью к кристаллизации. Условия съемки позволяли нагревать образцы до 1450 °C, вероятнее всего данной температуры недостаточно, т.к. пик кристаллизации наблюдается при охлаждении образцов.

Разработан подход быстрого анализа параметров ориентации на сканированных изображениях текстурированных пластин мультикремния с помощью нейронной сети. В тройных стыках специальных границ типа $\Sigma 3-\Sigma 9-\Sigma 27a$, где наблюдается геометрическое нарушение кристаллографическое правило о совместимости специальных границ зёрн в тройных стыках.

Вертикальным методом Бриджмена получен слиток с высокой термоэлектрической добротностью (0.49) на основе металлургического кремния высокой чистоты, легированный фосфором с низким содержанием германия ~5 ат.%. Полученный материал имеет потенциал к улучшению термоэлектрических свойств путём снижения фононной составляющей теплопроводности за счёт формирования мелкозернистой структуры.

Анализ псевдограниц для экспериментальных данных ориентации кристаллов успешно проведен с помощью кластеризации, основанной на плотности и построения фундаментальной зоны для симметричных областей. Этот подход эффективно идентифицирует псевдограницы, а также малоугловые разориентации внутри решётки.

За период 2021 – 2024 годы защищено 3 кандидатских диссертации:

Софич Д.О. «Спектроскопия редкоземельных ионов в двойных молибдатах», 20-04-2021, спеальность 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Жабоедов А.П. «Научное обоснование и разработка технологии переработки природных кварцитов Восточного Саяна на основе химического обогащения», 17.12.2021, спеальность 25.00.13 – Обогащение полезных ископаемых.

Чуклина Н.Г. «Исследование механизмов миграции автолокализованной дырки в кристаллах щелочно-земельных фторидов методом молекулярной динамики», 24-12-2021, спеальность 1.3.8 — физика конденсированного состояния.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Seifert S. и др. Accurate measurement of the rise and decay times of fast scintillators with solid state photon counters // J. Inst. - 2012.- Т. 7. № 09. Р. P09004.
2. Starobor A., Mironov E., Palashov O. High-power Faraday isolator on a uniaxial CeF₃ crystal // Opt. Lett., OL.- 2019. -Т. 44. № 6. Р. 1297–1299.
3. Gekhtin A. и др. Europium emission centers in CsI:Eu crystal // Optical Materials - 2013. - Т. 35. № 12. Р. 2613–2617.
4. Hsu O. L., Bates C. W. Excitonic emission from CsI(Na) // Phys. Rev. B. - 1977. Т. 15. № 12. - Р. 5821–5833.
5. Yakovlev V. и др. Charge transfer processes in CsI:Tl using near-UV light // Journal of Luminescence - 2014. - Т. 155. Р. 79–83.
6. Раджабов, Е. А., Шендрик, Р. Ю. Ап-конверсия инфракрасного излучения в щелочноземельных фторидах, активированных Er // Оптика и Спектроскопия. -2020.- 128 (11).- С. 1621-1626.
7. Görlich, P., Karras, H., Kötzitz, G., Rauch, R. Phonon-assisted colour centre fluorescence of additively coloured alkali earth fluoride crystals. // Physica status solidi (b)- 1986.- 25(1). K15-K18.
8. Glynn, T. J. (1991). F-centre luminescence from BaF₂. //Journal of luminescence.-1991.-T. 48. Р. 783-786.
9. Cavenett B.C., Hayes W., Hunter I.C., Stoneham A.M., Magneto Optical Properties of F Centres in Alkaline Earth Fluorides // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.-1969.-Vol. 309. P. 53–68.
10. Gundacker, S., Pots, R.H., Nepomnyashchikh, A., Radzhabov, E.A., Shendrik, R., Omelkov, S.I., Kirm, M., Acerbi, F., Capasso, M., Paternoster, G. and Mazzi, A. Vacuum ultraviolet silicon photomultipliers applied to BaF₂ cross-luminescence detection for high-rate ultrafast timing applications // Phys. Med. Biol.- 2021.- Vol. 66.-P. 114002 (Q2)
<https://doi.org/10.1088/1361-6560/abf476>
11. Ekström JC, Jurgilaitis A, Kroon D, Ahn B, Nagirnyi V, Kirm M, Larsson J. The time-resolved luminescence end station for studies of ultrafast relaxation processes under pulsed femtosecond X-rays at the FemtoMAX beamline // Rev Sci Instrum.-2025. –Vol. 96(12). P. 123903. doi: 10.1063/5.0298955.
12. Douze M., Guzhva A., Deng C., Johnson J., Szilvassy G., Mazaré P.-E., Lomeli M., Hosseini L., Jégou H. //ArXiv.- 2024.- 2401.08281

13. Buck E. C., McNamara B. K. Precipitation of Nitrate- Cancrinite in Hanford Tank Sludge // Environmental science & technology. — 2004. — Т. 38, № 16. Р. 4432— 4438. — DOI: 10.1021/es034943i.
14. Fundamental developments in the zeolite process / S. Bahrani [и др.] // Interface Science and Technology. Т. 32. — 2021. Р. 499—556. — DOI: 10.1016/B978-0-12-818806-4.00003-6.
15. RU Патент № 1707088 Непомнящих А.И., Мироненко С.Н. Способ получения моно-кристаллических детекторов на основе фтористого лития, приоритет от 12 февраля 1982 г.
16. Непомнящих А.И., Мироненко С.Н., Афонин Г.П., Селявко А.И. Моноокристаллические детекторы на основе фтористого лития // Атомная энергия. — 1985.-Т.58. - С.257-259.
17. Мироненко С.Н., Непомнящих А.И., Икрами Д.Д., Парамзин А.С. Рахимов М.Э. Получение фторида лития для термolumинесцентных детекторов ионизирующего излучения // Известия АН СССР. Серия: Неорганические материалы. - 1985.- Т.21.- С.504-506.
18. Непомнящих А.И., Раджабов Е.А., Егранов А.В. Центры окраски и люминесценция кристаллов LiF. – Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1984.- 112 с.
19. Radzhabov E. A. A model of titanium luminescence center in lithium and sodium fluorides. // Phys. Stat. Sol. (b). – 1983. – No 1, Vol. 115, P. 83—88
20. Кудрявцева И., Лущик А., Непомнящих А.И., Савихин Ф., Васильченко Е., Лисовская Ю. Термостимулированная и фотостимулированная люминесценция в моноокристаллах LiF : Mg,Ti, облученных ионами и вакуумным ультрафиолетом //Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50.- С. 9.
21. HE S. S., MERKLIN J. F., QIANG Sm, QIAN WANG. Deep Traps in LiF : Mg, Ti. // Phys. stat. sol(a). – 1994. – No 145. K1
22. Johnson J., Douze M., Jégou H. Billion-scale similarity search with GPUs // arXiv.org. — 2017. — 24 Feb. — arXiv:1702.08734. — URL: <https://arxiv.org/abs/1702.08734> (дата обращения: 21.05.2024). — DOI: 10.48550/arXiv.1702.08734.
23. Singhal A. Modern information retrieval: a brief overview // IEEE Data Engineering Bulletin. — 2001. — Vol. 24, № 4. Р. 35–43.
24. Deza M. M., Deza E. Encyclopedia of Distances. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2009. — 590 p. — DOI: 10.1007/978-3-642-00234-2.
25. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. — Cambridge, MA, USA: MIT Press, 2016. — 800 p. — URL: <http://www.deeplearningbook.org> (дата обращения: 21.05.2024).
26. Gradient-based learning applied to document recognition / Y. Lecun, L. Bottou, Y. Bengio, P. Haffner // Proceedings of the IEEE. — 1998. — Vol. 86, № 11. Р. 2278–2324. — DOI: 10.1109/5.726791.

27. Ioffe S., Szegedy C. Batch Normalization: Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift // arXiv.org. — 2015. — 11 Feb. — arXiv:1502.03167. — URL: <https://arxiv.org/abs/1502.03167>
28. Ishikawa S. T., Gulick V. C. An automated mineral classifier using Raman spectra // Computers & Geosciences. — 2013. — Vol. 54. P. 259–268. — DOI: 10.1016/j.cageo.2012.11.019.
29. Ma D., Shang L., Tang J., Bao Y., Fu J., Yin J. Classifying breast cancer tissue by Raman spectroscopy with one-dimensional convolutional neural network // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. — 2021. — Vol. 256. Art. № 119732. — DOI: 10.1016/j.saa.2021.119732.
30. Luo R., Popp J., Bocklitz T. Deep Learning for Raman Spectroscopy: A Review // Analytica. — 2022. — Vol. 3, № 3. P. 287–301. — DOI: 10.3390/analytica3030020.
31. Wang Y. et al. Dehydrated Na₆[AlSiO₄]₆ sodalite as a promising SO₂ sorbent material: A first principles thermodynamics prediction // Journal of the American Ceramic Society. — 2019. — T. 102. — №. 6. P. 3663-3672.
32. Khajavi S., Jansen J. C., Kapteijn F. Production of ultrapure water by desalination of seawater using a hydroxy sodalite membrane // Journal of Membrane Science. — 2010. — T. 356. — №. 1-2. P. 52-57.
33. Vance E. R. et al. Silver iodide sodalite for ¹²⁹I immobilisation // Journal of Nuclear Materials. — 2016. — T. 480. P. 177-181.
34. Lillova K. et al. Energetics of salt-bearing sodalites, Na₈Al₆Si₆O₂₄X₂ (X = SO₄, ReO₄, Cl, I): A treatment option for pertechnetate-enriched nuclear waste streams // ACS Earth and Space Chemistry. — 2020. — T. 4. , №. 11. P. 2153-2161.
35. Grajciar L. PbS clusters embedded in sodalite zeolite cavities of different compositions: Unraveling the structural evolution and optical properties using ab initio calculations // The Journal of Physical Chemistry C. — 2016. — T. 120. — №. 47. P. 27050-27065.
36. Heil C. et al. Superconductivity in sodalite-like yttrium hydride clathrates // Physical Review B. — 2019. — T. 99., №. 22. P. 220502.
37. Chukanov N. V. et al. Isomorphism and mutual transformations of S-bearing components in feldspathoids with microporous structures // Minerals. — 2022. — T. 12., №. 11. P. 1456.
38. Rejmak P. Computational refinement of the puzzling red tetrasulfur chromophore in ultramarine pigments // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2020. — T. 22., №. 39. P. 22684-22698.
39. Bolotina N. B. et al. Vladimirivanovite revised: General crystal chemistry and isomorphous substitutions of extra-framework species // Minerals. — 2024. — T. 14., №. 9. P. 883.

40. Fedyayeva M. et al. Mutual Transformations of Polysulfide Chromophore Species in Soda-lite-Group Minerals: A DFT Study on S₆ Decomposition // ChemPhysChem. – 2024. – Т. 25., №. 20. Р. e202400532.
41. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Physical review B. – 1993. – Т. 47., №. 1. Р. 558.
42. Neese F. The ORCA program system // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2012. – Т. 2., №. 1.Р. 73-78.
43. Kühne T. D. et al. CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package-Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations // The Journal of Chemical Physics. – 2020. – Т. 152.,№. 19. Р 194103.
44. A.S. Mysovsky, A.I. Bogdanov, Seamless Multi-Layer (SML) - a novel total energy partition scheme for embedded and hybrid calculations// Journal of Chemical Theory and Computation. - 2023. - Vol.19. , No. 23. DOI: 10.1021/acs.jctc.3c00666
45. Гордиенко И.В., Метелкин Д.В., Ветлужских Л.И. Строение Монголо-Охотского складчатого пояса и проблема выделения Амурского микроконтинента // Геология и геофизика.- 2019.- Т. 60, № 3.- С. 318—341.
46. Гордиенко И.В., Булгатов А.Н., Руженцев С.В., Минина О.Р., Климук В.С., Ветлужских Л.И., Некрасов Г.Е., Ласточкин Н.И., Ситникова В.С., Метелкин Д.В., Гонегер Т.А., Лепехина Е.Н. История развития Удино-Витимской островодужной системы Забайкальского сектора Палеоазиатского океана в позднем рифе—палеозое // Геология и геофизика.- 2010.- Т. 51, № 5.- С. 589–614.
47. Steele-MacInnis M. Fluid inclusions in the system H₂O-NaCl-CO₂: An algorithm to determine composition, density and isochore //Chemical Geology. – 2018. – Т. 498. – С. 31-44.
48. Steele-MacInnis M., Lecumberri-Sanchez P., Bodnar R. J. HokieFlincs_H₂O-NaCl: A Microsoft Excel spreadsheet for interpreting microthermometric data from fluid inclusions based on the PVTX properties of H₂O–NaCl //Computers & Geosciences. – 2012. – Т. 49. – С. 334-337.
49. Воробьев Е.И., Спиридовон А.М., Непомнящих А.И., Кузьмин М.И. Сверхчистые кварциты Восточного Саяна (Республика Бурятия, Россия) // ДАН. – 2003.- Т. 390, № 2.- С. 219-223.
50. Федоров А.М., Макрыгина В.А., Будяк А.Е., Непомнящих А.И. Новые данные о геохимии и механизме формирования кварцитов месторождения Бурал-Сарыдаг (Восточный Саян) // ДАН. – 2012.- Т. 442, № 2.- С.244-249.
51. Непомнящих А.И., Волкова М.Г., Жабоедов А.П., Лесников А.К., Лесников П.А., Паклин А.С., Сизова Т.Ю., Спиридовон А.М., Федоров А.М., Шалаев А.А., Шендрик Р.Ю.

- Оптическое стекло из кварцитов Восточного Саяна // Физика и химия стекла. – 2018.- Т.44, № 2.- С.169-177.
52. Непомнящих А. И., Волкова М. Г., Жабоедов А. П., Федоров А. М.. Кварцевые концентраты на основе сливного кварцита // Неорганические материалы. – 2018.- Т. 54, № 8.- С. 850–853.
53. Волкова М.Г., Непомнящих А.И., Федоров А.М., Махлянова А.М., Брянский Н.В. Флюидные включения в «суперкварцитах» месторождения Бурал-Сардык (Восточный Саян) // Геология и геофизика – 2017.- Т. 58, № 9.- С.1324-1331.
54. Аюрганаева Д.Ц., Федоров А.М., Мазукабзов А.М., Непомнящих А.И., Очирова Э.А., Посохов В.Ф.. Механизмы формирования химически чистых кварцитов Бурал-Сардыкского месторождения// Геология и геофизика.- 2020.- N 10.- С. 1316-1330.
55. Непомнящих А.И., Федоров А.М., Жабоедов А.П., Волкова М.Г. Высокочистые кварциты Восточного Саяна // Геология и геофизика.- 2023. Т.8.- С. 1205-1215.
56. Adams B. L., Wright S. I., Kunze K. Orientation imaging: the emergence of a new microscopy // Metallurgical Transactions A. – 1993. – Т. 24. №. 4. – С. 819-831.
57. Rollett A. D. et al. Three-dimensional characterization of microstructure by electron back-scatter diffraction //Annu. Rev. Mater. Res. – 2007. – Т. 37. – №. 1. – С. 627-658
58. Strub F., Charagne M. A., Pollock T. M. Correction of Electron Back-scattered Diffraction datasets using an evolutionary algorithm // arXiv preprint arXiv:1903.02982. – 2019.
59. Zheng B., Wen J., Fei C. MSA-GAN: A novel method for inpainting EBSD image via cellular automation and deep learning //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2024. – Т. 2784., №. 1. Р. 012027.
60. Yu J. et al. Free-form image inpainting with gated convolution //Proceedings of the IEEE, CVF international conference on computer vision. – 2019. P. 4471-4480.

ПРИЛОЖЕНИЕ А.
ОПУБЛИКОВАННЫЕ СТАТЬИ ПО ПРОЕКТУ

Результаты работы по проекту были представлены в 107 опубликованных статьях, в том числе:

- в 2025 – 23 статьи
- в 2024 – 21 статья
- в 2023 – 18 статей
- в 2022 – 23 статьи
- в 2021 – 22 статьи

Опубликованные статьи по проекту в 2025 году

1. Раджабов Е А, Аномальная люминесценция Sm²⁺ в кристаллах LaF₃ // Оптика и спектроскопия. – 2025.- Т. 133 - С. 817-821 DOI: 10.61011/OS.2025.08.61507.7541-25.
2. Shendrik R, Radzhabov E, Myasnikova A, Pankratova V, Šarakovskis A, Nepomnyashchikh A, Bogdanov A, Gavrilko V, Kaneva E, Sofich D, Garmysheva T, Pankratov V., Ultrafast core-to-core luminescence in BaF₂--LaF₃ single crystals // Scientific Reports.-2025.-15:26558 . P.1-10 - 15:26558 1-10 <https://doi.org/10.1038/s41598-025-11505-w>
3. Paperny VL, Chernykh AA, Ishchenko AS, Murzin SV, Myasnikova AS, Radzhabov EA, Shendrik R. Yu, Martynovich E.F., Dresvyansky V.P. Enhancement of photoluminescence from rare-earth ions in fluoride crystals by ion-implanted silver nanoparticles // Journal of Luminescence. – 2025. – 279. P. 121044.
4. Radzhabov E., F center spectra in additively colored BaF₂ and SrF₂ // Optical materials, после рецензии отправлено 28 ноября 2025 - OM-D-25-04625_R1.
5. Subanakov, A., Kovtunets, E., Spiridonova, T., Sobolev, A., Molokeev, M., Sofich, D., Bogdanov A., Bazarov, B. A new structure type of the Na₃Yb(BO₃)₂: Synthesis, crystal structure, thermal behavior, ionic conductivity, and spectroscopy // Solid State Sciences. - 2025. - Т. 160. С. 107821.
6. Sofich, D., Gavrilko, V., Pankratova, V., Pankratov, V., Kaneva, E., Shendrik, R. NIR-Emitting Scintillators Based on CsI Single Crystals // Crystals. - 2025. -Т. 15. № 6.- С. 489.
7. Sofich D. O., Bogdanov A. I., Shendrik R. Y. Spectroscopic and vibrational properties of CsI single crystals doped with divalent samarium // Optical Materials. - 2025. - Т. 162. P. 116958.
8. Orlova E., Morkhova Y., Sorokin T., Zakharova E., Kharitonova E., Lyskov N., Shendrik R., Kabanov A., Yapaskurt V., Alekseeva O. Ionic transport and luminescence properties in sodium- and fluorine-co-doped rare-earth molybdates NaLn₄Mo₃O₁₅F (Ln = Sm–Tb) // Dalton Trans. - 2025. - Vol. 54. P. 9689 10.1039/D5DT00809C.

9. Smirnov S., Shendrik R., Myasnikova A., Plechov P. ArDI: Machine-Learning-Driven Raman Phase Analysis for Decoding Complex Mineral Assemblages in Fluid Inclusions // Journal of Raman Spectroscopy.- 2025. 10.1002/jrs.70047
10. Zhitova, E.S.; Zolotarev, A.A.; Sheveleva, R.M.; Shendrik, R.Y.; Hawthorne, F.C.; Nuzhdaev, A.A.; Vlasenko, N.S.; Kaneva, E.V.; Yakovenchuk, V.N. Heat-Induced Mn²⁺ and Fe²⁺ Oxidation in Heterophyllosilicates: Kupletskite and Kupletskite-(Cs)// Minerals.- 2025.- V. 15.- P. 587
11. Chukanov N.V., Zubkova N.V., Shendrik R.Yu., Sapozhnikov A.N., Pekov I.V., Vigasina M.F., Chervonnaya N.A., Varlamov D.A., Bolotina N.B., Ksenofontov D.A. and Pushcharovsky D.Yu. Crystal Structure Features, Spectroscopic Characteristics and Thermal Conversions of Sulfur-Bearing Groups: New Natural Commensurately Modulated Haüyne Analogue, Na₆Ca_{2-x}(Si₆Al₆O₂₄)(SO₄₂₋,HS-,S₂₋,S₄,S₃₋,S₅₂₋)₂ // Minerals.- 2025.- V. 15(7).- P. 709 10.3390/min15070709
12. Bogdanov, A. I., Chukanov, N. V., Shendrik, R. Y., & Pekov, I. V. Spectroscopic Properties of Polysulfide Anions, Radical Anions, and Molecules: Ab Initio Calculations and Application to Minerals of the Sodalite and Cancrinite Groups // Minerals - 2025.- Vol. 15. P. 1207. 10.3390/min15111207
13. Шендрик Р. Ю., Чуканов Н. В., Паниковский Т. Л., Вигасина М. Ф., Пеков И. В. Анион-радикал S₂₋ в природных силикатах (на примере фельдшпатоидов, скаполитов и везувиана) // Записки Российского минералогического общества.- 2025.- Т. Cliv.- С.73–105 10.31857/s0869605525030066
14. Смирнов С.З., Плечов П.Ю., Шендрик Р.Ю., Мясникова А.С., Чачанагова О.И. ArDI программа для ЭВМ. Свидетельство 2025663615 от 28.05.2025 (УГТ 7).
15. Мясникова А.С., Шендрик Р.Ю., Елисеев И.А., Чачанагова О.И., Федоров А.М., Непомнящих А.И. Применение методов машинного обучения для классификации кварцитов по химическому составу: влияние микроэлементов и геохимическая идентификация // Литосфера. – 2025.- 25(2).- С. 320-335.
16. Соболев А. Н., Ковтунец Е. В., Спиридонова Т. С., Богданов А. И., Субанаков А. К. Двойной борат NaScB₂O₅: синтез, термическое поведение, электропроводность и электронная структура // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2025. – Т. 27. – №. 3. – С. 454-463.
17. Федоров А.М., Юргенсон Г.А., Непомнящих А.И., Жабоедов А.П., Зимин М.Д., Куликова З.И., Макрыгина В.А., Чачанагова О.И., Аюргжанаева Д.Ц. Геохимия, минералогия и источники вещества кварцевых жил и кварцитов южной части хребта Боршовочный (Забайкалье) // Геология и геофизика, 2025.- Т. 66, № 8. -С. 1006–1021.

18. Kovtunets E.V., Tushinova Y., Spiridonova T.S., Bazarova T., Logvinova A., Bogdanov A., & Bazarov B. Two-dimensional negative thermal expansion and ionic conductivity of a new glaserite-like ternary molybdate KZn0.5Hf0.5(MoO4)2 // Chimica Techno Acta. – 2025. - Vol. 12(2). No. 12208
19. Корекина М. А., Рыжков В. М., Савичев А. Н., Штенберг М.В., Жабоедов А.П., Морозов Р.С., Артемьев Д.А., Игуменцев К.В. Дефекты и микропримеси в стекле из природного молочно-белого кварца месторождений Южного Урала // Стекло и керамика. – 2025. – Т. 98, № 3(1167). – С. 11-19.
20. Daurzhan Kenbayev, Elena Polisadova, Alexei Shalayev, Marina Konuhova Pulsed cathodoluminescence of BaFBr crystals irradiated by swift heavy ions // Technobius Physics. – 2025. - 3(1). P. 0029 .
21. Potekhina, Nadezhda V., Roman Yu. Shendrik, Nikita V. Chukanov, Maria G. Krzhizhanovskaya, Sergey N. Britvin, Vasiliy O. Yapaskurt, Vasiliy D. Shcherbakov, and Igor V. Pekov. Synthesis and Properties of High-Entropy Sodalite- and Cancrinite-Type Aluminosilicates with Mixed Extra-Framework Species // Mineralogical Magazine. -2025. -P. 1–21. <https://doi.org/10.1180/mgm.2025.10158>
22. Непомнящих А.И., Жабоедов А.П., Зимин М.Д., Гармышева Т.Ю., Канева Е.В., Федоров А.Ф., Шалаев А.А., Субанаков А.К. КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА // Физика и химия стекла. – 2025. –Т. 51. – С. 5
23. Alexeenko V. M., Zherlitsya A. A., Kondratiev S. S., Sitnikov A. G., Nepomnyashchikh A. I and Zhaboedov A. P.. Using Generators with Operating Voltage of 50 kV for Electric Discharge Crushing of Quartz Raw// ISSN 1062-8738 Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics . - 2025 . - Vol. 89, Suppl. 2. P. S284–S288.

Опубликованные статьи по проекту – 2024 г.

1. Sarychev M.N., Zhevstovskikh I.V., Ofitserova N.Yu., Korostelin Yu.V., Ulanov V.A., Egranov A.V., Surikov V.T., Averkiev N.S. and Gudkov V.V. Quantum acoustics of the Jahn-Teller complexes in doped crystals: Configurational relaxation time as indicator of the complex // Physical Review B. - 2024. -109. P.214104. DOI: 10.1103/PhysRevB.109.214104 (ИФ = 3,2 Q2)
2. Егранов А.В. Преобразование Cd+-центров, содержащих анионную вакансию, и их термическая стабильность // Оптика и спектроскопия. - 2024. – V.132(3). P. 328-334. DOI: 10.61011/OS.2024.03.58153.4980-23 (ИФ = 0,8 Q4)
3. Сарычев, М.Н., Офицерова, Н.Ю., Жевстовских, И.В., Егранов, А.В., Суриков, В.Т., Аверкиев, Н.С., Гудков, В.В., КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМ-

ПЛЕКСОВ Cr₂+F₈- В КРИСТАЛЛЕ CdF₂-Cr // ЖЭТФ. – 2024.- Т. 165 (2). - С. 226
<http://dx.doi.org/10.31857/S0044451024020081>

4. Dorokhin M.V., Kuznetsov Yu.M., Demina P.B., Erofeeva I. V., Zdoroveyshchev A.V., Ved M.V., Zdoroveyshchev D.A., Zavrazhnov A. Yu., Nekrylov I. N., Peshcherova S. M. Application of the Bridgman method to obtain thermoelectric silicon doped with germanium and phosphorus // Inorganic Materials: Applied Research.-2024. - V.15. P. 289–295. <https://doi.org/10.1134/S207511332402014X>
5. Mashkovtsev R.I., Zhaboedov A.P., Nepomnyashchikh A.I. Correction to: Paramagnetic Defects in High-Purity Quartz and Cristobalite Grits after Various Stages of Purification (Silicon, (2023), 10.1007/s12633-023-02829-1) // Silicon - 2024. - 16(5). P. 2193. DOI: 10.1007/s12633-024-02868-2
6. Kuznetsov A. B., Kokh K. A., Gorelova L. A., Sofich D. O., Sagatov N., Gavryushkin P. N., Kokh A. E. Growth, crystal structure and IR luminescence of KSrY_{1-x}Er_x(BO₃)₂ // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. -2024. - 80(2). P. 126-134.
7. Anenburg M., Panikorovskii T.L., Jennings E.S., Shendrik R.Yu., Antonov A.A., Gavrilenco V. An Apatite-Group Praseodymium Carbonate Fluoroxybritholite: Hydrothermal Synthesis, Crystal Structure, and Implications for Natural and Synthetic Britholites // In-organic Chemistry. - 2024.-V. 63(25). P. 11788-11801 (13.06.2024). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c01490 (ИФ = 4,3 Q1)
8. Chukanov N.V., Bolotina N.B., Shendrik R.Y., Sapozhnikov A.N., Zubkova N.V., Pekov I.V., Vigasina M.F., Sandalov F.D., Ksenofontov D.A. Crystal Chemistry and Re-fined Formula of Tounkite // Minerals. - 2024. - V.14(4), art. no. 382 (06.04.2024) DOI: 10.3390/min14040382 (ИФ = 2,2 Q2)
9. Kulpina E., Babkina A., Zyryanova K., Kuzmenko N., Ignatiev A., Valiev D., Stepanov S., Pankin D., Povolotckaia A., Platonova N., Shendrik R. Valence state conversion of Mn ions in Li₂O-ZnO-GeO₂ glass-ceramics: Spectral, structural, ESR and XRF studies (2024) // Ceramics International. - 2024. - V. 50 (11, Part B). P. 19592-19603. DOI: 10.1016/j.ceramint.2024.03.076 (ИФ = 5,1 Q1)
10. Nikiforov I.V., Spassky D.A., Krutyak N.R., Shendrik R.Y., Zhukovskaya E.S., Aksenov S.M., Deyneko D.V. Co-Doping Eff.ct of Mn²⁺ and Eu³⁺ on Luminescence in Strontiowhitlockite Phosphors // Molecules. – 2024. – V.29: 124. DOI: 10.3390/molecules29010124 (ИФ = 4,2 Q2)
11. Shendrik R., Kaneva E., Pankratova V., Pankrushina E., Radomskaia T., Gavrilenco V., Loginova P., Pankratov V. Intrinsic luminescence and radiation defects in scapolite // Chemical

Physics Letters. - 2024. – V. 838: 141081 (01.03.2024) DOI: 10.1016/j.cplett.2024.141081 (ИФ = 2,8 Q1 Q3)

12. Shendrik R., Kaneva E., Pankratova V., Pankrushina E., Radomskaya T., Gavrilenco V., Loginova P., Pankratov V. Corrigendum to “Intrinsic luminescence and radiation defects in scapolite” [Chem. Phys. Lett. 838 (2024) 141081] // Chemical Physics Letters . – 2024.- V. 838 (S0009261424000186), (10.1016/j.cplett.2024.141081)) 141141. DOI: 10.1016/j.cplett.2024.141141.
13. Shendrik R., Chukanov N.V., Bogdanov A., Myasnikova A., Pankrushina E., Zolotarev A.A., Babkina A., Popova E., Vigasina M.F., Aksenov S.M., Ilyin G. and Pekov I.V. Na-ture of Scapolite Color: Ab Initio Calculations, Spectroscopy, and Structural Study // Minerals. - 2024. – V. 14(9). P. 937. (13.09.2024) DOI: 10.3390/min14090937 (ИФ = 2,2 Q2).
14. Sofich D., Myasnikova A., Bogdanov A., Pankratova V., Pankratov V., Kaneva E., & Shendrik R. Crystal Growth and Spectroscopy of Yb²⁺-Doped CsI Single Crystal // Crystals.- 2024 .-V. 14(6). P 500. (24.05.2024) DOI: 10.3390/cryst14060500 (ИФ = 2,4 Q2 Q3)
15. Zvereva M., Zhmurova A. & Shendrik R. The Use of Spectral Methods for the “Ensemble” Assessment of Synthesis Dynamics of the Arabinogalactan-Stabilized Selenium Nanoparticles // Journal of Cluster Science. - 2024. –V.35(3). P. 809-825. (01.03.2024) DOI: 10.1007/s10876-023-02525-5 (ИФ = 2,7 Q2)
16. Паперный В.Л., Черных А.А., Ищенко А.С., Мурzin С.В., Мясникова А.С., Шендрик Р. Ю., Мартынович Е.Ф., Дресвянский В.П. Спектрально-люминесцентные свойства кристаллов щелочноземельных фторидов, имплантированных ионами се-ребра // Известия РАН. Серия физическая.- 2024. - Том 88, № 7. - С. 1051-1054.
17. Kungulova E.N. Bibko, A.A., Shendrik, R.Y., Moskvichev E.N., Lychagin D.V., Tishin P.A. Water Redistribution in Vein Quartz Under Progressive Deformation (During Plastic Deformation): μFTIR and EBSD Study (Western Transbaikalia, Russia) // Minerals. – 2024. – V. 14. P. 1289. <https://doi.org/10.3390/min14121289>
18. Akilbekov A., Kenbayev D., Dauletbekova A., Shalaev A., Akylbekova A., Aralbayeva G., Baimukhanov Z., Baizhumanov M., Elsts E. and Popov A.I. The Effect of 147 MeV 84Kr and 24.5 MeV 14N Ions Irradiation on the Optical Absorption, Lumines-cence, Raman Spectra and Surface of BaFBr Crystals // Crystals. – 2024. – V.14(6). P. 480. DOI: 10.3390/cryst14060480
19. Inerbaev T., Akilbekov A., Kenbayev D., Dauletbekova A., Shalaev A., Polisadova E., Konuhova M., Piskunov S. and Popov A.I. Color Centers in BaFBr Crystals: Experimental Study and Theoretical Modeling // Materials. – 2024. – V.17(13). P. 3340. DOI: 10.3390/ma17133340

20. Аршинский В.Л., Пещерова С.М., Осипова Е.А., Чуешова А.Г., Шишкин Д.В. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024611151 "Программа для классификации зёрен metallurgical кремния по их кристаллографическим параметрам". Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 18 января 2024 г.
21. Шендрик Р. Ю., Канева Е. В., Радомская Т. А., Чачанагова О. И., Сукнева М. О., Демонтерова Е. И., Богданов А. И., Митичкин М. А., Логинова П. С., Власюк И. А., Сасим С. А. База инфракрасных спектров отражения минералов Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2024624496 2024

Опубликованные статьи по проекту – 2023 г.

1. Radzhabov E., Shendrik R., Pankratov V., Chernenko K. Fine structure of 4f–5d absorption spectra of $\text{MeF}_2\text{-Yb}^{3+}$ in the vacuum ultraviolet region under synchrotron excitation // Optical Materials . - 2023.-Vol. 135. P. 113235 10.1016/j.optmat.2022.113235
2. Раджабов Е., Шендрик Р., Панкратов В. Спектроскопия лантаноидов f13 во фторидных кристаллах // Оптика и спектроскопия. – 2023. – Vol. 131(4). - С. 466, 10.21883/OS.2023.04.55549.54-22
3. Софич Д. О., Шендрик Р. Ю. Спектроскопия двухвалентного самария в моно-кристаллах иодида цезия // Оптика и спектроскопия. – 2023. – Т. 131. – №. 5.- С.615.
4. Kovtunets E., Subanakov A., Sofich D., Spiridonova T., Paklin A., Bazarov B., Ba-zarova J. Crystal structure, conductivity, vibrational, spectroscopic and thermal properties of $\text{Rb}_3\text{Eu}_3[\text{BO}_3]_4$ // Solid State Sciences.- 2023.- P. 107364.
5. Zvereva M., Zhmurova A., Shendrik R. The Use of Spectral Methods for the “En-semble” Assessment of Synthesis Dynamics of the Arabinogalactan-Stabilized Selenium Nano-particles // J Clust Sci.- 2023.-Vol 35 P.809. <https://doi.org/10.1007/s10876-023-02525-5>
6. Мысовский А.С., Паклин А. С. Моделирование расплавов SiO_2 и процессов образования стекол методом молекулярной динамики // Физика и химия стекла.- 2023.- Т. 49, Vol. 3. - С.294-312.
7. Mysovsky A.S., Bogdanov A.I. Seampless-Multi-Layer (SML) – a novel total energy partition scheme for embedded and hybrid calculations // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2023.- Vol. 19(23). P. 8839-8854. (16.11.2023) DOI: 10.1021/acs.jctc.3c00666 (ИФ = 5,5 Q1 Q2)
8. Mysovsky A.S., Bogdanov A. I. New formulation of hybrid QM/MM method for studying crystalline and amorphous solids // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.- 2023.- Vol. 87, Supplement issue 1. S111–S115. <https://doi.org/10.1134/S1062873823704476>

9. Myasnikova A.S., Bogdanov A. I. Ab initio study of BaF₂ crystals doped with La³⁺ and Lu³⁺ ions at low pressure // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.- 2023.- Vol. 87. P. S111-S115 Supplement issue 1, October 6, 2023, S111–S115. <https://doi.org/10.1134/S1062873823704488>
10. Непомнящих А.И., Федоров А.М., Жабоедов А.П., Волкова М.Г.. Высокочи-стые кварциты Восточного Саяна // Геология и геофизика. – 2023.- № 8. - С.1205-1215. DOI: 10.15372/GiG2023128
11. Пальянов Ю.Н., Непомнящих А.И.. Современные проблемы эксперимен-талной ми-нералогии, петрологии и геохимии // Геология и геофизика.- 2023.- N 8. - С. 1069-1072. DOI: 10.15372/GiG2023134
12. Жабоедов А.П., Непомнящих А.И., Елисеев И.А., Федоров А.М. Кварцевые концен-траты на основе кварцитов Уренгенурского блока // Обогащение руд.- 2023.- №4.- С. 20-25. DOI: 10.17580/or.2023.04.04
13. Mashkovtsev R.I., Zhaboedov A.P., Nepomnyashchikh A.I.. Paramagnetic Defects in High-Purity Quartz and Cristobalite Grits after Various Stages of Purification // Silicon.- 2023-T.16.- P.2183 doi.org/10.1007/s12633-023-02829-1
14. Дорохин М.В., Кузнецов Ю.М., Демина П.Б., Ерофеева И.В., Здоровейщев А.В., Ведь М.В., Здоровейщев Д.А., Завражнов А.Ю., Некрылов И.Н., Пещерова С.М., Пресняков Р.В., Сахаров Н.В.. Применение метода Бриджмена для получения термоэлек-трического кремния, легированного германием и фосфором // Перспективные материа-лы.- 2023.- №9.- С. 26-35. DOI: 10.30791/1028-978X-2023-9-26-35
15. Mamontova S.G., Zelentsov S.Z., Dergin A.A. Experience of Calculation Factor of the Structural Complexity Coefficient for Structural Challenges Describe the Regularities of Ge-netic Inheritance Structure Under Crystallization of Berillian Indialite. In: Marin, Y. (eds) XIII General Meeting of the Russian Mineralogical Society and the Fedorov Session. GMRMS 2021 // Springer Proceedings in Earth and Environmental Sciences. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-031-23390-6_83 (15.02.2023)
16. Pesherova S.M., Osipova E.A., Chueshova A.G., Kolesnikov S.S., Ryb'yakov M.Yu., Kuznetsov A.A., Arshinskii V.L. A Method for Fast Identification of Orientation Pa-rameters of Multicrystalline Silicon // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. - 2022.- 58(6). P. 594-601 (20.03.2023) DOI: 10.3103/S8756699022060085)
17. Chukanov Nikita V. et al. Crystal Chemistry, Thermal and Radiation-Induced Con-versions and Indicatory Significance of S-Bearing Groups in Balliranoite // Minerals. - 2023. - Vol. 13. № 6. P. 822.

18. Sapozhnikov A.N. et al, Slyudyankaite, Na₂₈Ca₄(Si₂₄Al₂₄O₉₆)(SO₄)₆(S₆)_{1/3}(CO₂)·2H₂O, a new sodalite-group mineral from the Malo-Bystrinskoe lazurite deposit, Baikal Lake area, Russia // American Mineralogist.- 2023.- 108 (9). P.1805–1817. DOI: <https://doi.org/10.2138/am-2022-8598>

Опубликованные статьи по проекту – 2022 г.

1. Garmysheva T., Nepomnyashchikh A. I., Shalaev A., Kaneva E., Paklin A., Chernenko K., Kozlova A. P., Pankratov V. Shendrik R. Luminescence of ODC(II) in quartz and cristobalite glasses // Journal of Non-Crystalline Solids.- 2022. –Vol. 575. P. 121199. doi: 10.1016/j.jnoncrysol.2021.121199 (ИФ = 3,531 Q1)
2. Kaneva E., Shendrik R. Radiation defects and intrinsic luminescence of cancrinite // Journal of Luminescence.- 2022. – Vol. 243. P. 118628. DOI: 10.1016/j.jlumin.2021.118628 (ИФ = 3,599 Q1)
3. Chukanov Nikita V., Zubkova Natalia V., Pekov Igor V., Shendrik Roman Yu., Varlamov Dmitry A., Vigasina Marina F., Belakovskiy Dmitry I., Britvin Sergey N., Yapaskurt Va-siliy O. and Pushcharovsky Dmitry Yu.. Sapozhnikovite, Na₈(Al₆Si₆O₂₄)(HS)2, a new sodalite-group mineral from the Lovozero alkaline massif, Kola Peninsula // Mineralogical Magazine . - 2022.- Vol.86. P. 49-59. doi:10.1180/mgm.2021.94 (ИФ = 2,062 Q2)
4. Финкельштейн А.Л., Дергин А.А., Непомнящих А.И., Амосова А.А., Чубаров В.М. Рентгенофлуоресцентное определение содержания бора в стеклах боратов лития. - 2022. – Т. 48 (1).- С. 10-15 DOI: 10.31857/S0132665122010048 (ИФ = 0,883 Q4)
5. Чуешова А. Г., Пещерова С. М., Павлова Л. А., Непомнящих А. И., Лудина Е. А., Якимов Е. Б., Феклисова О. В., Федина Л. И.. Влияние структурных параметров тройных стыков специальных границ зерен на их рекомбинационную активность // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.- 2022.- N. 3.- С. 3-9
6. Зимин М.Д., Жабоедов А.П., Колесников С.С., Непомнящих А.И. Изменение РСА индекса кристалличности высокочистого кварца на различных этапах обогащения и ДОРЭ-анализ структуры кварца // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.-2022.- 3.- С. 3-9
7. Пещерова С.М., Чуешова А.Г., Зимин М.Д., Лудина Е.А., Павлова Л.А., Непомнящих А.И., Рыбьяков М.Ю., Довченко Л.К., Зубрицкий С.М. Влияние параметров разориентации зёрен в мультикристаллическом кремнии на формирование контраста изображения СЭМ // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования. - 2022.- N. 2.- С. 38-44. DOI: 10.31857/S1028096022020108 (англ. DOI: 10.1134/S1027451022010293)

8. Гармышева Т. Ю., Шендрек Р. Ю., Паклин А. С., Шалаев А. А., Канева Е. В., Непомнящих А. И.. Люминесценция кислородно-дефицитных центров в кварцевых стеклах // Физика и химия стекла.- 2022.- Т. 48.- N 3.- C. 361–366. DOI: 10.31857/S0132665122030039
9. Пресняков Р.В., Пещерова С.М., Чуешова А.Г., Бычинский В.А., Непомнящих А.И. Взаимодействие примесей при выращивании mc-Si на основе UMG-Si // Известия ВУЗов. Прикладная химия и биотехнология.- 2022.- Т. 12. N 1.- C. 15-29. <https://doi.org/10.21285/2227-2925-2022-12-1-15-29>
10. Sarychev M.N., Hosseny W.A.L., Zhevstovskikh I.V., Ulanov V.A., Shakurov G.S., Egranov A.V., Surikov V.T., Averkiev N.S., Gudkov V.V. Manifestation of the Jahn-Teller effect subject to quadratic problem in ultrasonic attenuation. Case study of CaF₂:Cr crystal with isovalent and aliovalent substitution // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2022.- V. 34.No 22. Article Number: 225401. DOI: 10.1088/1361-648X/ac533c (ИФ = 2,333 Q3)
11. Chukanov N.V., Vigasina M.F., Shendrik R.Yu., Varlamov D.A., Pekov I.V., Zubkova N.V. Nature and Isomorphism of Extra-Framework Components in Cancrinite-and Sodalite-Related Minerals: New Data // Minerals.- 2022.- V. 12. No 6. Номер статьи: 729. DOI: 10.3390/min12060729 (ИФ = 2,644 Q2 Q2 Q2)
12. Егранов А.В., Раджабов Е.А., Козловский В.А.. Оптические свойства щелочно-земельных фторидов и CdF₂ // Известия РАН.Серия Физическая .- 2022.- Т.86.- No 7.- C. 962-966. DOI: 10.31857/S0367676522070134
13. Bazarov B., Dorzhieva S.G., Shendrik R.Yu., Tushinova Yu.L., Bazarova T.T., Sofich D.O., Chimitova O.D., Bazarova J.G. Synthesis and luminescent properties of new double Ln₂Zr(WO₄)₅ (Ln = Tb, Dy) tungstates // Chimica Techno Acta. -2022. –Vol. 9 (2).-P. 20229205. DOI: 10.15826/chimtech.2022.9.2.05
14. Sarychev M.N., Hosseny W.A.L., Ulanov V.A., Egranov A.V., Surikov V.T., Zhevstovskikh I.V., Averkiev N.S., Gudkov V.V. Contribution of the distorted Jahn-Teller complexes to the elastic moduli in fluorite crystal //AIP Conference Proceedings. -2022. –Vol. 246610.P. 030013. DOI: 10.1063/5.0088733.
15. Шалаев А. А., Непомнящих А. И., Паклин А. С., Шендрек Р. Ю., Гармышева Т. Ю. Синтез и оптические свойства кварцевых стекол, легированных церием и титаном // Физика и химия стекла.- 2022.- Т. 5.- C. 520-526.
16. Щепина Л. И., Шендрек Р. Ю., Межова Е. В., Иванов Н. А., Ружников Л. И. ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ УРАНА, ВОЗБУЖДАЕМАЯ В ПОЛОСЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯ-ДА В НЕОБЛУЧЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ LIF-UO₂ // Известия РАН.Серия Физическая. – 2022. -Т.86.- N. - C. 967-971. DOI: 10.31857/S0367676522070134.

17. Pankratova V., Dunaeva, E. E., Voronina I. S., Kozlova A. P., Shendrik R., Pankratov V. Luminescence properties and time-resolved spectroscopy of rare-earth doped SrMoO₄ single crystals // Optical Materials. : X – 2022.- Vol.15. P. 100169, doi: 10.1016/j.omx.2022.100169.
18. Chukanov N. V., Zubkova N. V., Schäfer C., Pekov I. V., Shendrik R. Y. Vigasina M. F., Belakovskiy D. I., Britvin S. N., Yapaskurt V. O., Pushcharovsky D. Y., Bolotinaite (Na₆K_□)(Al₆Si₆O₂₄)F·4H₂O, a New Sodalite-Group Mineral from the Eifel Paleovolcanic Region, Germany // Mineralogical Magazine. – 2022. –Vol. 86. P.920-928.
19. Radzhabov E., Shendrik R. and Pankratov, V. Emission of Tm²⁺ in alkaline-earth fluoride crystals // Journal of Luminescence. – 2022. –Vol. 252. –P.119271. 10.1016/j.jlumin.2022.119271.
20. Сарычев М.Н., Хоссуни У. А.Л., Жевстовских И.В., Уланов В.А., Егранов2 А.В., Суриков В.Т., Аверкиев Н.С., Гудков В.В. Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов Cu₂+F₈- в кристалле флюорита // ЖЭТФ. – 2022.-Vol. 162(4). - С. 509-521. DOI: 10.31857/S004445102210008X. (M. N. Sarychev W. A. L. Hosseny I. V. Zhevstovskikh V. A. Ulanov A. V. Egranov V. T. Surikov N. S. Averkiev & V. V. Gudkov. Adiabatic Poten-tial Energy Surface of Jahn–Teller Cu₂+F–8 Complexes in a Fluorite Crystal // Journal of Experimental and Theoretical Physics. - 2022.- Vol. 135. P. 473–483. (09.12.2022) англ. DOI: 10.1134/S106377612210017X (ИФ = 1,111 Q4).
21. Пещерова С.М., Осипова Е.А., Чуешова А.Г., Колесников С.С., Рыбьяков М.Ю., Кузнецов А.А., Аршинский В.Л. Метод быстрой идентификации параметров ориентации мультикристаллического кремния // Автометрия. – 2022.- Т. 58, N 6. – С.54-63. DOI: 10.15372/AUT20220600.
22. Федоров А.М., Аюржанаева Д.Д., Волкова М.Г., Макрыгина В.А., Мазукабзов А.М., Непомнящих А.И., Чачанагова О.И. Температуры образования разновидностей высокочистых кварцитов Восточного Саяна // ДОБРЕЦОВСКИЕ ЧТЕНИЯ: НАУКА ИЗ ПЕРВЫХ РУК. Материалы Первой Всероссийской научной конференции, посвященной памяти выдающего ученого и организатора науки академика РАН Николая Леонтьевича Добрецова 1–5 августа 2022 г. Новосибирск, Россия. - С. 338-341.
23. Федоров А.М., Непомнящих А.И., Макрыгина В.А. Высокочистое кварцевое сырье Восточного Саяна: геохимия, генезис и ресурсный потенциал // Научно-практическая конференция «Актуальные проблемы поисковой геологии» Москва, ФГБУ «ВИМС», 22-24 ноября 2022.

Опубликованные статьи по проекту – 2021 г.

1. Mashkovtsev R.I., Nepomnyashchikh A.I., Zhaboedov A.P., Paklin A.S.. EPR study of the E' defects in optical glasses and cristobalite // EPL- Europhysics Letters.- 2021.-Vol. 133.- P. 14003. Doi: 10.1209/0295-5075/133/14003
2. Доржиева С. Г., Софич Д.О., Базаров Б.Г., Шендрик Р.Ю., Базарова Ж.Г. Оптические свойства молибдатов с комбинацией редкоземельных элементов // Неорганические материалы.- 2021.- Т. 57, N 1.- C. 57-62. DOI: 10.31857/S0002337X21010048 (англ. DOI: 10.1134/S00020168521010040 (ИФ = 0,844 Q4)
3. Сарычев М.Н., Бондаревская А.С., Жевстовских И.В., Уланов В.А., Шакуров Г.С., Ерганов А.В., Суриков В.Т., Аверкиев Н.С., & Гудков В.В. Туннельные механизмы релаксации системы Ян-Теллеровских комплексов в кристалле CaF₂:Cr²⁺.// Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020.- Т. 113 (1-2 (1))- C. 52-57. DOI: 10.31857/S1234567821010079. Sarychev M.N., Bondarevskaya A.S., Zhevstovskikh I.V., Ulanov V.A., Shakurov G.S., Egranov A.V., Surikov V.T., Averkiev N.S., Gudkov V.V. Tunneling Relaxation Mechanisms of the Jahn–Teller Complexes in a CaF₂:Cr²⁺ Crystal // JETP Letters.- 2021.- V. 113, No 1.- P. 47-51 (01.2021), DOI: 10.1134/S0021364021010082 (ИФ = 1,399 Q3)
4. Shendrik R., Kaneva, E., Radomskaya, T., Sharygin I., Marfin A. Relationships between the structural, vibrational, and optical properties of microporous cancrinite // Crystals.- 2021.- Vol. 11.-No 3: 280 (03.2021) DOI: 10.3390/cryst11030280 (ИФ = 2,404 (Q2))
5. Sapozhnikov, A.N.; Tauson, V.L.; Lipko, S.V.; Shendrik, R.Y.; Levitskii, V.I.; Suvo-rova, L. F.; Chukanov, N.V.; Vigasina, M.F. On the crystal chemistry of sulfur-rich lazurite, ide-ally Na₇_7Ca(Al₆_6Si₆_6O₂₄_{}{24})(SO₄_4)(S₃_3)-^{}{-}·nH₂_2O. // American Mineralogist.- 2021.- Vol. 106 (2).- P. 226-234 doi: doi:10.2138/am-2020-7317 (Q2), IF 2.922
6. Gundacker, S., Pots, R.H., Nepomnyashchikh, A., Radzhabov, E.A., Shendrik, R., Omelkov, S.I., Kirm, M., Acerbi, F., Capasso, M., Paternoster, G. and Mazzi, A. Vacuum ultra-violet silicon photomultipliers applied to BaF₂ cross-luminescence detection for high-rate ultra-fast timing applications // Phys. Med. Biol.- 2021 .- Vol. 66.-P. 114002 (Q2) <https://doi.org/10.1088/1361-6560/abf476>
7. Дергин А.А., Мамонтова С.Г., Непомнящих А.И. Люминесцентные стекла на основе тетрабората лития, легированные Sm³⁺ и Gd³⁺ // ФХС.- 2021.-Т. 4.-C. 421-427.
8. Khanin V., Venevtsev I., Chernenko K., Pankratov V., Klementiev K., van Swieten T., van Bunningen A.J., Vrubel I., Shendrik R., Ronda C., Rodnyi P., Meijerink A. Ex-citon interaction with Ce³⁺ and Ce⁴⁺ ions in (LuGd)₃(Ga,Al)5O₁₂ ceramics // Journal of Luminescence. – 2021.- Vol. 237.- P.118150 (09.2021) DOI: 10.1016/j.jlumin.2021.118150 (ИФ = 3,28 Q1)

9. Сарычев М.Н., Бондаревская А.С., Жевстовских И.В., Уланов В.А., Шакуров Г.С., Егранов А.В.2, Суриков В.Т., Аверкиев Н.С., Гудков В.В. Релаксационный вклад системы ян-тэллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. -2021.- N. 159 (5).- C. 892-902. DOI: 10.31857/S0044451021050059. (ИФ = 1,290 Q3). Sarychev, M.N., Bondarevskaya, A.S., Zhevstovskikh, I.V. et al. Relaxation Contribution of a System of Jahn–Teller Complexes to the Elastic Moduli of Doped Fluorites.// J. Exp. Theor. Phys. – 2021.- Vol. 132.-P. 790–799 . <https://doi.org/10.1134/S106377612105006X> (IF 0.909)
10. Samborsky, A. V., Radzhabov, E. A. Dielectric spectra of divalent rare-earth metal ions in LaF₃ crystals. // AIP Conference Proceedings.-2021.- Vol. 2392 (1).- P.020007. doi: 10.1063/5.0062750
11. Kaneva, E. V., Shendrik, R. Y., Vladykin, N. V., Radomskaya, T. A. Crystal-Chemical Features of Rare and Complex Silicates from Charoite Rocks of the Malyy Murun Volca-no-Plutonic Alkaline Complex. // Alkaline Rocks, Kimberlites and Carbonatites: Geo-chemistry and Genesis. Springer International Publishing.- 2021.- P. 115-129 DOI: 10.1007/978-3-030-69670-2_8
12. Myasnikova, A., Bogdanov, A., Shendrik, R. The first-principle calculation of F-centers in BaXY crystals (X, Y - F, Cl, Br, I). // AIP Conference Proceedings.-2021.- Vol. 2392 (1).-P. 04000., doi: 10.1063/5.0061906
13. Shchepina, L. I., Shendrik, R. Yu., Lasareva, T. S., Ivanov, N. A. Electron-phonon in-ter-action of color centers in MgF₂ and LiF-O₂OH crystals. // AIP Conference Proceedings.-2021.- Vol. 2392 (1).- P. 040003. doi: 10.1063/5.0061805
14. Sofich, D., Shendrik, R., Rusakov, A., Shalaev, A., Myasnikova, A. Luminescent prop-er-ties of BaBrI:Sm²⁺ scintillation crystals. // AIP Conference Proceedings. - 2021.-Vol. 2392 (1).- P. 040004 doi: 10.1063/5.0061794
15. Dresvyanskiy V.P., Murzin S.V., Zimin M.D., Enkhbat S., Zilov S.A., Martynovich E.F. The conversion of color centers in lithium fluoride crystals at temperatures of 50-490°C. // AIP Conference Proceedings. - 2021.- Vol. 2392.- P. 030003 (27.07.2021) DOI: 10.1063/5.0062089 (Scopus)
16. Subanakov A.K., Kovtunets E.V., Bazarov B.G., Pugachev A.M., Sofich D.O., Baza-rova J.G. Exploration of structural, thermal and vibrational properties of new noncentrosym-metric double borate Rb₃Tm₂B₃O₉. // Solid State Sciences. -2021.- Vol. 120. - P. 106719 (01.10.2021) DOI: 10.1016/j.solidstatesciences.2021.106719 (ИФ = 3.059 Q2)
17. Федоров А.М., Макрыгина В.А., Мазукабзов А.М., Непомнящих А.И., Аюрганаева Д.Ц., Волкова М.Г.. Ресурсы кварцевого сырья Гарганской зоны Восточносаянско-го

кварцитоносного района // Георесурсы. – 2021.- N. 4.- C. 70-75. DOI:
<https://doi.org/10.18599/grs.2021.4.1>

18. Radomskaya T. A., Kaneva E. V., Shendrik R. Yu., Suvorova L. F., and Vladynkin N. V. Sulfur-Bearing Sodalite, Hackmanite, in Alkaline Pegmatites of the Inagli Massif (Aldan Shield): Crystal Chemical Features, Photochromism, and Luminescence // Geology of Ore Deposits.-2021.- Vol. 63, No. 7.- P.. 1–9.
19. Kaneva, E.; Radomskaya, T.; Shendrik, R.; Chubarov, V.; Danilovsky, V. Potassic-Hastingsite from the Kedrovyy District (East Siberia, Russia): Petrographic Description, Crystal Chemistry, Spectroscopy, and Thermal Behavior. // Minerals.-2021.- Vol. 11 (10). P. 1049 (Q2) doi: 10.3390/min11101049
20. Лазурит: подтверждение статуса минерального вида с формулой $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)\text{S}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и новые данные / А. Н. Сапожников, Н. В. Чука-нов, Р. Ю. Шендрек, Вигасина М.Ф., Таусон В.Л., Липко С.В., Белаковский Д.И., Левицкий В.И., Суворова Л.Ф., Иванова Л.А.// Записки Российского минералогического общества. – 2021. – Т. 150. – № 4. – С. 92-102. – DOI 10.31857/S0869605521040055
21. Mastrikov Yu.A., Chuklina N.G., Sokolov M.N., Popov A.I., Gryaznov D., Kotomin E.A., Maier J. Small radius electron and hole polarons in PbX₂ (X = F, Cl, Br) crystals computational study // Journal of Materials Chemistry C.- 2021. No 46. P.16536-16544. (Impact Factor: 7.393, Q1) DOI: 10.1039/D1TC01731D
22. Chueshova A.G., Pavlova L. A., Peshcherova S. M., and Nepomnyashchikh A. I.. Crystallographic Parameters of Special Grain Boundaries in Multicrystalline Silicon // Crystallography Reports.- 2021.- Vol. 66.- No. 7.- P. 1206–1215. DOI: 10.1134/S106377452107004X

ПРИЛОЖЕНИЕ Б
СПИСОК СОТРУДНИКОВ, ЗАДЕЙСТВОВАННЫХ В ПРОЕКТЕ

Список научных сотрудников

	ФИО	Должность	Раздел
1.	Непомнящих А.И.	Главный научный сотрудник, д.ф-м.н.	1.9; 1.10; 4.1; 4.2
2.	Раджабов Е.А.	Главный научный сотрудник, д.ф-м.н.	1.4; 1.5
3.	Мысовский А.С.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н.	2.5
4.	Федоров А.М.	Старший научный сотрудник, к.г-м.н.	3
5.	Мясникова А.С.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н.	2.1, 2.2
6.	Шалаев А.А.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н.	4.2
7.	Шендрик Р.Ю.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н	1.6-1.8
8.	Гармышева Т.Ю.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н	1.9; 4.2
9.	Богданов А.И.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н	2.3; 2.4
10.	Жабоедов А.П.	Старший научный сотрудник, к.т.н.	4.1; 4.2
11.	Софич Д.О.	Старший научный сотрудник, к.ф-м.н	1.1 - 1.3
12.	Пресняков Р.В.	Научный сотрудник, к.ф-м.н	1.10
13.	Чуклина Н.Г.	Научный сотрудник, к.ф-м.н	2.5
14.	Зимин М.Д.	Младший научный сотрудник	3.2
15.	Чуешова А.Г.	Младший научный сотрудник	4.3
16.	Теренин С.Ю.	Младший научный сотрудник	4.1

Инженерно-технический персонал

	ФИО	Должность
17.	Елисеев И.А.	Начальник ОУ, к.т.н.
18.	Пархоменко И.Ю.	Главный специалист, к.х.н.
19.	Демина О.И.	Ведущий инженер, к.г-м.н.
20.	Пономарёва В.Ю.	Ведущий инженер
21.	Бобина Н.С.	Ведущий инженер
22.	Ивашечкин В.Ф.	Главный специалист
23.	Соломеин О.Н.	Ведущий инженер
24.	Непомнящих А.А.	Ведущий инженер
25.	Романов В.С.	Ведущий инженер
26.	Козловский В.А.	Ведущий инженер
27.	Шпак Е.О.	Ведущий инженер
28.	Рыбьяков М.Ю.	Инженер
29.	Непомнящих Е.А.	Инженер
30.	Кохов А.И.	РВК