УДК 539.1:539.2:539.108

ТРЕХМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ПОЛЯРИЗАЦИИ РАССЕЯННЫХ НЕЙТРОНОВ ТЕПЛОВОГО, ХОЛОДНОГО И ОЧЕНЬ ХОЛОДНОГО СПЕКТРА В ИССЛЕДОВАНИЯХ МАГНИТНОЙ ДИНАМИКИ ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ

© 2020 г. В. Т. Лебедев^{*a*, *}, А. П. Серебров^{*a*, **}

^аПетербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, НИЦ "Курчатовский институт", Ленинградская область, Гатчина, 188300 Россия *E-mail: lebedev_vt@pnpi.nrcki.ru **E-mail: serebrov_ap@pnpi.nrcki.ru Поступила в редакцию 19.12.2018 г. После доработки 14.01.2019 г. Принята к публикации 14.01.2019 г.

Предложен метод изучения магнитной динамики эндофуллеренов $M@C_{2n}$ (2n = 60, 70, ...) и их производных, в том числе фуллеренолов $M@C_{2n}(OH)_X$ ($X \sim 30$), инкапсулирующих 4f-элементы внутри углеродных каркасов. Обсуждаются возможности 3D-поляриметрии тепловых, холодных и очень холодных нейтронов для анализа магнитных мод в металлоорганических системах и, в частности, в ансамблях эндофуллеренов. Предполагается использовать спиновую зависимость когерентного и некогерентного рассеяния нейтронов на ядерной и магнитной подсистемах образцов. Дипольные взаимодействия таких объектов существенны в растворах и коллоидных системах, где они создают молекулярные агрегаты, обладающие сложной магнитной динамикой, включая мягкие релаксационные моды. Их изучение с помощью нейтронов очень низких энергий важно для понимания механизмов самоорганизации и биомедицинских применений эндофуллеренов.

Ключевые слова: эндофуллерены, рассеяние, поляризация, очень холодные нейтроны, динамика, структура, магнетизм.

DOI: 10.31857/S1028096020010100

введение

Поляризованные нейтроны – наиболее эффективный инструмент изучения спиновой динамики в магнитных структурах традиционных (ферро- и антиферромагнетиках) и новых, ставших предметом интенсивных исследований в последние десятилетия [1-4]. Поляризованные нейтроны незаменимы при решении задач магнетизма и сверхпроводимости, структуры и динамики твердого тела и конденсированных сред, если при взаимодействии с образцом наблюдается спиновая зависимость рассеяния нейтронов [5-8]. В этом случае сечение рассеяния и вектор поляризации рассеянных нейтронов зависят от взаимной ориентации исходного вектора поляризации нейтронов, векторов рассеяния и магнитных моментов атомов в образце [9, 10]. Важно не только магнитное рассеяние на электронных оболочках атомов, но и взаимодействие поляризованных нейтронов с ядерными спинами, если речь идет об изучении ядерного магнетизма или разработке техники поляризации ядер [11–13].

Наиболее информативны эксперименты с вариацией направления вектора поляризации падающих на образец нейтронов и измерением трех компонент вектора поляризации нейтронов после рассеяния, т.е. поляризационный 3D-анализ. Он построен на принципах неадиабатического и адиабатического вращения векторов поляризации нейтронных пучков с узкими и сравнительно широкими спектрами длин волн. Так, монохроматические пучки тепловых нейтронов ($\Delta\lambda/\lambda \sim 1\%$) достаточно интенсивные, но в случае холодных нейтронов требуется поднимать интенсивность за счет ширины спектра длин волн ($\Delta\lambda/\lambda \sim 10-$ 30%) [14–16]. Для очень холодных нейтронов тем более важно задействовать доступную спектральную полосу ($\lambda \sim 10-30$ нм), применяя адиабатический принцип управления вектором поляризации или комбинированный способ [17].

Поляризационный анализ при изучении магнитных фазовых переходов и соответствующих критических явлений, спиновых флуктуаций [7, 18] позволяет детектировать слабое магнитное рассеяние в области малых углов на фоне ядерно-



Рис. 1. Молекула металлофуллеренола $M@C_{82}(OH)_{Y}$ (X = 38).

го рассеяния и исходного пучка, характеризующегося угловой расходимостью. В немагнитных аморфных полимерах аналогичным образом обнаруживали молекулярный порядок. Измеряли малую когерентную составляющую рассеяния, маскируемую сильным некогерентным фоном от водорода в образцах, учитывая, что в когерентном процессе поляризация нейтронов сохранялась, а при рассеянии на протонах она становилась отрицательной [19, 20].

В настоящей работе обсуждаются возможности изучения магнитной динамики молекулярных объектов, эндометаллофуллеренов (ЭМФ) и производных, содержащих магнитные атомы [21-23], способные двигаться внутри углеродного каркаса фуллерена с подвижными π-электронами и передавать ему заряд, а также магнитный момент. Ансамбли ЭМФ могут демонстрировать магнитную динамику локально. за счет степеней свободы инкапсулированного атома (флуктуаций направления момента атома, его колебаний, диффузии у внутренней поверхности фуллерена), вращательной и поступательной диффузии молекул, а также не локально – посредством коллективных мод в образовавшихся при взаимодействии молекул агрегатах типа фрактальных структур в растворах [21-23]. В этом аспекте динамические магнитные свойства ансамблей ЭМФ практически не исследованы, тем более на нелокальном уровне, т.е. когда выражены процессы взаимодействия и упорядочения ЭМФ и производных в надмолекулярные структуры. Для этой цели наиболее перспективны очень холодные поляризованные нейтроны, так как они имеют низкую энергию ~ 10^{-6} эВ, что необходимо для зондирования мягких магнитных мод в указанных структурах.

МАГНИТНЫЕ ЭНДОФУЛЛЕРЕНЫ

Первые эндоэдральные комплексы, La@C₆₀ [24], получили почти одновременно с фуллеренами (1985 г.) [25]. За три десятилетия подобные структуры с редкоземельными элементами получены главным образом при электродуговом испарении графита вместе с соединениями (оксидами) металлов [26]. Полости внутри фуллеренов достаточны для размещения от одного до трех атомов металла, что позволяет синтезировать ЭМ Φ с общей формулой $M_m@C_{2n}$ [26], а также создавать кластерные структуры типа M₃N@C₈₀ (M = Lu, Y, Er) [27]. Содержащие магнитные атомы ЭМФ привлекают не только научный интерес, но и перспективны для приложений, например, биомедицинских. Они могут служить эффективными контрастирующими агентами в магнитно-резонансной и компьютерной томографии, поскольку сочетают магнетизм с высокой химической стабильностью за счет прочной углеродной оболочки, что минимизирует риски выхода атомов токсичных тяжелых металлов в среду организма. С помощью реакций гидроксилирования получают растворимые в воде и биологических средах фуллеренолы $M@C_{82}(OH)_X$, где M – атом редкоземельного элемента, $X \sim 30-40$ – число гидроксилов [22, 23] (рис. 1). Фуллеренолы 4*f*-элементов $M@C_{2n}(OH)_X(X \sim 30-40; M = Pr, Sm,$ Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Tm) изучали в водных растворах в экспериментах по рассеянию холодных нейтронов [22, 23]. Дальнейшие исследования планируется провести, используя источник ультрахолодных нейтронов на сверхтекучем гелии (ПИЯФ) [28].

Данные о рассеянии холодных нейтронов позволили охарактеризовать водные растворы фуллеренолов $M@C_{2n}(OH)_X (X = 38 \pm 2; M = Pr, Sm,$ Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Tm) как системы с тремя уровнями структуры. Первичный уровень представлен молекулярными группами (числа агрегации десять и менее) с радиусом корреляции ~1 нм, объединенными в агрегаты размерами ~10 нм, которые распределены в пространстве на расстояниях ~50 нм (второй и третий уровни). При переходе от нейтральной среды (рН 7) к кислой (pH 3) на масштабах ~10-50 нм наблюдалось vсиление агрегации фуллеренолов с различными редкоземельными атомами. Повышение температуры (20-37°С) практически не возмущало процессы структурирования. Надмолекулярная организация фуллеренолов определяется в первую очередь взаимодействиями молекул на первичным уровне структурирования с масштабом корреляций $r_C \sim 1-2$ нм, на котором числа агрегации в нейтральной и кислой среде растут с увеличени-

ем размера структур по степенному закону $v \sim r_C^D$. Показатель $D = 2.5 \pm 0.1$ указывает на образова-

ние разветвленных массовых фрактальных объектов (рис. 2).

Следует учитывать, что в упорядочении фуллеренолов наряду с водородными связями через гидроксилы важную роль играют дипольные магнитные силы, так как атомы металла имеют магнитные моменты. Обычно такой атом смещен к внутренней поверхности фуллерена и за счет частичной передачи заряда создает электрический дипольный момент у молекулы фуллеренола. Однако электростатические дипольные взаимодействия сильно экранированы полярной водной средой. Поэтому магнитные силы приводят к упорядочению молекул на масштабах ~1-100 нм. Помимо нейтронных данных агрегацию подтверждают данные атомно-силовой микроскопии высушенных на подложке сильно разбавленных растворов Gd@C_{2n}(OH)_x, Ho@C_{2n}(OH)_x, Tb@C_{2n}(OH)_x $(X = 38 \pm 2)$, в которых зафиксировано образование структур с размерами ~30-150 нм.

Эксперименты по рассеянию неполяризованных нейтронов позволили изучить упорядочение фуллеренолов в растворах на масштабах ~1–100 нм, однако не могли дать информации о магнитной структуре и динамике таких систем. Для получения такого рода данных необходимы поляризованные нейтроны, позволяющие измерять сечения образцов в различных спектральных диапазонах (тепловые, холодные, очень холодные нейтроны) вместе с трехмерным анализом поляризации при рассеянии.

ТРЕХМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ПОЛЯРИЗАЦИИ НЕЙТРОНОВ

Трехмерный анализ поляризации тепловых и холодных нейтронов активно применяют при изучении магнетиков [14], но в случае очень холодных нейтронов подобная методология и техника не получили развития ввиду отсутствия интенсивных пучков нейтронов с длинами волн масштаба 10 нм и выше. Прорыв в этом направлении связан с планируемым запуском источника ультрахолодных нейтронов (реактор BBP-M, ПИЯФ), который будет вырабатывать и очень холодные нейтронов с плотностью потока на выходе нейтроновода $\Phi \sim 10^6$ см⁻² · с⁻¹ [28], что сопоставимо с аналогичными величинами для холодных нейтронов на реакторах среднего потока.

По сравнению с холодными нейтронами, очень холодные нейтроны за счет меньшей на два порядка энергии способны служить для измерений неупругого рассеяния в области очень низких энергий $E \le 10^{-9}$ эВ, что невозможно для других нейтронных методов (дифракционных с использованием кристаллов, времяпролетных) или находится на пределе их возможностей, как в спинэхо спектроскопии [29].



Рис. 2. Корреляции между числами агрегации v и радиусами первичных структур r_C в водных растворах: 20°C, pH 3 (*I*); 37°C, pH 3 (*2*); 20°C, pH 7 (*3*); 37°C, pH 7 (*4*). Точки – эксперимент, кривые – усредненные данные при pH 3 и 7 и различных температурах.

В основе предлагаемого подхода – спиновая зависимость рассеяния нейтронов в когерентных и некогерентных процессах (рис. 3). Для этого используют пучок поляризованных нейтронов с вектором поляризации \mathbf{P}_0 вдоль ведущего магнитного поля. Модуль этого вектора $P_0 = (N^+ - N^-)/(N^+ + N^-)$ задан отношением разности и суммы интенсивностей нейтронов со спинами вдоль и против поля (N^+, N^-) .

В образце при когерентном ядерном рассеянии сохраняется исходный вектор поляризации нейтронов: $\mathbf{P}_{coh} = \mathbf{P}_0$. При некогерентном рассеянии на ядрах, если их спины направлены случайным образом, вектор поляризации нейтронов меняет знак и величину: $\mathbf{P}_{inc} = -(1/3)\mathbf{P}_0$ (например, рассеяние на протонах). Если же рассеяние идет на парамагнитных центрах (атомах, частицах, доменах), важна взаимная ориентация \mathbf{P}_0 и вектора рассеяния $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, где \mathbf{k}_0 и \mathbf{k} – волновые векторы нейтрона до и после рассеяния. Результирующий вектор $\mathbf{P}_S = -\mathbf{e}(\mathbf{e}\mathbf{P}_0)$ зависит от единичного вектора рассеяния $\mathbf{e} = \mathbf{q}/q$.

Указанные особенности изменения поляризации позволяют разделить вклады каналов рассеяния в уравнениях для сечения образца и вектора поляризации рассеянных нейтронов, в частности, для магнитных и водородсодержащих сред [30, 31]:

$$d^{2}\sigma(\omega,\mathbf{q})/d\Omega d\omega = \sigma_{N \operatorname{coh}} + \sigma_{N \operatorname{inc}} + + [1 + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{m})^{2}]\sigma_{T}/2 + [1 - (\mathbf{e} \cdot \mathbf{m})^{2}]\sigma_{L}/2 + + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{m})(\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{0})\sigma_{TA} + (\mathbf{P}_{0} \cdot \mathbf{m}_{\perp})\sigma_{NM},$$
(1)
$$\mathbf{P}d^{2}\sigma/d\Omega d\omega = \mathbf{P}_{0}\sigma_{N \operatorname{coh}} - (1/3)\mathbf{P}_{0}\sigma_{N \operatorname{inc}} + + [\mathbf{P}_{0}m_{\perp}^{2}/2 - \mathbf{m}_{\perp}(P_{0}m_{\perp}) - \mathbf{e}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{0})]\sigma_{T} + + [\mathbf{m}_{\perp}(\mathbf{P}_{0} \cdot \mathbf{m}_{\perp}) - \mathbf{P}_{0}m_{\perp}^{2}/2]\sigma_{L} - \mathbf{e}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{m})\sigma_{TA} + \mathbf{m}_{\perp}\sigma_{NM},$$

ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ № 1 2020



Рис. 3. Схема эксперимента: *PL* – поляризатор; *VA* – блоки для задания вектора поляризации на образце (\mathbf{P}_0) и анализа поляризации рассеянных нейтронов (\mathbf{P}) вместе с флипперами для реверсирования векторов ($\pm \mathbf{P}_0, \pm \mathbf{P}$); *S* – образец; *A* – анализатор, *D* – детектор; $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ – вектор рассеяния нейтрона на угол θ ; \mathbf{k}_0 и \mathbf{k} – начальный и конечный волновые векторы нейтрона.

где **m** и **m**_⊥= **m** – **e**(**e** · **m**) – единичный вектор намагниченности и его компонента поперек вектора рассеяния. В уравнение (1) входят дважды дифференциальные парциальные сечения и соответствующие векторы поляризации: сечения σ_{Ncoh} , σ_{Ninc} при когерентном и некогерентном спиновом ядерном рассеянии (для неполяризованных ядер), магнитные компоненты σ_T , σ_L , определяемые симметричными поперечными и продольными относительно вектора **m** корреляциями моментов, вклад ядерно-магнитной интерференции σ_{NM} . Антисимметричными поперечными корреляциями моментов, σ_{TA} , обычно можно пренебречь.

Полный эксперимент включает измерение сечений $d^2\sigma(\omega, \mathbf{q})/d\Omega d\omega$ с помощью двумерного детектора (рис. 3). Посредством устройств векторного анализа (*VA*) определяют компоненты *X*, *Y*, *Z* вектора поляризации $P_{i,j}(i,j=1,2,3)$ по осям *X*, *Y*, *Z*, последовательно задавая начальный вектор \mathbf{P}_0 по каждой из осей. Устройства *VA* снабжены адиабатическими флипперами. Они реверсируют начальный вектор поляризации ($\pm \mathbf{P}_0$) и векторы поляризации рассеянных нейтронов ($\pm \mathbf{P}$) (рис. 3). Данные двумерного детектора при различной взаимной ориентации намагниченности и импульса ($\mathbf{q} \parallel \mathbf{m}, \mathbf{q} \perp \mathbf{m}$) позволяют найти парциальные сечения.

В парамагнитном образце $\sigma_T = \sigma_L = \sigma_M$, поэтому достаточно измерить только диагональные компоненты (P_{XX} , P_{YY} , P_{ZZ}) матрицы поляризации $P_{i,j}$. Схема (рис. 3) применима к изучению магнитной динамики водородсодержащих молекулярных систем с магнитными атомами, в данном случае, фуллеренолов в растворах. Для направленного по оси Z пучка нейтронов рассеяние на малые углы ($\theta \ll 1$) соответствует **q**-векторам, лежащим практически в плоскости XY. Удобно выбрать начальную ориентацию вектора поляризации по оси Y, измеряя компоненту поляризации P_{YY} для нейтронов, рассеянных с векторами **q** = **q**_Y и **q** = **q**_X. Тогда из уравнения (1) следуют соотношения:

$$d^{2}\sigma/d\Omega d\omega = \sigma_{N \operatorname{coh}} + \sigma_{N \operatorname{inc}} + \sigma_{M},$$

$$[P_{YY}(q_{Y})/P_{0}]d^{2}\sigma/d\Omega d\omega =$$

$$= \sigma_{N \operatorname{coh}} - (1/3)\sigma_{N \operatorname{inc}} - \sigma_{M},$$

$$[P_{YY}(q_{X})/P_{0}]d^{2}\sigma/d\Omega d\omega = \sigma_{N \operatorname{coh}} - (1/3)\sigma_{N \operatorname{inc}},$$
(2)

и доля магнитной компоненты в суммарном сечении

$$\sigma_{M}/(d^{2}\sigma/d\Omega d\omega) = \left[P_{YY}\left(q_{X}\right)/P_{0}\right] - \left[P_{YY}\left(q_{Y}\right)/P_{0}\right].$$
 (3)

Появление проекции P_{YZ} для рассеянных с векторами **q** = **q**_Y нейтронов вызвано неупругим магнитным рассеянием:

$$P_{YZ}(q_Y)/P_0 = -ez_z^2[\sigma_M/(d^2\sigma/d\Omega d\omega)].$$
(4)

Квадрат *Z*-компоненты нормированного вектора рассеяния

$$ez_{z}^{2} = [(k/k_{0})\cos\theta - 1]^{2}/[1 + (k/k_{0})^{2} - 2(k/k_{0})\cos\theta] \approx (5)$$
$$\approx (1/4) \omega^{2}/E^{2}\theta^{2}$$

пропорционален квадрату энергии магнитного возбуждения (ω^2) в случае квазиупругого рассеяния на малые углы: $\theta^2 \ll \omega/E \ll 1$ (*E* – энергия ней-

трона). При наличии спектра возбуждений измеряется среднеквадратичная по спектру энергия

$$\Omega^2 = 4E^2 [P_{YZ}(q_Y)/P_0] [(d^2\sigma/d\Omega d\omega)/\sigma_M]\theta^2.$$
(6)

Детектирование магнитных возбуждений низких энергий (6) облегчается тем, что поляризационный эффект (4) растет с длиной волны нейтронов: $P_{YZ} \sim \lambda^4$. При переходе от тепловых ($\lambda_T \sim 0.1$ нм) к холодным и очень холодным ($\lambda_{VCN} \sim 10$ нм) нейтронам выигрыш достигает ~10⁸. Кроме того, действует фактор усиления при малых углах: $P_{YZ} \sim 1/\theta^2$.

Таким образом, с помощью очень холодных нейтронов представляется реальным наблюдать мягкие магнитные моды в фуллереновых структурах даже при наличии одного магнитного атома на молекулу (рис. 1).

Для сравнения, в коллоидах (феррожидкостях) с частинами магнетита (лиаметр ~10 нм. ~10⁴ магнитных атомов) анализировали поляризацию рассеянных холодных нейтронов (λ ~ 0.3 нм) и обнаружили магнитные диффузионные моды, энергия ~ 10^{-5} эВ [15]. На масштабах десятков нанометров структуры из эндофуллеренов в растворах содержат сопоставимое число магнитных атомов [22]. Не обладая магнитным порядком, свойственным кристаллическим магнетикам, они имеют фрактальное строение [22, 23] и могут демонстрировать сложную магнитную динамику – повороты моментов атомов внутри углеродных оболочек и вращательную диффузию вместе с молекулами, медленную структурную релаксацию в наноразмерных агрегатах. Очень холодные нейтроны позволят продвинуться в область низких энергий магнитных мод (10⁻⁹ эВ и менее) и анализировать процессы (механизмы) взаимодействий и самоорганизации этих объектов в различных условиях (растворы, коллоиды, биологические среды). Понимание закономерностей магнитной динамики эндофуллеренов важно не только с фундаментальной точки зрения, но и для разработки и применений этих объектов и их производных для биомедицины, в частности, в качестве эффективных контрастирующих агентов в магнитно-резонансной томографии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Трехмерный поляризационный анализ в экспериментах по рассеянию нейтронов при переходе к очень холодной части спектра длин волн ~10-30 нм открывает перспективы изучения магнитной динамики металл-углеродных структур, эндофуллеренов и иных молекулярных объектов с магнитными атомами с высоким энергетическим разрешением — 10^{-9} эВ и менее. Использование очень холодных нейтронов вместе с 3D поляризационной техникой и развитой методологией позволит продвинуться в направлениях исследования динамических магнитных явлений в областях физики, химии и биологии, связанных с металлоорганическими системами, включая изучение механизмов катализа, химических реакций с металлами, синтеза металлоорганических полимеров.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено в ПИЯФ НИЦ "Курчатовский институт" за счет Российского научного фонда (проект № 14-22-00105) в части, касающейся нейтронных исследований (50%), и при поддержке РФФИ (грант № 18-29-19008-мк) в части, относящейся к эндофуллеренам (50%).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Малеев С.В.* // Успехи физических наук. 2002. Т. 172. № 6. С. 617.
- Maleyev S.V. // J. Phys.: Condens. Matt. 2004. V. 16. P. 899.
- Окороков А.И., Григорьев С.В., Рунов В.В. и др. // Поверхность: Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. Т. 9. С. 49.
- Grigoriev S.V., Dyadkin V.A., Menzel D. et al. // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 224424.
- Lebedev V.T., Gordeev G.P., Toperverg B.P. et al. // Physica B. 1995. V. 213–214. P. 990.
- Lebedev V.T., Torok Gy., Cser L., Sibilev A.I. // Physica B. 2001. V. 297. P. 55.
- 7. Окороков А.И., Рунов В.В., Топерверг Б.П. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43. С. 390.
- Moon RM., Riste T., Koehler W.C. // Phys. Rev. 1969.
 V. 181. № 2. P. 920.
- Абов Ю.Г., Гулько А.Д., Крупчицкий П.А. Поляризованные медленные нейтроны. М.: Атомиздат, 1966. С. 268.
- 10. *Williams W.G.* Polarized Neutrons. Oxford: Clarendon Press, 1988. 599 p.
- 11. *Гуревич И.И., Тарасов Л.В.* Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. 608 с.
- 12. Лебедев В.Т., Гордеев Г.П. // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. С. 820.
- Roberts T.W., Humblot H., Tasset F. et al. // Physica B. 2001. V. 297. P. 282.
- Rekveldt M.T., van Woesik J., Meijer J. // Phys. Rev. B. 1977.V. 16. № 9. P. 4063.
- Аксельрод Л.А., Гордеев Г.П., Лазебник И.М. и др. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 2(8). С. 531.
- Окороков А.И., Рунов В.В., Волков В.И., Гукасов А.Г. // ЖЭТФ. 1983. Т. 69. № 2. С. 590.
- Lebedev V.T., Torok Gy. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 195. Iss. 3–4. P. 449.
- Окороков А.И., Гукасов А.Г., Слюсарь В.Н. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 37. № 6. С. 269.
- 19. Лебедев В.Т., Аксельрод Л.А., Гордеев Г.П. и др. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 5. С. 1373.

- 20. Лебедев В.Т., Аксельрод Л.А., Гордеев Г.П. и др. // ФТТ. 1985. Т. 27. С. 3351.
- Westerström R., Greber T. // Endohedral Fullerenes: Electron Transfer and Spin. Ch. 11. Cham: Springer, 2017. P. 213. https://doi.org/10.1007/978-3-319-47049-8
- 22. Лебедев В.Т., Кульвелис Ю.В., Рунов В.В. и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 10. С. 88.
- Lebedev V.T., Szhogina A.A., Suyasova M.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 994. P. 012005. https://doi.org/10.1088/1742-6596/994/1/012005
- 24. *Heath J.R., O'Brien S.C., Zhang Q.* // J. Am. Chem. Soc. 1985. V. 107. № 25. P. 7779.
- Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C. et al. // Nature. 1985. V. 318. P. 162. https://doi.org/10.1038/318162a0

- 26. Popov A.A., Yang S., Dunsch L. // Chem. Rev. 2013. V. 113. № 8. P. 5989. https://doi.org/10.1021/cr300297r
- 27. Cerón R., Maffeis V., Stevenson S., Echegoyen L. // Inorg. Chim. Acta. 2017. V. 468. P. 16.
- Серебров А.П., Лямкин В.А., Пусенков В.М. и др. // Журн. техн. физики. 2019. Т. 89. № 5. В печати.
- 29. *Mezei F.* // Lecture Notes in Physics. Neutron Spin Echo. Proceed. ILL Workshop. Grenoble, 1979. P. 3.
- 30. Изюмов Ю.А., Малеев С.В. // ЖЭТФ. 1961. Т. 41. Вып. 5 (11). С. 1644.
- Топерверг Б.П. // Матер. XVI школы ЛИЯФ по физике конденсированного состояния. Л.: Изд-во ЛИЯФ АН СССР, 1982. С. 95.

Three-Dimensional Analysis of the Polarization of Scattered Neutrons of the Thermal, Cold and Very Cold Spectrum in Studies of the Magnetic Dynamics of Endometallofullerenes

V. T. Lebedev^{1, *}, A. P. Serebrov^{1, **}

¹Petersburg Nuclear Physics Institute named by Konstantinov of National Research Centre "Kurchatov Institute" (NRC "Kurchatov Institute" – PNPI), Leningradskaya oblast, Orlova roshcha, Gatchina, 188300 Russia *E-mail: lebedev vt@pnpi.nrcki.ru

**E-mail: serebrov ap@pnpi.nrcki.ru

A method for studying the magnetic dynamics of endofullerenes $M@C_{2n}$ (2n = 60, 70, ...) and their derivatives, including fullerenols $M@C_{2n}(OH)_X$ ($X \sim 30$) encapsulating 4*f*-elements inside carbon cages, is proposed. The possibilities of 3D polarimetry of thermal, cold and very cold neutrons for analyzing magnetic modes in metal-organic systems, in particular, in endofullerenes' ensembles, are discussed. It assumes using the spin dependence of coherent and incoherent neutron scattering on the nuclear and magnetic subsystems of the samples. Dipole interactions of such objects are essential in solutions and colloidal systems, where they create molecular aggregates with complex magnetic dynamics, including soft relaxation modes. Studying them with very low energy neutrons is important for understanding the self-organization mechanisms and biomedical applications of endofullerenes.

Keywords: endofullerenes, scattering, polarization, very cold neutrons, dynamics, structure, magnetism.