

1. Волкова Ю.В., Волков А.С., Соловьева Н.С., Физический вестник Института естественных наук и технологий САФУ, 14, 65 (2014).
2. Волкова Ю.В., Волков А.С., Шестаков Л.Н., Сборник тезисов, материалы Двадцать первой Всероссийской научной конференции студентов физиков и молодых ученых (ВНКСФ-21, Омск), 1, 118 (2015).
3. Волкова Ю.В., Волков А.С. Лютоева А.А., Физический вестник Института естественных наук и технологий САФУ, 14, 57 (2015).

## STRUCTURAL CHANGES IN THE COMPOUNDS $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$ AND $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$

Yaroslavzev A.A.<sup>\*</sup>, Neznahin D.S., Alikin D.O.

Ural Federal University, 620000, Yekaterinburg, st. Mira 19

\*E-mail: [yaroslavtcev.a@mail.ru](mailto:yaroslavtcev.a@mail.ru)

$\text{Cu}_{12}\text{V}_4\text{S}_{13}$  (V – As, Sb) the widespread sulfosalts of fahlores group, which are a potential structural material for thermoelectric devices [1]. Compounds of the type  $\text{Cu}_{12}\text{V}_4\text{S}_{13}$  belong to tetrahedrites group, which are characterized high mobility of ions in the crystal lattice [2]. There is fundamental interest to study the mobility of copper ions in the compounds  $\text{Cu}_{12}\text{V}_4\text{S}_{13}$  (V – As, Sb).

The samples  $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$  (analogue of the natural mineral tennantite [3]) and  $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  (analogue of the natural mineral Mgrit [4]) were synthesized by sealed in evacuated quartz tubes in stoichiometric quantities. Additionally, the sample  $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$  was recrystallized by method of the Bridgman – Stockbarger after preliminary sintering in quartz ampoules.

The temperature dependence of magnetic susceptibility (measured on a SQUID magnetometer in the magnetic field of 1, 10, 35, 70 kOe at temperatures ranging from 4 to 350 K) for the sample  $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$  at temperatures below 130 K (for the sample  $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  at temperatures below 90 K) looks like a paramagnetic – antiferromagnetic transition. Spectrums of electron spin resonance for the sample  $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$  have similar changing in compare with EPR spectrums of the sample  $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  [5] at temperatures of structural changes. Thus, there can exist same mechanism of transition. Perhaps the reason for this behavior can be self-diffusion of ions  $\text{Cu}^+$  и  $\text{Cu}^{2+}$ , which are present in the crystal structures. Such kind of mobility appears in  $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$  and  $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  due to the presence of non-stoichiometric distribution of copper ions in the crystal lattice and the high mobility of them [6,7].

The isovalent substitution of As on Sb amends in the basic orbital states in the crystal field symmetry of the cluster  $\text{Cu}_6\text{S}_{13}$  [6]. Consequently, the temperature of structural transformation shifts from  $T \sim 124$  to  $T \sim 84$  K.

1. Skoug, Eric J., Jeffrey D. Cain et al., Journal of electronic materials, 41(6), 1232-1236 (2012).

2. Jonson, N. E., et al., *American Mineralogist*, 73, 389-397 (1988).
3. Bernhardt, J. Wuensch, Z. *Kristallogr.*, 123, 1-20 (1966).
4. Dymkov YU. M., Guseva T. I. et al., *Zapiski VTO*, 2, 215-219 (1982).
5. Di Benedetto F. et al., *Physics and chemistry of minerals* 32(3), 155-164 (2005).
6. Gainov R.R., et al., *Physics and Chemistry of Minerals*, 35, 37-48 (2008).
7. Makovicky E., et al., *The Canadian Mineralogist*, 43, 679-688 (2005).

## МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕТЕКТОРОВ НЕЙТРОНОВ

Купчинский А.В.\*, Купчинская Е.А., Игнатьев О.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [kupchinsky.anton@gmail.com](mailto:kupchinsky.anton@gmail.com)

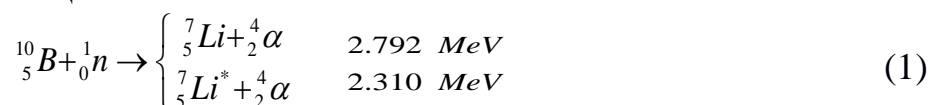
## MODELING AND INVESTIGATION OF NEUTRON DETECTORS

Kupchinsky A.V.\*, Kupchinskaya E.A., Ignatiev O.V.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. Two designs of neutron detector built on the basis of scintillation gamma spectrometer were considered. Their parameters were estimated by modeling in GEANT4 package, and the optimal configuration of the detector was selected.

Имеется гамма-спектрометр, предназначенный для эксплуатации в условиях, в которых необходима также регистрация нейтронов. Чтобы не создавать для этой цели отдельный прибор, было предложено добавить функцию регистрации нейтронов этому гамма-спектрометру путем добавления в его конструкцию бора, обогащенного по десятому изотопу. При этом детектирование нейтронов предполагается путем регистрации гамма-квантов с энергией 482 кэВ, испущенных в результате реакции:



В исходном гамма-спектрометре в качестве сцинтиллятора используется сфера из CsI(Tl) диаметром 44 мм, сбор света с которой осуществляется четырьмя кремниевыми фотоумножителями.

Для оценки эффективности детектора нейтронов было проведено компьютерное моделирование в пакете GEANT4. В ходе моделирования оценивалась эффективность регистрации нейтронов для различных конфигураций детектора.

Первоначально была предложена конфигурация детектора с колодцем, в который помещен бор. Достоинством данной конфигурации является высокая эффективность регистрации гамма-квантов, испущенных бором. При моделировании в широких пределах варьировались глубина и диаметр колодца, но достиг-