

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Б.П.КОНСТАНТИНОВА

XLV Школа ПИЯФ РАН, ГАТЧИНА
Секция Физики
Конденсированного Состояния

ФКС - 2011
14 – 19 марта 2011 г.



Программа,
тезисы
и список участников

Гатчина - 2011

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены программа, аннотации докладов и состав участников секции Физики Конденсированного Состояния (ФКС-11) XLV Школы ПИЯФ РАН, ГАТЧИНА, 14 - 19 марта 2011 г., Рощино, С.-Петербург.

Program, the abstracts of reports and membership of the Condensed State Physics session of XLIV PNPI School (CSP - 2011) are presented.
(14 - 19 of March 2011, Roschino, St. Petersburg).

Проведению Зимней школы оказали поддержку:

**Министерство образования и науки РФ
Петербургский Институт Ядерной Физики РАН
Российский Фонд Фундаментальных Исследований
Фонд некоммерческих программ "ДИНАСТИЯ"
Научная программа СПбНЦ РАН
Российская Академия Наук**

Сборник подготовили А.И.Окороков и А.В. Чумакова

Примечание: Программа составлена по информации на 04.03.10, и в ней возможны изменения по факту присутствия лекторов на Школе.
Тезисы напечатаны без какой-либо редакции издательством. Орфография авторов сохранена.

© ПИЯФ РАН, ГАТЧИНА, 2011

Оглавление

ОГЛАВЛЕНИЕ.....	3
ПРОГРАММА	4
ЛЕКЦИИ	7
СЕМИНАРЫ	20
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	25
Секция «Квантовые явления».....	25
Секция «Фазовые переходы».....	30
Секция «Методы рассеяния»	48
Секция «Нанотехнологии»	65
ПОСТЕРНЫЕ ДОКЛАДЫ	91
СПИСОК УЧАСТНИКОВ ШКОЛЫ	134

ПРОГРАММА

14 Марта (понедельник)

12.00-13.30	Заезд, регистрация
13.30-15.00	Обед
15.00-17.00	Нейтрон в гравитационном поле Земли <i>В. Несвижевский (ILL, Франция)</i>
17.00-17.15	Кофе
17.15-18.15	Кондовские аномалии в эксперименте <i>А.Ю. Румянцев (РНЦ КИ, Россия)</i>
18.15-20.00	Ужин
20.00-22.00	Фуршет

15 Марта (вторник)

Синхротрон

08.30-09.00	Завтрак
09.00-11.00	Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом <i>А. Рогалев (ESRF, Франция)</i>
11.00-11.15	Кофе
11.15-13.15	Резонансное рассеяние синхротронного излучения <i>В. Е. Дмитриенко (ИК РАН, Москва)</i>
13.15-15.00	Обед
15.00-16.00	Макромолекулярная кристаллография с синхротронным излучением <i>А. Попов (ESRF, Франция)</i>
16.00-17.00	Экспериментальные исследования волн зарядовой плотности <i>Д. Иносов (MPI, Германия)</i>
17.00-17.15	Кофе
17.15-19.00	Стендовая сессия
19.00-20.00	Ужин

16 Марта (среда)

Фазовые переходы

08.30-09.00	Завтрак
09.00-11.00	Феноменологическая теория фазовых переходов <i>В. Дмитриев (ESRF, Франция)</i>
11.00-11.15	Кофе
11.15-13.15	Скейлинг в физике фазовых переходов второго рода

С.В. Малеев (ПИЯФ РАН, Гатчина)

- 13.15-15.00 Обед
15.00-17.00 **Ренормгруппа в теории фазовых переходов**
А. И. Соколов (СПбГЭТУ "ЛЭТИ", СПб)
17.00-17.15 Кофе
17.15-19.00 **Семинары**
18.45-20.00 Ужин

17 Марта (четверг)

Квантовые явления

- 08.30-09.00 Завтрак
09.00-11.00 **Низкотемпературная сверхпроводимость**
Д. Аристов (ПИЯФ РАН, Гатчина)
11.00-11.15 Кофе
11.15-13.15 **Взаимодействие Дзялошинского- Мория**
А. Москвин (УрГУ, Екатеринбург)
13.15-15.00 Обед
15.00-16.00 **Magnetic monopoles in frustrated pyrochlores**
А. Гукасов (LLB, Франция)
16.00-17.00 **Inelastic neutron scattering studies of magnetic dynamics in pnictide superconductors**
А. Иванов (ILL, Франция)
17.00-17.15 Кофе
17.15-19.15 **Семинары**
19.00-20.00 Ужин
20.00-23.00 Фуршет

18 Марта (пятница)

Физика и технология наночастиц;

Рефлектометрия и малоугловое рассеяние

- 08.30-09.00 Завтрак
09.00-11.00 **Коллоидные кристаллы методом SAXS**
А.В. Петухов (UU, Нидерланды)
11.00-11.15 Кофе
11.15-13.15 **Электромагнитные свойства метаматериалов**
М.В. Горкунов (ИК РАН, Москва)
13.15-15.00 Обед

Нейтронная и рентгеновская дифракция:

методические аспекты

- 15.00-16.00 **Методика RTOF дифракции нейтронов для спектрометров**

высокого разрешения

В.А. Кудряшов (ПИЯФ РАН, Гатчина)

16.00-17.00 **Модуляционная дифракция**

Д.Ю. Чернышов (ESRF, Франция)

17.00-17.15 Кофе

17.15-18.15 **Использование спин-эха для кодирования переданного импульса при рассеянии нейтронов в скользящей геометрии**

А. Воробьев (ESRF, Франция)

17.15-18.15 Закрытие

19.00-20.00 Ужин

19 Марта (суббота)

09.00-10.00 Завтрак

10.00-12.00 Отъезд

Возможны изменения в программе.

Информация будет представлена на информационной стойке.

ЛЕКЦИИ

Нейтрон в гравитационном поле Земли

В.В. Несвижевский, коллаборация GRANIT

Институт Лауэ-Ланжевэна, 6 rue Jules Horowitz, Grenoble, France, 38042;

Недавно были обнаружены два родственные физические явления: квантовые состояния ультрахолодных нейтронов [1-5] в гравитационном поле Земли над плоским зеркалом [6-10] и квантовые состояния холодных нейтронов в эффективном центробежном потенциале вблизи поверхности вогнутого зеркала [11-13]. Их объединяют использованные экспериментальные методы и математическое описание, а также применения в физике частиц, квантовой оптике, физике поверхности [14-25]. Любопытно, что измерение этих двух явлений – первая прямая демонстрация слабого принципа эквивалентности для массивной частицы в квантовом состоянии.

Будет представлена природа этих явлений, медоты их наблюдения и изучения, некоторые экспериментальные результаты, применения в различных областях физики, а также текущее состояние и перспективы этих исследований.

1. Я.Б. Зельдович, *ЖЭТФ* **36**, 1952 (1959).
2. В.И. Лушиков и др., *Письма в ЖЭТФ* **9**, 40 (1969).
3. А. Steyerl, *Phys. Lett. B* **29**, 33 (1969).
4. В.К. Игнатович, *Физика Ультрахолодных Нейтронов* (Москва, Наука, 1986).
5. R. Golub, D.J. Richardson, S.K. Lamoreaux, *Ultra-Cold Neutrons* (Bristol, Higler, 1991).
6. V.I. Luschikov, *Phys. Today* **30**, 42 (1977).
7. В.И. Лушиков, А.И. Франк, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 607 (1978).
8. V.V. Nesvizhevsky et al, *Nature* **415**, 297 (2002).
9. V.V. Nesvizhevsky et al, *Phys. Rev. D* **67**, 102002 (2003).
10. V.V. Nesvizhevsky et al, *Eur. Phys. J. C* **40**, 479 (2005).
11. V.V. Nesvizhevsky et al, *Phys. Rev. A* **78**, 033616 (2008).
12. V.V. Nesvizhevsky et al, *Nature Phys.* **6**, 114 (2010).
13. V.V. Nesvizhevsky et al, *New J. Phys.* **12**, 113050 (2010).
14. В.И. Коган, В.М. Галицкий, *Сборник Задач по Квантовой Механике* (Москва, Гостехиздат, 1956).
15. D ter Haar, *Selected Problems in Quantum Mechanics* (New York, Academic Press, 1964).
16. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая Механика. Нерелятивистская Теория* (Москва, Наука, 1964).
17. P.W. Langhoff, *Amer. J. Phys.* **39**, 954 (1971).
18. З. Флюгге, *Задачи по Квантовой Механике. т1* (Москва, Мир, 1974).
19. R.L. Gibbs, *Amer. J. Phys.* **43**, 25 (1975).
20. J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Menlo Park/ Calif., Benjamin/Cummings, 1985).
21. O. Bertolami, F.M. Nunes, *Class. Quant. Gravity* **20**, L61 (2003).
22. S. Baessler et al, *Phys. Rev. D* **75**, 075006 (2007).
23. V.V. Nesvizhevsky et al, *Phys. Rev. D* **77**, 034020 (2008).
24. S. Baessler, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **36**, 104005 (2009).
25. В. Несвижевский, *Успехи Физ. Наук* **180**, 673 (2010).

Резонансное рассеяние синхротронного излучения

В. Е. Дмитриенко¹, Е. Н. Овчинникова², В. П. Орешко²

¹ *Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН, Москва*

² *Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва*

Резонансное рассеяние рентгеновского излучения происходит при энергиях близких к краю поглощения атомов кристалла. В этом случае амплитуда рентгеновского рассеяния сильно зависит как от энергии фотона, так и от физического состояния резонансных атомов (их кристаллического окружения, электронных свойств, магнитного упорядочения, тепловых колебаний и т.п.). Появляется также нетривиальная зависимость от поляризации фотонов, которая приводит, в частности, к возможности наблюдения «запрещенных» брэгговских рефлексов в дифракции, которые отсутствуют вдали от резонансной области (см. недавние обзоры в [1-3]). Все эти явления в рассеянии и дифракции наиболее существенны в интервале энергий около 10-30 эВ вблизи края, что соответствует области поглощения XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure). Поэтому для их наблюдения необходимо использование синхротронного излучения и поляризационной рентгеновской техники (поляризаторов и анализаторов, четвертьволновых пластинок).

В докладе представлены наиболее яркие примеры исследований, использующих резонансную дифракцию синхротронного излучения не только для структурных, но больше для физических исследований свойств кристаллов. 1) Вначале обсуждаются простые результаты, получающиеся в диполь-дипольном приближении в теории рассеяния. Эти исследования ведутся уже около тридцати лет с использованием различных кристаллов для К-, L- и M-краев поглощения. 2) Затем будет рассмотрено магнитное рассеяние рентгеновских лучей, резонансное и нерезонансное, ставшее в последние годы рабочим методом исследования магнетиков [4,5], конкурирующим с дифракцией нейтронов. Сравнительный анализ этих методов показывает преимущества, недостатки и наиболее интересные возможности для их применений. 3) Тепловые движения атомов постоянно меняют симметрию атомного окружения и вызывают появление дополнительной переменной анизотропии рентгеновской амплитуды рассеяния. Для количественного описания соответствующих эффектов требуются расчеты мгновенных атомных конфигураций (например, в рамках молекулярной динамики), а уже на их основе рассчитываются и усредняются амплитуды рассеяния. 4) В некоторых случаях резонансная дифракция является уникальным методом изучения диполь-квадрупольного и квадруполь-квадрупольного вкладов [3,6], в частности, киральности. 5) Интерференция магнитных и немагнитных вкладов в резонансное рассеяние позволяет измерить знак взаимодействия Дзялошинского-Мория в магнетиках [7].

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 10-02-00768 и Программой фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

1. J. L. Hodeau, V. Favre-Nicolin, S. Bos et al., *Chem. Rev.* **101**, 1834 (2001).
2. В. Е. Дмитриенко, Е. Н. Овчинникова, *Кристаллография* **48**, Suppl., S59 (2003).
3. V. E. Dmitrienko, K. Ishida, A. Kirfel, and E. N. Ovchinnikova, *Acta Cryst. A* **61**, 481 (2005).
4. S.W. Lovesey and S. P. Collins. *X-ray Scattering and Absorption by Magnetic Materials*, (Oxford Series on Synchrotron Radiation), Clarendon Press, Oxford, 1996 (есть в Интернете).
5. A. Rogalev, J. Goulon, C. Goulon-Ginet, C. Malgrange, in *Magnetism and Synchrotron Radiation* (Springer Lecture Notes in Physics vol 565), ed. Beaupaire E. et al. Berlin: Springer, 2001. P. 60.
6. J. Goulon, N. Jaouen et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 156201 (2007).
7. V.E. Dmitrienko, E.N.Ovchinnikova, J. Kokubun, K. Ishida, *Письма в ЖЭТФ*, **92**, 424 (2010).

Макромолекулярная кристаллография с синхротронным излучением

А. Попов

ESEF, Grenoble

Информация о трехмерной структуре макромолекул (белки, нуклеиновые кислоты, вирусы) имеет ключевое значение как для понимания фундаментальных биологических процессов, так и для создания новых лекарственных препаратов. Высокая яркость и малая расходимость пучка синхронного излучения, возможность произвольной выборки длины волны излучения позволяют измерять дифракцию от слаборассеивающих биологических молекул и использовать эффекты аномального рассеивания для решения фазовой проблемы. В лекции будет представлен краткий обзор последних разработок аппаратуры и методов рентгеноструктурного анализа биологических макромолекул и приведены примеры конкретных структурных исследований.

Экспериментальные исследования волн зарядовой плотности

Д. С. Иносов

Институт физики твёрдого тела имени Макса Планка (MPI-FKF), Штутгарт, Германия

Низкотемпературные свойства металлических соединений во многом определяются геометрией поверхности Ферми (ПФ), разделяющей занятые электронные состояния зоны проводимости от свободных. Наличие в ПФ параллельных участков, особенно характерное для систем с пониженной размерностью, способно привести к ряду низкотемпературных неустойчивостей электронной подсистемы, сопровождающихся образованием магнитной или зарядовой сверхструктуры и соответствующим понижением трансляционной и/или осевой симметрии кристаллической решётки. Как правило, формирование волн зарядовой (ВЗП) или спиновой (ВСП) плотности происходит именно благодаря такого рода неустойчивостям, впервые рассмотренным Р. Пайерлсом для случая одномерных систем [1] и носящим его имя.

Понижение трансляционной симметрии прямого пространства приводит к уменьшению объёма зоны Бриллюэна и открытию зарядовой щели на границах зоны. Последствия такого перехода сильно разнятся в зависимости от размерности ПФ. В квазиодномерных системах это зачастую приводит к переходу металл-диэлектрик, в то время как квази-двумерные системы, как правило, остаются металлами и ниже перехода, но испытывают реконструкцию ПФ и изменение её топологии [2]. Такие изменения находят отражение в температурных зависимостях проводимости и коэффициента Холла.

Наибольший интерес представляют собой эксперименты, позволяющие напрямую наблюдать образование волн зарядовой или спиновой плотности, которые можно условно разделить на две основные категории. Первая из них включает в себя фотоэлектронную спектроскопию с угловым разрешением, позволяющую визуализировать процесс открытия щели на границах зоны Бриллюэна и топологический переход в геометрии ПФ не только как функцию квазиимпульса, но и как функцию времени, тем самым отделяя быстрый отклик электронной подсистемы от гораздо более медленной релаксации кристаллической решётки. Вторая категория экспериментов обнаруживает формирование сверхструктуры дифракционными методами, такими как нейтронное рассеяние или рентгеновская дифракция. Детальное понимание физики формирования ВЗП и ВСП стало возможным лишь благодаря сопоставлению обоих типов экспериментов и сравнению их с косвенными наблюдениями.

Определённую сложность представляют собой эффекты, связанные с флуктуациями параметра порядка ВЗП в нормальном состоянии. Согласно недавним экспериментам, в квазидвумерных системах с несоизмеримыми ВЗП такие флуктуации могут приводить к плавной температурной зависимости эффективной ПФ даже вдали от фазового перехода, наблюдаемой как с помощью фотоэлектронной спектроскопии, так и с помощью дифракционных методов. В настоящий момент всё ещё не существует самосогласованной теории, позволяющей количественно учесть такие динамические эффекты и оценить их обратное влияние на формирование статической ВСП.

1. Р. Пайерлс, *Квантовая теория твёрдых тел*, пер. с англ., М., 1956, гл. 5, § 3.

2. S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, A. N. Yaresko, V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, R. Schuster, B. Büchner, R. Weber, R. Follath, L. Patthey, and H. Berger, *Pseudogap and Charge Density Waves in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **100**, 196402 (2008).

3. D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, V. B. Zabolotnyy, A. A. Kordyuk, B. Büchner, R. Follath, H. Berger, and S. V. Borisenko, *Temperature-dependent Fermi surface of 2H-TaSe₂ driven by competing density wave order fluctuations*, Phys. Rev. B **79**, 125112 (2009).

Феноменологическая теория фазовых переходов

В. П. Дмитриев

SNBL at ESRF, Grenoble, France

Феноменологический подход в описании структурных фазовых переходов неизменно ассоциируется с теорией Ландау *фазовых переходов второго рода*. Действительно, именно в работах Л.Д.Ландау^[1], рассматривавших только переходы второго рода, были сформулированы основные понятия и принципы, как оказалось, более общего феноменологического метода анализа фазовых переходов, которые позволили позже построить полную теорию явления, включающую и переходы первого рода. Демонстрация применимости феноменологического подхода для описания широкого спектра фазовых переходов, включающего реконструктивные превращения – первая цель настоящей лекции.

Вторая цель – продемонстрировать основные математические методы, используемые в *современной* феноменологической теории. Общая процедура анализа фазовых переходов в теории Ландау разделена на два этапа :

- решение «угловой задачи» устанавливает симметрию и физическую реализацию параметра порядка, классифицирует по симметрии все решения уравнений состояния, перечисляя таким образом *устойчивые фазы* кристалла, и определяет их пространственную группу;
- «радиальная задача» теории включает вычисление границ устойчивости фаз и линий переходов между ними, то есть построение фазовых диаграмм системы, а также описание поведения различных физических параметров при фазовых переходах.

Показано, что «угловая задача» является полностью безмодельной - ответы её базируются лишь на симметрии системы и соответствующего параметра порядка. Решения «радиальной задачи», в частности, топология фазовых диаграмм, в существенной степени контролируются точными математическими методами.

Примеры конкретных фазовых переходов использованы в лекции как для демонстрации основных этапов и приемов анализа превращений, так и для последующих обобщений феноменологического метода.

1. Ландау Л.Д. ЖЭТФ, 7, 19 (1937); ЖЭТФ, 7, 627 (1937)

Скейлинг в физике фазовых переходов второго рода

Малеев С.В.

ПИЯФ РАН, Гатчина

Впервой части Лекции выясняются причины, почему теория Ландау недостаточна для описания фазовых переходов второго рода. Затем формулируется феноменологическая теория скейлинга и вводится понятие критических индексов и соотношения между ними. В заключение рассматривается явление кроссовера (смены режима скейлинга) при приближении к точке перехода, позволяющее правильно учесть симметрию проблемы.

Ренормализационная группа в теории фазовых переходов

А. И. Соколов^{1, 2}

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

² Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет

Цель лекции – рассказать о том, как метод ренормализационной группы (РГ), первоначально развитый и широко используемый в квантовой теории поля, применяется в современной теории фазовых переходов. Конкретно, речь идет о поведении вещества в окрестности фазовых переходов второго рода. При подходе к точке Кюри тепловые флуктуации параметра порядка становятся аномально сильными, и приближение самосогласованного поля, эквивалентное вблизи T_C феноменологической теории Ландау, теряет работоспособность. Для описания термодинамики и динамики в критической области приходится употреблять значительно более сложные и мощные математические инструменты, такие как высокотемпературные и низкотемпературные разложения, метод Монте-Карло и другие. Лидирующее место среди них занимает метод теоретико-полевой ренормализационной группы. Этот метод дает ясную физическую картину критического поведения, применим к широкому кругу систем с нетривиальной симметрией и позволяет вычислять критические индексы, эффективные константы связи и прочие универсальные характеристики с рекордно высокой точностью.

Естественной отправной точкой для полевой формулировки задачи о фазовом переходе является модель структурного перехода в ангармоническом кристалле. В лекции строится термодинамическая теория возмущений для этой модели и находятся первые флуктуационные поправки, которые неограниченно растут при $T \rightarrow T_C$. Преодолеть эту трудность, т. е. пройти в критическую область можно, если перестроить ряды теории возмущений. Для этого надо взять в качестве параметра разложения не затравочную, а одетую, эффективную константу связи γ ; она, как оказывается, сама стремится к нулю при $T \rightarrow T_C$ и тем самым компенсирует расходимость соответствующих интегралов. Эта процедура (процедура перенормировки), которую можно объяснить на элементарном уровне [1,2], позволяет получить замкнутое уравнение для γ – уравнение РГ. Решая его, можно найти асимптотику γ , т. е. вильсоновскую фиксированную точку и понять природу универсальности критического поведения.

Вторая часть лекции посвящена современному состоянию ренормгрупповой теории критических явлений. Здесь приводятся результаты многопетлевых РГ расчетов для трехмерных скалярной и $O(n)$ -симметричной моделей (моделей Изинга и Гейзенберга) [3,4], а также для некоторых анизотропных систем. Обсуждается характер РГ разложений, структура коэффициентов высоких порядков и методы суммирования расходящихся рядов, позволяющие получать высокоточные численные оценки (см., например, [5,6]). Сопоставляются результаты, даваемые двумя наиболее эффективными вариантами ренормгрупповой теории возмущений – g -разложением в трех измерениях и ε -разложением. Проводится сравнение предсказаний теории с наиболее точными данными машинных и натуральных экспериментов, в частности тех, которые были выполнены в космосе [7].

1. А. И. Соколов. Соросовский образовательный журнал, **6** (2000) №12, 98.

2. Г. А. Смоленский и др., Физика сегнетоэлектрических явлений. “Наука”, 1985, гл 6, сс. 182-189.

3. G. A. Baker, B. G. Nickel, D. I. Meiron, Phys. Rev B **17** (1978) 1365.

4. S. A. Antonenko, A. I. Sokolov, Phys. Rev. E **51** (1995) 1894.

5. R. Guida, J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31** (1998) 8103.

6. A. Pelissetto, E. Vicari, Phys. Reports **368** (2002) 549.

7. J. Lipa et al., Phys. Rev. B **68** (2003) 174518; Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 4894; Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 944.

Взаимодействие Дзялошинского-Мория

А. С. Москвин¹

¹ *Уральский государственный университет им. А.М. Горького, Екатеринбург*

Обменно-релятивистское взаимодействие Дзялошинского-Мория, или антисимметричный обмен, является результатом совместного действия изотропного спинового обмена и спин-орбитального взаимодействия. В докладе дан краткий обзор микроскопической теории антисимметричного обмена в различных парах обменносвязанных ионов группы железа и редких земель. Особое внимание уделяется вопросу знака вектора Дзялошинского и его связи с геометрией сверхобмена. Рассмотрен специфический электронно-ядерный аналог взаимодействия Дзялошинского-Мория. Широко представлены проявления антисимметричного обмена – слабый ферро-, антиферро-, и ферримагнетизм в различных соединениях группы железа, в частности, ортоферритах, ортохромитах, ортоманганитах, купратах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ.

Магнитные монополи в решетке пирохлора

Арсен Гукасов

Лаборатория Леона Бриллюена, Сакле, Франция

Во всех магнитах существующих в природе их положительный и отрицательный полюса неразделимы. Несмотря на то что изолированных магнитных представляется возможной с теоретической точки зрения их существование до настоящего времени остается недоказанным несмотря на многочисленные эксперименты по их поиску. В этом магнитные заряды (монополь и антимониполь) отличаются от своих электрических аналогов. Недавно появилось сообщение что в кристаллах со структурой пирохлора можно наблюдать квазичастицы, которые могут быть описаны уравнениями Максвелла для магнитных монополей. Существование этих квазичастиц было подтверждено в различных косвенных и прямых экспериментах. В докладе будет представлен обзор этих работ.

Электромагнитные свойства метаматериалов

М.В. Горкунов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

Искусственные упорядоченные регулярные структуры с периодом меньшим и много меньшим длин волн электромагнитного излучения – *метаматериалы* – активно исследуются в последние годы. Малость структурного периода по сравнению с длиной волны исключает дифракцию, и метаматериалы выступают в роли эффективно однородных сред с необычными, а подчас и неожиданными электромагнитными свойствами. Последние обещают широкий спектр принципиально новых приложений в различных областях: от радарных/антирадарных технологий СВЧ диапазона до оптической диагностики нанообъектов.

Как правило, метаматериалы состоят из металлических элементов, что объясняется большой силой взаимодействия электромагнитных волн с частицами металла. В отличие от традиционных материалов, в метаматериалах химический состав оказывается второстепенным, а форма и размер элементов мета-структуры имеют определяющее значение. Схожие по составу, но по разному структурированные метаматериалы на основе благородных металлов демонстрируют и спектральные аномалии пропускания света [1], и отрицательный коэффициент преломления [2], и гигантское оптическое вращение [3].

Важной общей чертой метаматериалов является возможность точного проектирования их свойств за счёт выбора типа и оптимальных параметров мета-структуры. В то же время, существуют и способы наделять метаматериалы возможностью перестройки свойств за счёт небольших деформаций [4] или добавления нелинейных элементов [5] и переключаемых компонентов (жидких кристаллов) [6].

Ключевое значение для метаматериалов имеют так называемые эффекты ближнего поля, определяемые распределением электромагнитных полей в ближайшей окрестности мета-атомов. Их понимание требует знание решений полных уравнений Максвелла с выполнением векторных условий сшивки на границах раздела сложной формы. Нахождение таких решений возможно и прямым численным моделированием, но подобные результаты зачастую неспособны прояснить физические механизмы и роль тех или иных процессов. К счастью, в ряде важных случаев удается построить полуаналитические модели, адекватно объясняющие экспериментально наблюдаемые явления.

В докладе подробно рассмотрены:

3D метаматериал из кольцевых резонаторов

- формирование магнитного отклика
- перестройка резонанса при небольшой сдвиговой деформации
- нелинейные явления и перестройка за счёт полупроводниковых включений

2D наноструктуры благородных металлов

- природа аномального пропускания света
- проектирование аномалий пропускания и оптимизация геометрических параметров
- переключение режимов пропускания за счёт жидкокристаллических включений

Автор благодарен Программе ОФН РАН «Физика новых материалов и структур» за поддержку.

1. T.W. Ebbesen, H.J. Lezec, H.F. Ghaemi, T. Thio, P.A. Wolff, Nature 391, 667 (1998).
2. A.N. Grigorenko et al., Nature 438, 335 (2005).
3. E. Plum, V.A. Fedotov, A.S. Schwanecke, N.I. Zheludev, Y. Chen, Appl. Phys. Lett. 90 223113 (2007).
4. M. Lapine, D. Powell, M. Gorkunov, I. Shadrivov, and Yu. Kivshar, Appl. Phys. Lett. 95, 084105 (2009).
5. M. Gorkunov and M. Lapine, Phys. Rev. B 70, 235109 (2004).
6. M. Gorkunov and M. Osipov, J. Appl. Phys. 103, 036101 (2008).

RTOF-метод в нейтронных дифрактометрах высокого разрешения

В.А. Кудряшев

ПИЯФ РАН, Гатчина

Излагается принцип работы RTOF-метода в нейтронных дифрактометрах, приводятся основные соотношения для функции разрешения по времени пролета в RTOF-методе. Поясняются параметры, от которых зависит ширина функции разрешения, и возможность получения высокого разрешения дифрактометра при сравнительно коротких пролетных базах. Приводятся основные нейтронно-физические характеристики двух RTOF-дифрактометров, работающих на импульсном реакторе ИБР-2М ОИЯИ, Дубна. Приводятся соотношения для относительной ошибки в RTOF-спектрах для реактора непрерывного действия и для длинно-импульсного нейтронного источника. Приводятся основные достоинства и недостатки RTOF-метода по сравнению с классическим TOF-методом.

Модуляционная дифракция

Дмитрий Чернышов

Swiss-Norwegian Beam Lines at European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

Рассматривается случай кинематической дифракции на кристалле подвергнутом периодическому внешнему воздействию. При выполнении ряда условий, подробно обсуждаемых в лекции, можно получить доступ к частичным дифракционным вкладам в регистрируемую интенсивность обычно неразличимым в силу интерференции. Представляются теория, симуляционные расчеты и первые экспериментальные данные нового модуляционного метода дифракции.

Спин-эхо кодирование переданного импульса при рассеянии нейтронов в скользящей геометрии

А. А. Воробьев

European Synchrotron Radiation Facility, Гренобль, Франция

В докладе представлены методика и описание экспериментальной установки [1] для спин-эхо кодирования переданного импульса при рассеянии нейтронов в скользящей геометрии (*spin-echo resolved grazing incidence scattering, SERGIS*). Данная техника использует спин нейтрона для кодирования одной из компонент переданного импульса при рассеянии нейтронного пучка, падающего на плоскость образца под малым углом. При этом вместо угла рассеяния измеряется деполяризация пучка. Это позволяет достигнуть хорошее разрешение по переданному импульсу без коллимирования пучка в соответствующем направлении. SERGIS поэтому представляет собой альтернативу или важное дополнение к более распространенному методу малоуглового рассеяния нейтронов в скользящей геометрии (*grazing incidence small-angle neutron scattering, GISANS*). Метод может успешно применяться для изучения структуры псевдо-двумерных объектов с характерными мезоскопическими размерами от десяти до нескольких сотен нанометров, расположенных на открытых плоских поверхностях или на скрытых интерфейсах.

В наглядной форме представлены принципы спин-эхо кодирования переданного импульса, изложена специфика техники в случае скользящей геометрии, предложены подходы для обработки данных и приведены экспериментальные результаты по исследованию различных сверхтонких полимерных систем на поверхности кремния [2]

1. J. Major, A.Vorobiev, A. Rühm, R. Maier, M. Major, M. Mezger, M. Nülle, H. Dosch, G.P. Felcher, P. Falus, T. Keller, R. Pynn, *A spin-echo resolved grazing incidence scattering setup for the neutron interrogation of buried nanostructures*, Rev. Sci. Instrum. 2009, **80**, 123903.
2. A. Vorobiev, J. Major, H. Dosch, P. Müller-Buschbaum, P. Falus, G.P.Felcher, and S.G.E. te Velthuis, *Phase and microphase separation of polymer thin films dewetted from silicon - a spin-echo resolved grazing incidence neutron scattering study*, to be published in Journal of Physical Chemistry.

СЕМИНАРЫ

16 марта

Функциональные наноматериалы на основе диоксида церия: механизмы формирования, структура, свойства

В. К. Иванов¹, А. Е. Баранчиков¹, О. С. Иванова¹, Г. П. Копица²

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*

² *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН*

Значительный интерес, проявляемый в последнее десятилетие к изучению диоксида церия, обусловлен тем, что при переходе в нанокристаллическое состояние это соединение изменяет физико-химические свойства, причем характер этих изменений достаточно необычен. Необходимо подчеркнуть, что приводимые в литературе сведения о структуре и свойствах нанодисперсного CeO_{2-x} зачастую противоречат друг другу; более того, многие свойства, присущие нанокристаллическому CeO_{2-x} , до настоящего времени остаются практически неизученными.

Цель настоящей работы заключалась в исследовании механизмов формирования и роста наночастиц диоксида церия и анализе влияния структуры и размерного фактора на физико-химические свойства нанодисперсного диоксида церия.

Определены основные закономерности формирования нанокристаллического диоксида церия при синтезе методами быстрого и гомогенного осаждения (в том числе в гидротермальных и гидротермально-микроволновых условиях) из водных и водно-спиртовых растворов солей Ce(III) и Ce(IV) . Установлено, что изменение состава и концентрации исходных растворов солей позволяет целенаправленно варьировать размеры (в пределах от 1.8 до 50 нм) и характер агрегации наночастиц CeO_{2-x} . Методом гомогенного гидролиза впервые получены ультратонкие пластины диоксида церия субнанометровой толщины. Показана применимость метода гомогенного гидролиза для получения наночастиц диоксида церия, допированного РЗЭ (Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Er, Yb).

Выполнены систематические исследования динамики роста наночастиц диоксида церия в гидротермальных и гидротермально-микроволновых условиях в нейтральной и сильнощелочных средах в широком диапазоне температур (до 210°C), а также при высокотемпературном (до 700°C) отжиге. Установлено, что рост частиц CeO_{2-x} осуществляется преимущественно по механизму ориентированного присоединения кристаллитов. Предложены методы гидротермального получения слабоагрегированных квазиодномерных наностержней и изотропных наночастиц CeO_{2-x} контролируемого размера. Разработаны методы получения агрегативно-устойчивых коллоидных растворов наночастиц диоксида церия контролируемого размера в полярных и неполярных средах.

Впервые проанализировано влияние размерного эффекта на ряд физико-химических свойств нанокристаллического диоксида церия. Экспериментально уточнена зависимость параметра элементарной ячейки CeO_{2-x} от размера частиц. Определен критический размер частиц CeO_{2-x} (1.1–1.3 нм), при котором происходит полное восстановление Ce(IV) до Ce(III) . Показано наличие размерного эффекта в реакции глубокого окисления CO на диоксиде церия. Впервые установлено влияние размерного фактора на электрохимические характеристики нанодисперсного диоксида церия. Впервые продемонстрирована

зависимость биологической активности CeO_{2-x} от размера наночастиц. Продемонстрирована высокая антиоксидантная активность золь нанокристаллического диоксида церия, а также его способности инактивировать свободные радикалы, резко возрастающая с уменьшением размеров частиц CeO_{2-x} .

1. Иванов В.К., Щербаков А.Б., Усатенко А.В. // Успехи химии. 2009. Т.78. №9. С. 924-941.
2. A. E. Baranchikov, O. S. Polezhaeva, V. K. Ivanov, et al. // CrystEngComm. 2010. V. 12. P. 3531–3533.
3. N.M. Zholobak, V.K. Ivanov, A.B. Shcherbakov, et al. // J. Photochem. Photobiol. B. 2011. V. 102. P. 32–38.

К.С. Напольский (Факультет наук о материалах МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва)

К.Жерненко (Ruhr University Bochum, Bochum)

17 марта

Технические и методологические аспекты неупругого рассеяния рентгеновского излучения на фонах

А. А. Босак

European Synchrotron Radiation Facility

На семинаре будут представлены пути планирования и оптимизации эксперимента по неупругому рассеянию рентгеновского излучения на опыте линии ID28 ESRF. Рассматривается техническая реализация метода в сравнении с нейтронной спектроскопией; на реальных примерах будут продемонстрированы методы повышения информативности, связанные с применением теоретических расчетов.

Современные позиционно-чувствительные детекторы нейтронов

Д.С. Ильин

Петербургский институт ядерной физики РАН

В обзоре рассматриваются принципы регистрации нейтронов и детекторы, применяемые в технике современного эксперимента. Основной акцент сделан на позиционно-чувствительные детекторы (ПЧД) как счетного, так и интегрального типа, предназначенных для регистрации нейтронов теплового диапазона энергий. Выделяются базовые классы ПЧД: газоразрядные детекторы, сцинтилляционные детекторы и полупроводниковые детекторы.

По причине многообразия экспериментальных задач, решаемых на современных исследовательских установках, характеристики детекторов даже одного класса ПЧД могут существенно отличаться. Однако ни один класс ПЧД не имеет одновременно высокую эффективность регистрации, высокое пространственное разрешение, высокое временное разрешение, низкую чувствительность к гамма-излучению, большой размер чувствительной области и низкую стоимость. Поэтому, при выборе типа и конструкции детектора для данной установки исследователь зачастую вынужден искать компромиссное решение, т.е. выделять приоритетную характеристику ПЧД в убыток остальным.

С другой стороны, в настоящее время активно развиваются гибридные детекторы. В этих приборах применяются методы регистрации, методы съема информации и конверторы нейтронов, нетрадиционные для одного класса ПЧД. Такой подход дает гибкость при разработке детектора и возможность сочетать выгодные характеристики разных классов ПЧД.

Переходы в трехмерных магнетиках с дополнительными нарушенными симметриями

А.О. Сорокин, А.В. Сыромятников

Петербургский институт ядерной физики РАН

В теории фазовых переходов симметрия играет решающую роль, определяя универсальные свойства систем вблизи критической точки. Пространством параметра порядка является нарушаемая при переходе подгруппа симметрии системы. В магнитных системах это пространство имеет вид $S_1 \otimes O(N)/O(N-P)$, где S_1 – нарушаемая подгруппа симметрии решетки, а $O(N)$ – группа вращений N -компонентного вектора. Например, для изотропного ферромагнетика пространством параметра порядка является $O(3)/O(2)$ – двумерная сфера, описывающая множество возможных направлений намагниченности.

В настоящей работе предложены и исследованы методом Монте-Карло две системы классических антиферромагнетиков как гейзенберговских ($N=3$), с полностью нарушенной $O(3)$ симметрией, так и XY ($N=2$) магнетиков, с нарушенной $Z_2 \otimes O(2)$ симметрией, в трех измерениях [1]. Такие сценарии нарушения симметрии могут реализовываться в реальных магнитных материалах. Первая система – модель на простой кубической решетке, в которой учитываются обмены первых трех порядков дальности в слоях и только первого порядка между слоями. Вторая – модель на слоисто-треугольной решетке, с учетом обменов между слоями первых двух порядков дальности.

В случае $N=3$ для обеих моделей обнаружен переход первого рода с возможным слабым псевдо-скейлинговым поведением. Это согласуется с результатом других авторов для т.н. $O(3)$ -модели Штифеля, принадлежащей тому же классу [2, 3].

В $N=2$ случае наблюдался ярко выраженный переход первого рода. Системы этого класса ранее не исследовались.

1. А.О. Сорокин, А.В. Сыромятников, сообщение-2854, ПИЯФ, Гатчина (2010); направлено в ЖЭТФ.
2. H. Kunz, G. Zumbach, J. Phys. A **26** (1993) 3121.
3. D. Loison, Eur. Phys. J. B **15** (2000) 517.

Свойства магнетиков с сильной одноионной анизотропией «лёгкая плоскость»

А. В. Сизанов, А. В. Сыромятников

Петербургский институт ядерной физики РАН

Мы предлагаем новое представление для спиновых операторов, удобное для описания систем с основным состоянием, близким к состоянию с $S_z=0$ на всех узлах решётки. С помощью этого представления рассмотрены спиновые системы с целым спином, с обменным взаимодействием и одноионной анизотропией типа “лёгкая плоскость”, большой по сравнению с обменом ($D/J \gg 1$). Для этих систем вычислен спектр низколежащих возбуждений в третьем порядке по J/D для $S=1$ и втором для $S > 1$. Теоретический расчёт хорошо согласуется с предыдущими результатами для одномерных систем такого типа и численными экспериментами для двумерной решётки. А также успешно описывает соединение $\text{NiCl}_2\text{-}4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$, известное как DTN. Предложен вид взаимодействия спинов в этом соединении. Фитирован нейтронный спектр в нулевом поле, а также ЭПР-спектр при малом и большом магнитном поле вдоль оси анизотропии. На основании полученного результата впервые построено описание этого соединения, корректное одновременно и при малом и при большом магнитном поле. Описан переход в упорядоченную фазу в магнитном поле.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Секция «Квантовые явления»

Надбарьерные и туннельные переходы в магнитных наносистемах

П.Ф. Бессараб, В.М. Уздин

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Исследуются металлические наносистемы, с несколькими стабильными магнитными состояниями, различающимися взаимной ориентацией магнитных моментов отдельных атомов. В качестве примера таких систем рассмотрены кластеры, состоящие из нескольких атомов переходных металлов, на немагнитной металлической подложке. Уже для кластера, состоящего из трех атомов железа расчеты дают два магнитных состояния с разным магнитным моментом, разделенные энергетическим барьером [1, 2].

Вопрос об устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций важен для анализа возможности использования магнитных наноструктур в качестве элементов магнитной памяти. На основе статистического подхода, обобщающего теорию переходного состояния (ТПС), выполнен расчет времени жизни кластера в заданном магнитном состоянии при конечной температуре. В рамках ТПС проведен анализ возможных путей в многомерном конфигурационном пространстве (направлений магнитных моментов), следуя которым система переходит из одного состояния в другое. Среди всех таких путей основной вклад в частоту переходов из данного магнитного состояния дает путь, с минимальным перепадом энергии (ПППЭ), лежащий наиболее низко на энергетической поверхности.

Расчет электронной и магнитной структуры кластеров, а также построение энергетической поверхности проводились на основе векторного обобщения модели Андерсона. Получены самосогласованные по величине магнитного момента и числу d -электронов решения, соответствующие произвольному направлению магнитных моментов, локализованных на индивидуальных атомах.

Разработанный для магнитных систем метод расчета констант перехода между магнитными состояниями включает в себя несколько этапов: расчет ПППЭ между точками минимума энергии системы; нахождение точки максимума на ПППЭ, которая дает величину барьера при переходе; расчет средней скорости пересечения системой поверхности, разделяющей начальное и конечное состояния. В результате для константы скорости перехода получается закон Аррениуса. Все величины, входящие в закон Аррениуса, выражаются только через параметры микроскопического гамильтониана модели.

Особый интерес представляет вопрос о спиновом туннелировании между магнитными состояниями. Этот процесс является основным механизмом переходов при очень низких температурах. В расчет константы скорости перехода в режиме туннелирования должны быть внесены коррективы, поскольку главный вклад в этом случае дает не точка перевала на энергетической поверхности, а замкнутая траектория конечных размеров. Эта траектория, соответствующая инстантонному решению уравнения стационарности действия, отражает эффект квантовой делокализации при низких температурах.

В работе [3] для нескольких простейших моделей магнитных систем были найдены аналитические инстантонные решения. Тем не менее, вопрос об универсальной численной процедуре поиска инстантонов для магнитных систем пока остается открытым. Решение этой проблемы является задачей текущих исследований.

1. S.Uzdin, V. Uzdin and C. Demangeat, Europhys. Lett. **47**, 556 (1999).
2. S.Uzdin, V. Uzdin and C. Demangeat, Surface Science **482-485**, 965 (2001).
3. E.M. Chudnovsky and L. Gunther, Phys. Rev. Lett. **60**, 661(1988).

Кванто-химическое моделирование процессов окисления поверхности нитридного ядерного топлива

Д. Бочаров^{1,2}, Д. Грязнов³, Ю.Ф. Жуковский³, Е.А. Котомин³

¹ Факультет Компьютерных Наук Латвийского Университета, бульвар Райниса, 19, LV-1586, Рига

² Физико-Математический Факультет Латвийского Университета, ул. Зеллю 8, LV-1002, Рига

³ Институт Физики Твёрдого Тела Латвийского университета, ул. Кенгарага 8, LV-1063, Рига

Мононитрид урана является перспективным материалом для ядерных реакторов четвёртого поколения, широкое использование которых прогнозируется через 20-30 лет [1]. К сожалению, нитридное топливо сильно подвержено окислительным процессам под воздействием воздуха, что приводит к нежелательному отравлению топлива и его дальнейшему разрушению. Поэтому весьма важно получить экспериментальные и теоретические данные, объясняющие механизм окисления нитрида урана.

В нашей работе мы рассматриваем процессы взаимодействия кислорода с поверхностью нитрида урана, используя метод функционала плотности (DFT) и базис плоских волн. Расчёты проведены, используя программу VASP [2]. В нашей работе мы показали возможность спонтанной диссоциации молекулы кислорода в случае её адсорбции на поверхности UN (001) [3], сильную хемисорбцию атомов кислорода на данной поверхности, типичную для металлических поверхностей [4], возможность спонтанного внедрения кислорода в существующую на поверхности азотную вакансию [5], и высокую подвижность атома кислорода на поверхности нитрида урана. Полученные результаты объясняют быстрое окисление нитрида урана.

Также в рамках сотрудничества с группой профессора Роберта Эварестова (Санкт-Петербургский государственный университет) мы сравнили результаты, полученные в базисе плоских волн, с результатами, полученные в базисе локализованных функций атомного типа (LCAO). Оба подхода дали хорошее согласие [4], [6].

1. H.J. Matzke, Science of Advanced LMFBR Fuel, North Holland, Amsterdam (1986); The Nuclear Fuel Cycle, P.D. Wilson (Eds.), University Press, Oxford (1996).
2. G. Kresse, J. Hafner, VASP the Guide, University of Vienna (2007) <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>.
3. Yu. F. Zhukovskii, D. Bocharov, E. A. Kotomin, J. Nucl. Mater., 393 (2009) 504.
4. Yu. F. Zhukovskii, D. Bocharov, E. A. Kotomin, R. A. Evarestov, A. V. Bandura, Surf. Sci., 603 (2009) 50.
5. D. Bocharov, D. Gryaznov, Yu. F. Zhukovskii, E. A. Kotomin J. Nucl. Mater., (2011), *in press*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.11.090>.
6. R.A. Evarestov, A.V. Bandura, M.V. Losev, E.A. Kotomin, Yu.F. Zhukovskii, D. Bocharov, J. Comput. Chem. 29 (2008) 2079.

Интерпретация спектров рентгеновского поглощения с использованием методов квантовой химии

Д. Бочаров^{1,2}, А. Кузьмин³, Ю.Ф. Жуковский³, Ю. Пуранс³

¹ Факультет Компьютерных Наук Латвийского Университета, бульвар Райниса, 19, LV-1586, Рига

² Физико-Математический Факультет Латвийского Университета, ул. Зеллю 8, LV-1002, Рига

³ Институт Физики Твёрдого Тела Латвийского университета, ул. Кенгарага 8, LV-1063, Рига

Одним из современных методов экспериментальной физики и материаловедения является спектроскопия рентгеновского поглощения, позволяющая получить информацию о локальной электронной, атомной и динамической структуре материалов. В свою очередь, квантовая химия изучает вопросы структуры, реакционных и химических свойств, основываясь на квантовомеханических подходах.

Теория многократного рассеяния, которую обычно используют для интерпретации рентгеновских спектров, хорошо описывает спектры при больших энергиях за краем поглощения, но вблизи края (выше уровня Ферми) возникают ощутимые проблемы. В свою очередь, известно, что методы квантовой химии вблизи уровня Ферми описывают электронную структуру достаточно успешно.

Коэффициент поглощения рентгеновского излучения в твёрдых телах может быть записан в виде: $\mu(E) \propto \left| \langle \phi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \phi_i \rangle \right|^2 \rho(E_f)$, где $\rho(E_f)$ – функция плотности электронных состояний, а $\langle \phi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \phi_i \rangle$ – матричный элемент перехода из начального состояния в конечное. Если матричный элемент изменяется достаточно плавно, то изменения в коэффициенте поглощения будут соответствовать изменениям функции плотности состояний $\rho(E_f)$, которую мы можем рассчитать при помощи методов квантовой химии.

В данной работе проведен анализ экспериментальных спектров рентгеновского поглощения *K*-края кислорода в перовскитоподобных WO_3 и AWO_3 соединениях (А – ион первой группы: H, Li, Na, K, Rb, Cs) квантовохимическими методами функционала плотности в базе плоских волн (программа VASP [1]), гибридными функционалами в базе локализованных функций атомного типа (программа CRYSTAL [2]), а также в рамках стандартного подхода многократного рассеяния (программа FEFF [3, 4]). Обсуждены преимущества и недостатки каждого из подходов [5].

1. Kresse G. and Hafner J., VASP the Guide, University of Vienna (2007), <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp>

2. Dovesi R., Saunders V. R., Roetti C., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Pascale F., Civalieri B., Doll K., Harrison N. M., Bush I. J., D'Arco Ph., and Llunell M. CRYSTAL-06, University of Turin (2006), <http://www.crystal.unito.it>

3. Ankudinov A. L., Ravel B., Rehr J. J., and Conradson S. D., “Real-space multiple-scattering calculation and interpretation of x-ray-absorption near-edge structure”, Phys. Rev. B, **58**, 7565-7576 (1998).

4. Rehr J. J. and Albers R. C., “Theoretical approaches to x-ray absorption fine structure”, Rev. Mod. Phys., **72**, 621-654 (2000).

5. D. Bocharov, A. Kuzmin, J. Purans, and Yu.F. Zhukovskii, Quantum chemistry studies of the O *K*-edge X-ray absorption in WO_3 and AWO_3 . - SPIE Proceedings, 2008, 71420T (p. 1-9)

Влияние релятивистских эффектов на дифференциальную емкость кристалла кадмий-ртуть-теллур.

И. С. Дубицкий¹, Д. Е. Цуриков¹, А. М. Яфясов¹

¹ *Санкт-Петербургский государственный университет (физический факультет, кафедра электроники твердого тела), 198504 Санкт-Петербург, Россия*

Работа посвящена исследованию влияния релятивистских эффектов на свойства полупроводника КРТ.

В рамках феноменологической теории области пространственного заряда было рассмотрено одномерное нелинейное уравнение Пуассона. При вычислении дифференциальной емкости можно избежать непосредственного определения хода потенциала в кристалле и, тем самым, не решать явно уравнение Пуассона. Предложена быстрая и устойчивая процедура определения вольт-фарадной характеристики КРТ.

Установлены границы применимости параболического и ультрарелятивистского приближений в модели полубесконечного кристалла. Кроме того, рассмотрено влияние подсистемы тяжелых дырок на поведение вольт-фарадной характеристики. Показано, что учет подсистемы тяжелых дырок вносит сильную асимметрию в ВФХ.

Также рассмотрено влияние толщины пленки на ВФХ. Установлено не связанное с эффектами размерного квантования явление провала вольт-фарадной характеристики КРТ с уменьшением толщины образца.

1. Д. Е. Цуриков, А. М. Яфясов. Дифференциальная емкость полупроводниковой пленки. Физика и техника полупроводников, 2010 г., том 44, вып. 10, с.1336-1340

Использование давления в исследованиях двумерных электронных систем

А. В. Фёдоров¹, А. Н. Вороновский¹, Е. М. Дижур¹, И. Н. Котельников²

¹ *Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верецагина РАН, 142190 Троицк, Россия*

² *Институт радиотехники и электроники РАН, 125009 Москва, Россия*

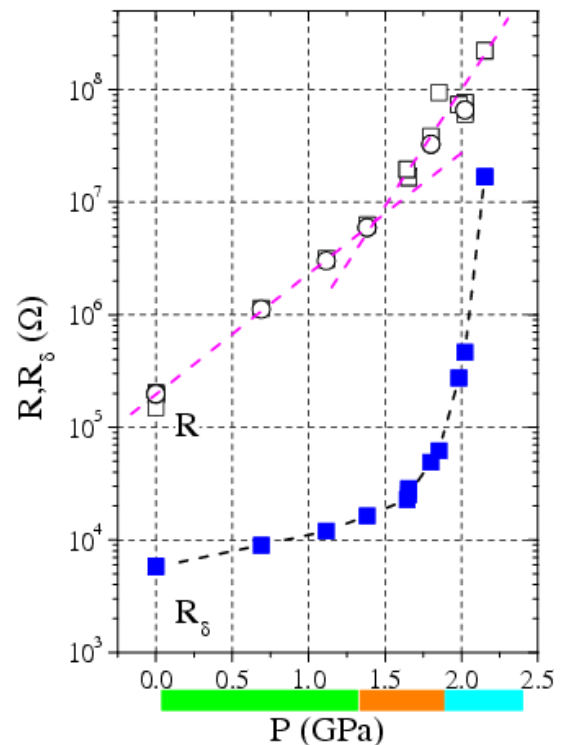
Применение техники высоких давлений в исследовании двумерных электронных систем дает уникальную возможность варьирования концентрации носителей практически без изменения концентрации и расположения рассеивающих примесей в отличие от метода изменения степени легирования.

При приложении внешнего гидростатического давления меняются межатомные расстояния, что приводит к изменению зонной структуры и к изменению упругих констант. При этом, благодаря особенностям зонной структуры полупроводников типа АЗВ5, на основе которых изготавливаются многие квазидвумерные электронные системы, а именно, благодаря наличию DX-центров в легированном GaAs, давление позволяет менять концентрацию носителей без изменения степени легирования. Примеси замещения Si, Sn, Te, Se в GaAs формируют метастабильные донорные дефекты - DX – центры. Приложение высокого давления изменяет зонную структуру n+- GaAs так, что уровень DX –центров приближается к уровню Ферми, и часть электронов локализуется на нем, в результате чего эффективная концентрация носителей, участвующих в переносе заряда, уменьшается.

Таким образом, давление позволяет изменять концентрацию носителей в широких пределах без изменения концентрации легирующих примесей и способствует переходу в диэлектрическое состояние, не связанное со структурным фазовым превращением.

В данной работе представлены результаты измерений туннельной R и латеральной R_{δ} проводимости структуры Al/ δ (Si)-GaAs при $T=4.2$ К под гидростатическим давлением P до 2.5 ГПа. Образцы были изготовлены в ИРЭ РАН методом молекулярно-лучевой эпитаксии [1] и имели начальную ($P=0$) концентрацию носителей в δ -слое $\approx 5 \cdot 10^{12}$ см⁻². Обнаружено, что при $P_1=2.0$ ГПа сопротивление δ -слоя и его температурный коэффициент резко возрастают. Кроме того, в туннельных спектрах амплитуда туннельной аномалии при нулевом смещении, связанная с межэлектронным взаимодействием, проходит через резкий максимум в этой области давлений.

Величина P_1 и ширина перехода металл-диэлектрик согласуется с оценками, учитывающими зависимость от давления параметров зонной структуры и положения DX-уровней в GaAs.



1. I. N. Kotel'nikov, V. A. Kokin, et al., Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz., 71, 564 (2000).

Секция «Фазовые переходы»

Перестройка доменной структуры монокристаллов сплавов $\text{Sm}(\text{Co},\text{Ni})_5$ при изменении магнитного поля и температуры

Я.В. Боднарчук, В.В. Боднарчук, О.Б. Дёгтева, Ю.В. Кузнецова

Тверской государственной университет

Хорошо известно, что процессы намагничивания и перемангничивания в квазибинарных соединениях $\text{R}(\text{Co},\text{M})_5$ осуществляются путем задержки смещения доменных границ на структурных неоднородностях. Ранее проведенные исследования рельефа базисной поверхности монокристаллов сплавов $\text{GdCo}_{5-x}\text{Cu}_x$, методом атомно-силовой микроскопии выявили ликвационные области, различающиеся концентрацией меди, что позволило установить корреляцию между размерами структурных неоднородностей и эффективной шириной доменных границ [1]. Особый интерес при исследовании доменной структуры таких монокристаллов заключается в исследовании переходной области между доменами с помощью магнитно-силовой микроскопии.

В данной работе исследованы процессы перестройки поверхностной доменной структуры (ДС) монокристаллов сплавов $\text{SmCo}_{5-x}\text{Ni}_x$ ($x = 2, 2,5$ и $3,0$) при намагничивании и перемангничивании. Для наблюдения перестройки ДС на базисных и призматических плоскостях использовались электромагниты разных конструкций, сопряженные с металлографическим микроскопом НЕОРНОТ-30. Установлено, что особенности перестройки ДС монокристалла сплава SmCo_3Ni_2 во внешнем магнитном поле косвенно свидетельствуют о наличии в нем эффективных центров задержки смещения доменных границ.

Получены МСМ-изображения ДС на базисной плоскости монокристалла SmCo_3Ni_2 , снятые на микроскопе Solver NT-MDT. Применение метода магнитно-силовой микроскопии позволило при исследовании переходной области между доменами со 180° -ной разориентацией выявить субдоменную структуру, которая представлена системой параллельных полос шириной $d \sim 100-150$ нм с четко различающейся контрастностью. Наблюдение субдоменной структуры производилось также при различных температурах.

Высказано предположение о существовании в высокоанизотропных одноосных магнетиках смешанной доменной границы, которая содержит в себе блоховские и неелевские участки. В рамках этой модели проведены расчеты плотности граничной энергии при комнатной температуре для монокристаллов сплавов $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Ni})_5$ [2].

1. Тезисы в материалах XXII Российской конференции по электронной микроскопии (РКЭМ - 2008).
2. Дёгтева О.Б., Усманов С.Р., Расчет параметров 180° -градусных доменных стенок Блоха и Нееля в монокристалле $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ // Вестник ТвГУ -2010.-№25.-С.-4-15.

Исследование методом Монте-Карло магнитных свойств аморфного тербия

А. В. Бондарев, В. В. Ожерельев, И. Л. Батаронов, Ю. В. Бармин

Воронежский государственный технический университет, 394026 г. Воронеж, Московский просп. 14

Аморфные сплавы, содержащие тяжелые редкоземельные металлы, представляют большой научный интерес. Конкуренция между обменным взаимодействием и случайной анизотропией в этих материалах приводит к большому разнообразию магнитных фазовых переходов.

Методом молекулярной динамики построена модель атомной структуры чистого аморфного тербия, содержащая 100 000 атомов. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга были исследованы магнитные свойства построенной модели. В гамильтониане учитывалось обменное взаимодействие между ближайшими атомами Tb со средним значением обменного интеграла J_0 и случайная одноосная анизотропия D [1]. Зависимость обменного интеграла от межатомного расстояния r была аппроксимирована линейной функцией.

Исследованы температурные зависимости спонтанной намагниченности и магнитной восприимчивости при различных значениях величины D/J_0 . Определены интервалы значений величины D/J_0 , при которых имеет место переход в ферромагнитное, асперомагнитное и спин-стекольное состояние. Температуры магнитных фазовых переходов T_f определялись по положениям максимумов на температурной зависимости магнитной восприимчивости. В итоге была получена магнитная фазовая диаграмма в координатах $D/J_0 - T$. При малых значениях константы анизотропии зависимость $T_f(D/J_0)$ близка к линейной. При $D/J_0 > 14$ эта зависимость становится более медленной и значения T_f выходят на насыщение. Предельная температура спин-стекольного перехода при $D/J_0 \rightarrow \infty$ составляет около 60 К.

Рассчитана зависимость намагниченности от напряженности магнитного поля при $D/J_0 = 14$ и различных температурах. Построены петли гистерезиса при различных температурах и различных значениях константы анизотропии, рассчитаны зависимости коэрцитивного поля и остаточной намагниченности от величины D/J_0 . Наблюдаемые особенности процессов намагничивания и перемагничивания хорошо описываются в рамках модели случайной анизотропии.

Исследована релаксация намагниченности после выключения внешнего магнитного поля при различных значениях величины D/J_0 . Установлено, что при больших значениях константы анизотропии ($D/J_0 > 14$) зависимость намагниченности от времени $M(t)$ является логарифмической, что характерно для широкого класса спиновых стекол. При малых значениях константы анизотропии ($D/J_0 \leq 14$) зависимость $M(t)$ подчиняется степенному закону.

Рассчитаны спиновые корреляционные функции при различных значениях величины D/J_0 и температуре $T = 1$ К. В фазе спинового стекла функции $G(r)$ экспоненциально убывают с расстоянием. С увеличением значения D/J_0 увеличивается степень разупорядоченности магнитной структуры, что приводит к понижению значений функции $G(r)$ и уменьшению длины корреляции.

1. R. Harris, M. Plischke, M.J. Zuckermann, Phys. Rev. Lett. **31**, 160 (1973).

Моделирование процессов в приповерхностном слое Мирового океана

А. В. Быстрова^{1,2}, Н. Е. Шапкина¹, А. Н. Боголюбов¹, В. Н. Аксенов¹

¹ Физический факультет, Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова, г. Москва

² Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, г. Пущино

Неравновесные процессы на границе раздела фаз раствор-воздух, осуществляемые в глобальном масштабе в природе, играют ключевую роль в тепло- и массообмене между океаном и атмосферой. Они приводят к перераспределению растворенных веществ и организмов, обитающих в тонком поверхностном слое океана вблизи его поверхности, влияя, таким образом, на поведение планктона и связанные с ним трофические цепи. Эти процессы являются одним из определяющих параметров глобальной климатической системы. Так, газовый обмен между океаном и атмосферой способствует распространению загрязнений по поверхности Земли. А кроме того, все это может быть связано с вопросом появления жизни на Земле.

Радиационный теплообмен Земли с Солнцем и космосом приводит к расслоению жидкости у границы контакта океан-атмосфера и формированию диссипативных структур дневного слоя и слоя инверсии в приземном слое атмосферы. Это происходит из-за различия в их оптических характеристиках и ведет к расслоению жидкости и формированию структур с радикально измененной вертикальной организацией. Пространственно-временные структуры тонких пограничных слоев взаимосвязаны и взаимозависимы. Изменения термодинамического состояния одной структуры вызывают отклик во второй и состоят они в "приспособлении" режимов теплообмена к краевым условиям. Температура поверхности океана - основной термодинамический параметр океана, влияющий на интенсивность процессов энергообмена между океаном и атмосферой. Сложные процессы, происходящие в тонком приповерхностном слое можно описать и анализировать на основе уравнений неравновесной термодинамики и теории размытых гетерофазных переходов.

В работе проведен анализ обширных данных (более 350 файлов) регистрации профилей температуры в переходном приповерхностном слое (слое холодной пленки), выделены 12 классов задач и для них определены и построены аппроксимирующие функции. Показано, что исследуемые переходные процессы хорошо описываются данным набором функций, полученных на основе теоретических представлений и соответствуют нелинейным дифференциальным уравнениям теории. В работе представлены основные типы полученных функций и дан анализ их применения в исследовании переходных процессов приповерхностного слоя Мирового океана.

Синтез и электропроводность дивалентного перовскитоподобного ванадата висмута с различным соотношением допантов

Величко Е.В.¹, Буянова Е.С.¹, Морозова М.В.¹, Петрова С.А.²

¹ *Уральский государственный университет, Екатеринбург, Россия*

² *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Сложнооксидные фазы являются основой для материалов, используемых в различных электрохимических устройствах. Тщательное исследование соотношения состава-структура-свойство необходимо для понимания механизмов и закономерностей поведения материалов и последующего целенаправленного их модифицирования. Одним из перспективных соединений для использования в качестве кислородно-ионных проводников с высокими значениями электропроводности при достаточно низких температурах является $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$. Наилучшими показателями проводимости обладает высокотемпературная γ -модификация данного соединения. Путем замещения ванадия другими металлами удастся снизить температуру существования этой модификации. При этом получены материалы с общей формулой $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{11-\delta}$, известные как семейство BiMeVOX .

Работа посвящена исследованию влияния на общую электропроводность сложных оксидов $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x-y}\text{Cr}_x\text{Fe}_y\text{O}_{11-\delta}$ ($x+y \leq 0.7$, $\Delta = 0.1$) различного соотношения концентраций железа и хрома.

Все образцы синтезировали по стандартной керамической технологии в интервале температур от 600 до 800 °С. Аттестация полученных составов производилась методом РФА.

Электропроводность твердых растворов исследована методом импедансной спектроскопии в диапазоне температур 473-1073 К. Измерения проводились двухконтактным методом с платиновыми электродами на предварительно подготовленных спеченных брикетах. Форма импедансной кривой меняется с изменением температуры. При относительно низких температурах (623 К) годограф состоит из нескольких сочетающихся полуокружностей. С ростом температуры низкочастотная часть всё более сглаживается. Эквивалентные схемы ячеек, соответствующие протеканию процессов в определенном температурном интервале, подбирали с использованием программы Zview software (Version 2.6b, Scribner Associates, Inc.). По результатам импедансных исследований проводимости построены температурные зависимости общей проводимости образцов от обратной температуры. Установлено, что ход зависимостей является характерным для семейства BiMeVOX : до определенной суммарной концентрации допантов проводимость растет, а при больших концентрациях наблюдается заметное снижение электропроводности. Показано, что с ростом величины отношения концентрации железа к концентрации хрома, электропроводность образцов увеличивается.

По результатам данной работы были определены образцы с наибольшей электропроводностью и установлено наилучшее соотношение концентраций хрома и железа при двойном замещении ванадия в ванадате висмута.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

Структурные изменения в PbTiO_3 при высоком давлении и температуре

*С.Г.Джабаров^{1,2}, С.Е.Кичанов¹, Д.П.Козленко¹,
А.И.Мамедов², Е.В.Лукин¹, Б.Н.Савенко¹, К.Лате³*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна, Россия

² Институт Физики НАНА, AZ-1143, Баку, Азербайджан

³ Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Bayreuth, D-95440, German

Титанат свинца PbTiO_3 является наиболее известным и изученным сегнетоэлектриком при нормальных условиях. Это связано с тем, что PbTiO_3 имеет высокую температуру фазового перехода сегнетоэлектрик – параэлектрик ($T_c=766$ К).

В сегнетоэлектрической фазе кристаллическая структура PbTiO_3 описывается тетрагональной симметрией с пространственной группой $P4mm$. При температуре $T_c=766$ К наблюдается фазовый переход сегнетоэлектрик – параэлектрик, сопровождающийся структурным фазовым переходом в кубическую структуру с пространственной группой $Pm\bar{3}m$ [1].

В настоящей работе проведено тщательное исследование влияния внешнего высокого давления на кристаллическую структуру соединения PbTiO_3 методом рентгеновской дифракции при высоких давлениях до 4,0 ГПа и в температурном диапазоне 300-950 К. Эксперименты по рентгеновской дифракции проведены с использованием гидравлического пресса высокого давления MAX80 [2], установленного на канале F2.1 источника DORIS-III (HASYLAB, DESY, г. Гамбург, Германия). Образец помещался в цилиндрический контейнер из нитрида бора, верхняя часть которого заполнялась образцом, а нижняя – NaCl для калибровки давления. Температура на образце создавалась с помощью графитового нагревателя и контролировалась через термопару. Энергодисперсионный дифракционный спектр регистрировался полупроводниковым германиевым детектором с разрешением 153 эВ на энергии 5.9 кэВ и с 500 эВ на 122 кэВ с общим средним разрешением $\Delta d/d \approx 1\%$. Фиксированный угол Брэгга детектора в эксперименте составлял 9.093° , а время экспозиции ~ 5 мин.

В диапазоне температур 300-766 К тетрагональной кристаллической структуре симметрии $P4mm$. При нормальном давлении и комнатной температуре параметры элементарной ячейки равны $a=3.903(6)$ Å; $c=4.145(4)$ Å, что хорошо согласуется с результатами, полученными ранее [3].

При температуре $T>766$ К наблюдаются значительные изменения дифракционных спектров, связанные со структурным переходом в кубическую фазу PbTiO_3 . Параметр элементарной ячейки для этой фазы равен $a=3.971(3)$ Å ($T=766$ К).

Получены зависимости параметров и объема элементарной ячейки, а так же параметра порядка – спонтанного напряжения для PbTiO_3 от температуры и высокого давления. Установлено, что точка фазового перехода сегнетоэлектрик-параэлектрик смещается с коэффициентом $dT_c/dP=-65$ К/ГПа.

Работа выполнена при поддержке гранта МД-696.2010.2 и госконтракта № 02.740.11.0542.

1. В.Г.Гавриляченко, В.Д.Комаров, А.В.Лейдерман, Е.Г.Фесенко. *ФТТ*, **40**, 8, 1546-1547(1998).

2. P.Zinn, J.Lauterjung, and R.Wirth *Zeitschrift für Kristallographie*, **212**, 691-698 (1997).

3. A.Sani, M. Hanfland, and D.Levy *J. Phys.: Condens. Matter.*, **14**, 10601–10604 (2002).

Структурные переходы мицеллы-кристаллиты в растворах с катионными поверхностно-активными веществами

*О. И. Иваньков^{1,2□}, А. И. Куклин¹, Г. Эккольд³,
Х. Гибхардт³, Ч. Хараматти³, А. Х. Исламов¹*

¹ *Лаборатория нейтронной физики им. Франка, ОИЯИ, г. Дубна, Россия*

² *Киевский Национальный Университет им. Тараса Шевченко, г. Киев, Украина*

³ *Институт физической химии, Университет Геттингена, Германия*

В работе представлены результаты исследования структурных переходов мицеллы-кристаллиты в системе с катионным поверхностно-активным веществом. Эксперименты проведены на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов ЮМО (ОИЯИ, г. Дубна). Были исследованы структурные переходы в широком диапазоне температур и давлений. На основе данных малоуглового рассеяния нейтронов и визуальных наблюдений были построены фазовые *P-T* диаграммы структурного перехода. Исследовано влияние соли на фазовый переход и структурные параметры мицелл (форма, заряд, число агрегации).

1. L. A. Bulavin, V. I. Gordeliy, O. I. Ivankov et al., Ukrainian Journal of Physics **55**, 3 (2010)
2. L.A. Bulavin, O.I. Ivankov, A.Kh. Islamov et al., Ukrainian Journal of Physics, **55**, 4 (2010)
3. C.R. Haramagatti, A. Islamov, H. Gibhardt et al., Phys. Chem. Chem. Phys., **8** (2006).
4. A. Islamov, C.R. Haramagatti, H. Gibhardt et al., Physica B: Condensed Matter, **385-386** (2006).

Основное магнитное состояние и магнитные свойства трехъядрных комплексов ионов никеля (II) – строительных блоков молекулярных магнетиков

А.В. Климов

Оренбургский государственный университет

Двумерные геометрически-фрустрированные магнетики с антиферромагнитными взаимодействиями ионов со спином $S > 1/2$ обладают рядом необычных свойств [1,2]. Синтез трехъядрных комплексов парамагнитных ионов открыл новые возможности химического дизайна различных треугольных молекулярных магнетиков. В работах [3,4] описан синтез треугольных комплексов никеля (II) (спин $S = 1$) типа Ni_3L_3 с отрицательным внутримолекулярным обменным взаимодействием - потенциальных «строительных блоков» новых наномангнитных материалов.

Рассчитаны возможные спиновые состояния комплексов Ni_3L_3 с изотропным отрицательным обменным взаимодействием. Среди возможных спиновых состояний с полным электронным спином $S = 0, 1, 2, 3$ низшей энергией обладает «диамагнитное» состояние $S = 0$ с полной компенсацией трех спинов $S_i = 1$ в симметричной пространственной и магнитной структуре [5]. Исследованы магнитные свойства комплексов Ni_3L_3 , температурные и магнитнополевые зависимости суммарного магнитного момента комплексов. Показано, что магнитное поле способно индуцировать переходы из низкоспиновых состояний в высокоспиновые, причем в состояния с максимальными значениями M_z . Такое поведение магнитного момента подобно явлению спинового кроссовера [6], индуцируемого магнитным полем в многоядерном комплексе. Обнаружен немонотонный характер в температурном поведении средней намагниченности комплексов Ni_3L_3 .

1. M. F. Collins and O.A. Petrenko, Can. J. Phys. 75, 605
2. S. Nakatsuji, H. Tonomura, K. Onuma, Y. Nambu, O. Sakai, Y. Maeno, R. T. Macaluso, and Julia Y. Chan Phys. Rev. Lett. 99, 157203 (2007)
3. Guo, D.; Duan, C. Y.; Fang, C. J.; Meng, Q. J. J. Chem. Soc., DaltonTrans. 2002, 834
4. Козьминых В.О., Муковоз П.П., Кириллова Е.А., Свиридов А.П., Кобзев Г.И., Моргунов Р.Б., Бердинский В.Л. Тезисы докладов IV международной конференции «Высокоспиновые молекулы и молекулярные магнетики», Екатеринбург, октябрь 14 – 19, 2008
5. A.V. Klimov - IV Russian-Japanese Seminar Molecular and Biophysical Magnetoscience SMBM, September 16 – 19, 2009, Orenburg, Russian Federation, Proceedings.
6. Philipp Gutlich, Harold A. Goodwin, “Spin Crossover in TransitionMetal Compounds I”, p 3-47, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2004

О фазовом переходе при высоком давлении в зонном ферромагнетике CoS_2

*В. А. Сидоров^{1,2,3}, В. Н. Краснорусский¹, А.Е. Петрова¹, А.Н. Утюж¹, Ф.С. Елькин¹,
В.М. Юхати⁴, Дж. Д. Томпсон², С.М. Стишов¹*

¹ *Институт физики высоких давлений РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия*

² *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA*

³ *Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

⁴ *Ames Laboratory, Iowa State University, Ames, IA 50011, USA*

Проведены измерения электрического сопротивления и магнитной восприимчивости высококачественного монокристалла ($\text{RRR}=\rho_{297\text{K}}/\rho_{2\text{K}}=285$) CoS_2 в области температур 1.5-200 К в диапазоне давлений 0-6 ГПа, теплового расширения при атмосферном давлении в районе фазового перехода (122 К) и сжимаемости при комнатной температуре в диапазоне 0-12 ГПа.

Электрические и магнитные свойства измерялись в среде гелия в диапазоне давлений 0-1 ГПа, а также с использованием камеры тороид в смеси глицерин-вода в диапазоне 0-6 ГПа. Электрическое сопротивление CoS_2 возрастает при переходе в упорядоченное ферромагнитное состояние, образуя «горб» ниже точки фазового перехода. Амплитуда этой аномалии практически экспоненциально растет с повышением давления, по крайней мере вплоть до 4.5 ГПа. Магнитная восприимчивость (χ) показывает резкий скачок в точке фазового перехода, амплитуда которого слабо изменяется с давлением. Построенная на основе этих данных кривая фазового перехода обнаруживает существование квантового фазового перехода при давлении 4.79 ГПа. Отклонение от ферми жидкостного поведения в диапазоне давлений 0-6 ГПа не обнаружено.

Тепловое расширение измерялось емкостным dilatометром. Аномалия теплового расширения в области фазового перехода становится похожа на температурную зависимость сопротивления в этой же области температур после вычитания из первой линейной функции теплового расширения от температуры.

Форма температурной зависимости сопротивления при атмосферном давлении свидетельствует в пользу непрерывного фазового перехода. С приложением давления магнитный фазовый переход в зонном ферромагнетике CoS_2 , по-видимому, трансформируется из непрерывного в фазовый переход I рода. Однако точные координаты трикритической точки не установлены.

Измерение сжимаемости CoS_2 проводилось методом порошковой рентгеновской дифракции. В качестве источника излучения применялась рентгеновская трубка с $\lambda(\text{MoK}_\alpha)=0.7106 \text{ \AA}$. Дифракционная картина регистрировалась детектором ImagePlate MAR345. Давление создавалось с помощью ячейки с алмазными наковальнями (передающая давление среда - гелий) и измерялось по сдвигу линий люминесценции рубина. В ходе экспериментов было получено уравнение состояния при комнатной температуре и давлении до 12 ГПа. Вычисленный объемный модуль составил около 130 ГПа, что хорошо согласуется с литературными данными.

Исследование структуры и динамики решетки бесвинцового перовскита методами синхротронного излучения

С.Б.Вахрушев^{1,2}, М.А.Кораблев-Дайсон¹, Р.Г.Бурковский¹, Д. Дамянович³, Чернышев Д.⁴, Босак А.⁴

¹ Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет (С.-Петербург, Россия)

² Физико-Технический Институт им.А.Ф.Иоффе РАН (С.-Петербург, Россия)

³ Лаборатория Керамики, Швейцарский Технологический Институт (Лозанна, Швейцария)

⁴ ESRF Grenoble Cédex, France

В работе исследуется перовскитоподобный бесвинцовый пьезоэлектрик $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{0.98}\text{Li}_{0.02}\text{NbO}_3$ (KNN). Свойства данного соединения близки к широко используемому в настоящее время пьезоэлектрику - цирконату-титанату свинца (содержащему токсический свинец), замена которого экологически чистым соединением без потери технологических свойств, была бы очень актуальной. Пьезоэлектрическая константа d_{33} (наведенный заряд на силу приложенную в том же направлении) в KNN более 300 пКл/н [1,2].

В данной работе микроскопические свойства объекта исследуются методом синхротронного рассеяния на Швейцарско-Норвежской линии BM01a (SNBL, ESRF) и ID28(ESRF).

В результате были получены трех мерные карты диффузного рассеяния для кубической, тетрагональной и орторомбической фазы. Из данных диффузного рассеяния следует, что при переходе из кубической(С) в тетрагональной (Т) исчезает одна «священная» плоскость, затем при переходе из тетрагональной в орторомбическую (О) фазу исчезает еще одна плоскость.

Результаты обработки данных полученных из измерения неупругого рассеяния синхротронного рассеяния показали, что переход носит динамический характер. «Священная» плоскость диффузного рассеяния соответствует одномерному акустическому колебанию. Исчезновение «священной» плоскости в обратном пространстве соответствует смягчению акустического фонона в прямом пространстве. Причем при С-Т фазовом переходе исчезает одна плоскость, затем при Т-О фазовом переходе (Морфотропная фазовая граница) исчезают вторая и третья плоскости и вновь появляется первая. Другими словами вблизи морфотропной фазовой границе происходит переключение, а не последовательное исчезновение «священной» плоскости диффузного рассеяния.

1. M. Davis, N. Klein, D. Damjanovic, Nava Setter et al., APL, 90,62904 (2007)

2. Y. Saito et al., "Lead-free Piezoceramics", Nature, 432, 84 (2004)

Первопринципные расчеты фазовой диаграммы натрия при высоких давлениях и температурах

С. В. Лепешкин^{1,2}, Е. Г. Максимов¹, М. В. Магницкая³

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.

³Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.

В настоящей работе с помощью двух первопринципных подходов исследовано плавление натрия при высоких давлениях и температурах. В первом из них, основанном на расчетах фононных частот и среднеквадратичных отклонений атомов в квазигармоническом приближении, температура плавления определялась по критерию Линдемана. Показано, что недавно открытое аномальное плавление Na хорошо объясняется поведением при сжатии фононного спектра и, соответственно, амплитуд тепловых колебаний. В рамках данного подхода удалось количественно описать немонотонное поведение кривой плавления $T_m(p)$ натрия в очень широком интервале давлений и температур, и в частности, падение температуры плавления при $p \sim 1$ Мбар до более низких значений, чем при нормальном давлении.

Во втором подходе $T_m(p)$ определялась с помощью молекулярно-динамического моделирования нагрева твердой фазы вплоть до плавления. Этот подход позволяет адекватно описывать свойства материалов при конечных температурах с полным учетом ангармонических эффектов. В этом случае T_m определялась по возникновению диффузии в жидкой фазе.

Результаты, полученные с помощью обоих подходов, хорошо согласуются между собой, а также с экспериментальной кривой плавления Na в ОЦК и ГЦК фазах в диапазоне давлений до ~ 1 Мбар и температур от 300 до 1000 К. Хорошее согласие двух подходов говорит о малости эффектов ангармонизма в натрии.

1. С.В. Лепешкин, М.В. Магницкая, Е.Г. Максимов "Динамика решетки и особенности плавления щелочных металлов Li и Na", Письма в ЖЭТФ **89**, 688 (2009).

2. Е. Г. Максимов, С. В. Лепешкин, М. В. Магницкая "Первопринципные расчеты динамики решетки и фазовой диаграммы натрия при высоких давлениях и температурах", Кристаллография **56**, 2011.

Моделирование аномального поведения теплофизических свойств диоксида урана методом молекулярной динамики

А. В. Лунёв¹, Б. А. Тарасов¹, А. В. Назаров¹

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ*

Мы представляем моделирование идеального кристалла стехиометрического диоксида урана методом классической молекулярной динамики в интервале температур 300-3500К. В работе получены температурные зависимости теплопроводности, теплоемкости и ионной проводимости. В нашей модели обнаружен рост теплопроводности диоксида урана при температурах выше 2500К, что не предсказывается существующими ангармоническими теориями. Несколько парных потенциалов использовалось в работе и все они дают схожие результаты. Дальнодействующие силы учитывались суммированием по Эвальду, а кинетические свойства определялись в NVE-ансамбле через формализм Грина-Кубо. Для более точного определения теплопроводности в ионном кристалле с потоком заряда, использовалась связь теплопроводности с термоэлектрическими эффектами, полученная на основе теории Онзагера.

Показано, что на зависимости теплопроводности от температуры наблюдается пик в районе 2500К, который наблюдался в некоторых экспериментах. Именно при этой температуре начинается аномальный рост теплопроводности и ионной проводимости, что может быть связано с суперионным переходом в диоксиде урана. Однако в нашей работе не наблюдалось полного плавления анионной подрешетки, но только возникновение диффузии кислорода по эстафетному механизму. Результаты работы показывают возможность объяснения аномального поведения теплофизических свойств диоксида урана без привлечения электронных дефектов.

МУР и трансмиссия нейтронов Cu-Be сплавов с различной концентрацией Be, стареющих в постоянном магнитном поле

Ю.В. Осинская¹, С.С. Петров¹, А.В. Покоев¹, В.В. Рунов²

¹ Самарский государственный университет, Самара, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН, Гатчина, Ленинградская обл., Россия

Экспериментально установлен магнитопластический эффект (МПЭ) при старении модельных Cu-Be сплавов с содержанием бериллия 0.5, 1.0, 1.6, 2.7, 3.0 вес. % и с максимальным суммарным содержанием ферромагнитных примесей не более 0.035 вес. %, величина которого достигает 15 % в зависимости от исходной концентрации бериллия и времени старения. В частности установлено, что с ростом концентрации бериллия размер зерна уменьшается в 3 раза, микротвердость сплавов увеличивается в 3.5 раза и изменяется фазовый состав. Результаты рентгенофазового анализа и электронной микроскопии показали, что с увеличением времени старения растёт количество фазы γ -CuBe, формируется её кристаллическая решетка и теряется когерентная связь с остаточной матрицей. Наложение постоянного магнитного поля (ПМП) на те же режимы термической обработки приводит к активизации процесса старения сплава, что выражается в более интенсивном процессе совершенствования структуры и роста новой фазы.

Для установления элементарных электронно-спиновых механизмов влияния ПМП на кинетику старения и фазообразование в Cu-Be сплавах в настоящей работе выполнено экспериментальное исследование малоуглового рассеяния (МУР) и трансмиссии поляризованных нейтронов на образцах Cu-Be сплавов с содержанием бериллия 0.5, 1.0, 1.6, 2.7 и 3.0 вес. % в процессе искусственного старения *in situ* с включением-выключением ПМП.

В состоянии закалки для образцов всех составов наблюдалось весьма незначительное увеличение рассеяния нейтронов по сравнению с инструментальной кривой во всем диапазоне изменений вектора рассеяния q . В процессе старения наблюдается при прочих равных условиях существенный рост рассеяния нейтронов с увеличением концентрации бериллия и значительное различие импульсных зависимостей рассеяния нейтронов, как по величине, так и по форме, на образцах двух групп с концентрацией: 1) Cu -0.5, 1.0 вес. % Be и 2) Cu-1.6, 2.7, 3.0 вес. % Be.

Установлено, что ПМП не оказывает заметного влияния на МУР нейтронного рассеяния, но существенно влияет на временную зависимость трансмиссии нейтронов. Так при включении ПМП происходит увеличение трансмиссии, а при выключении - уменьшение. Исходя из того факта, что каких-либо изменений в МУР при включении ПМП не наблюдается, увеличение трансмиссии происходит за счет уменьшения рассеяния в области больших углов. Из законов дифракции следует, что размеры объектов рассеивающих на большие углы должны быть соизмеримы с длиной волны падающего излучения. В данном случае – это размеры $R_0 \approx \lambda \approx 10 \text{ \AA}$. Следовательно, подобное изменение трансмиссии под действием ПМП может быть объяснено только уменьшением концентрации рассеивающих центров (нанокластеров) масштаба $R_0 \sim 10 \text{ \AA}$.

Полученная совокупность экспериментальных фактов убедительно показывает, что а) магниточувствительными объектами, которые реагируют на модуляцию ПМП процесса старения, являются кластеры размером $\sim 1 \text{ нм}$ и б) механизмы влияния ПМП на МПЭ и кинетику старения Cu-Be сплавах определяются спецификой элементарных процессов роста кластеров и фаз в ПМП и их взаимодействием с дислокациями при включении ПМП.

Влияние поправки на двойной учёт на фазовую диаграмму модели Эмери

Н. С. Павлов¹, И. А. Некрасов¹

¹ *Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*

Сильные электрон-электронные корреляционные эффекты играют важную роль во многих системах, изучаемых современной наукой. Они присутствуют в таких системах как высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП), системы с гигантским магнетосопротивлением, в системах с тяжёлыми фермионами и т.д. Для теоретического описания сильно коррелированных систем, как правило, используется модель Хаббарда, для решения которой была разработана и интенсивно используется теория динамического среднего поля DMFT (см. обзор [1]). Однако в DMFT описании реальных систем остаются ещё не решённые проблемы, среди которых неоднозначность выбора вида поправки на двойной учёт кулоновского взаимодействия E_{dc} [2]. Цель данной работы исследовать влияния величины E_{dc} на переход металл диэлектрик трёхзонной модели Эмери [3].

В рамках DMFT(NRG) [4] была рассчитана фазовая диаграмма в переменных поправки на двойной учёт E_{dc} и полной заселённости n при постоянном значении кулоновского взаимодействия $U=8$ эВ (рис.1). Данные расчёты проводились с параметрами аналогичными электронно-легированному ВТСП соединению $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-\delta}$ [5].

В области умеренного легирования (электронного до 20% и дырочного до 15% от половинного заполнения $n_{tot}=2.5$) наблюдается с увеличением $-E_{dc}$ переход металл-диэлектрик-металл со сменой положения квазичастичного пика (QP) и незначительным перераспределением спектрального веса. При дальнейшем увеличении допирования перераспределение спектрального веса между верхней Хаббардовской зоной UHB и зоной Жанга-Райса ZRB становится значительным. Это приводит в электронном случае к постепенному исчезновению UHB, а в дырочном – ZRB.

На основе данных расчётов планируется выбрать аналитический вид поправки на двойной учёт из варианта возможных, предложенных в работе [2] или предложить свой.

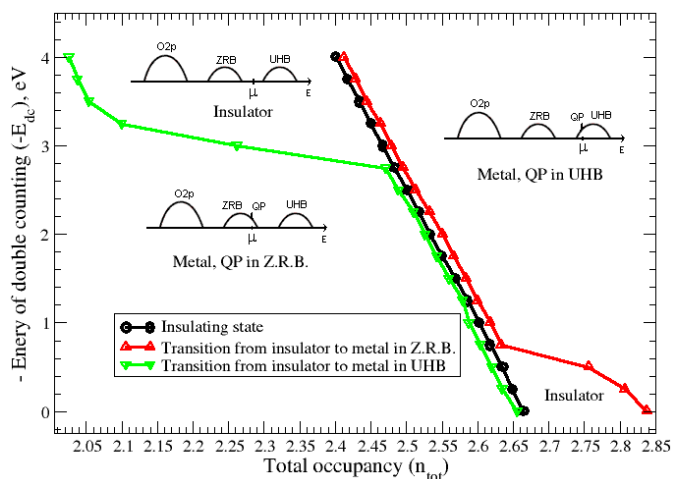


Рис.1. Фазовая диаграмма модели Эмери в переменных E_{dc} и n_{tot} при $U=8$ эВ.

1. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 1, 13 (1996).
2. M. Karolak, et al. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 181, 1, 11 (2010).
3. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
4. K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975);
H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, Phys. Rev. B 21, 1003 (1980); ibid. 21, 1044 (1980).
5. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, et al. Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).

Рост кристаллов лизоцима в присутствии гуанидингидрохлорида и мочевины и их морфологический анализ

Пивоварова Ю.В.^{1,2}, Сванидзе А.В.¹, Лушников С.Г.¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

²Санкт-Петербургский государственный университет

В настоящее время одной из основных проблем молекулярной биологии является изучение влияния различных факторов на стабильность белков, а также выявление структурных особенностей их взаимодействия с субстратом, различными лигандами, лекарственными препаратами и др. Структурные особенности взаимодействия белков выделяются на основе рентгеноструктурных исследований монокристаллов соответствующих белков. Одним из первых шагов такого рода исследований является рост белковых кристаллов, что, зачастую, является самостоятельной задачей. Так, например, изменение структуры белков при денатурации достаточно сложно исследовать, поскольку денатурированные белки невозможно закристаллизовать.

Сравнительно недавно было выявлено, что при низкой концентрации в растворе GdnHCl и мочевины (широко распространенные денатуранты) приводят к стабилизации белков [1 - 2] и существуют возможности для их кристаллизации. Нужно отметить, что, несмотря на многочисленные работы по изучению влияния данных денатурантов на белки, остается много вопросов относительно особенностей их взаимодействия с белками и механизмов денатурации. Поэтому получение кристаллов белков в присутствии денатурантов является актуальной задачей. Целью данной работы была оптимизация условий роста монокристаллов лизоцима куриного яичного белка в присутствии GdnHCl и мочевины, изучение влияния данных денатурантов на рост кристаллов белка и их морфологические особенности. Лизоцим был выбран в данной работе в качестве модельного объекта.

Кристаллизация лизоцима в комплексе с каждым из денатурирующих агентов проводилась методом «висячей капли». Температура, pH и ионная сила раствора, содержание белка и осадителя в маточном растворе были выбраны такими же, как и при росте тетрагональных кристаллов лизоцима с симметрией $P4_32_12$ [3]. Концентрация денатурантов варьировалась в ходе экспериментов. Для полученных кристаллов лизоцима с GdnHCl и кристаллов лизоцима с мочевиной был проведен морфологический анализ, результаты которого обсуждаются в настоящей работе.

1. M.Trivikram Rao, Abani K. Bhuyan, K. Venu, V. S.S. Sastry // *J. Phys. Chem.* **113** (2009) 6994-7002;

2. Abani K. Bhuyan // *Biochemistry* **41** (2002) 13386-13394;

3. Сванидзе А.В., Лушников С.Г., Шувалов Л.А. // *Кристаллография* **50** (2005) 850-856.

Низкоэнергетический спектр кристалла $\text{RbDy}(\text{MoO}_4)_2$

Н. С. Бондарь, С. Н. Попережай, В. И. Кутько.

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина
61103 Харьков, пр. Ленина 47*

Измерены спектры пропускания монокристалла $\text{RbDy}(\text{MoO}_4)_2$ в длинноволновом ИК-диапазоне ($10\text{-}40\text{ см}^{-1}$) при низких температурах ($6\text{-}20\text{К}$). В спектре обнаружены полосы поглощения с энергиями $18,5\text{ см}^{-1}$ в поляризации $E\parallel a$, 25 см^{-1} и 23 см^{-1} в поляризации $E\parallel c$, и 35 см^{-1} в поляризации $E\parallel b$. При повышении температуры до 20К в спектре возникает достаточно интенсивная и широкая неполяризованная полоса поглощения с энергией 22 см^{-1} . Был интерпретирован спектр поглощения и рассчитан низкочастотный колебательный спектр кристалла $\text{RbDy}(\text{MoO}_4)_2$ с использованием одномерной модели в зоне Бриллюэна. При этом было установлено, что первый возбуждённый уровень ионов Dy^{3+} в кристалле $\text{RbDy}(\text{MoO}_4)_2$ при температуре $T > T_{\text{п}} = 18\text{К}$ пересекает низкочастотные колебательную ветвь $u\parallel b$ в области с $k \approx \pi/b$, из-за чего возникает достаточно сильная динамическая связь с колебаниями кристаллической решётки. Это обуславливает неустойчивость кристаллической решётки, вызывая структурный фазовый переход типа КЭЯТ ($T_c \approx 18\text{К}$) и дополнительное расщепление основного квазидублета ионов Dy^{3+} в кристалле $\text{RbDy}(\text{MoO}_4)_2$.

1. М.В. Мохосоев, Ф.П. Алексеев, В.Л. Бутуханов. Двойные молибдаты и вольфраматы: - Новосибирск: Изд-во Наука СО, (1981).
2. А.И. Звягин, Т.С. Стеценко, В.Г. Юрко, Р.А. Вайшнорас. Письма в ЖЭТФ 17, 190 (1973).
3. M.J.M. Leask, O.C. Tropper, and M.L. Wells, J. Phys. C 14, 3481 (1981).
4. Г. Пейн. Физика колебаний и волн: - М: Мир, (1979).
5. И.В. Скоробогатова, А.И. Звягин, ФНТ, **4**, №6, 800 (1978).
6. И.В. Скоробогатова, Е.М. Савченко, ФНТ, **6**, 112 (1980).

Рентгеноструктурные исследования монокристаллов $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{0.2}(\text{Sr}_{0.75}\text{Ba}_{0.25})_{0.9}\text{Nb}_2\text{O}_6$, допированных Cu^{2+} .

Е.А. Попова^{1,2}, Ю.В. Пивоварова^{1,2}, С.Г. Лушников¹, С.В. Кривовичев²

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

²СПбГУ, геологический факультет, каф. кристаллографии, Санкт-Петербург, Россия

Кристаллы $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{0.2}(\text{Sr}_{0.75}\text{Ba}_{0.25})_{0.9}\text{Nb}_2\text{O}_6$, допированные Cu^{2+} , (KNSBN:Cu) принадлежат к семейству соединений со структурным типом вольфрамовой бронзы и относятся к одноосным релаксорным сегнетоэлектрикам [1-3]). Исследования диэлектрического отклика кристаллов KNSBN:Cu показали наличие широкой, частотнозависимой аномалии вдоль оси c , растянутой на сотни градусов, и характерной аномалии в окрестности сегнетоэлектрического фазового перехода $T_c \approx 420$ К - вдоль оси a [1]. Наблюдаемая картина подобна той, что хорошо известна для таких более изученных представителей рассматриваемого семейства одноосных релаксорных сегнетоэлектриков как $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN61) [2, 3]. Подобные свойства тесно связаны с явлением упорядочения/разупорядочения различных катионов, входящих в одну кристаллографическую позицию, и распределением этих же катионов по различным позициям в структуре. Введение в структуру SBN калия и натрия еще более усложняет картину распределения катионов в структуре по позициям, что и вызвало необходимость проведения структурных исследований монокристаллов KNSBN, тем более что детально структура рассматриваемого соединения не исследовалась.

Рентгеноструктурные эксперименты выполнены на монокристалльном дифрактометре STOE IPDS II с плоским детектором типа Image Plate. Параметры элементарной ячейки и матрица ориентации определялись по полученным отражениям и уточнялись по всему массиву рефлексов [4,5]. Расшифровка и уточнение структуры выполнены в программе SHELXL-97 [6].

Проведенные исследования показали, что кристаллы $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{0.2}(\text{Sr}_{0.75}\text{Ba}_{0.25})_{0.9}\text{Nb}_2\text{O}_6$ принадлежат к тетрагональной сингонии, пространственная группа $P4bm$, $a=b=12.461(2)$ Å, $c=3.9242(8)$ Å, $R_1 = 0.064$ для 790 независимых рефлексов с $I > 2\sigma(I)$. Исследуемое соединение относится к структурному типу вольфрамовой бронзы. Структура каркасная, сложена искаженными октаэдрами NbO_6 , соединенными между собой вершинами через мостиковые атомы кислорода. В плоскости ab каркас представлен чередованием четырех- и пятичленных октаэдрических колец, а вдоль оси c слои расположены строго друг под другом, соединяясь между собой через вершины каждого из октаэдров. В результате такого расположения октаэдров в структуре KNSBN наблюдаются три типа межкаркасных полостей, формирующие три типа каналов вдоль оси c . Образованные пятичленными и четырехчленными октаэдрическими кольцами полости заполнены катионами K^+ , Na^+ , Sr^{2+} и Ba^{2+} , таким образом, в структуре KNSBN существуют, соответственно, две позиции, в которые в различном количестве входят все четыре катиона. Третий тип полостей, образованный сочленением трех октаэдров, катионами не заполнен.

1. J-H Ko, D. H. Kim, S. G. Lushnikov, et.al. *Ferroelectrics* **286**, 61 (2003)
2. J.-H. Ko, S.Kojima, S. Lushnikov et.al., *J.Appl.Phys.***92**, 1537 (2002)
3. J-H Ko, S.G. Lushnikov, D.H. Kim, et.al., *J.Appl.Phys.* **104**, 104105 (2008)
4. Stoe (2005). *X-RED* and *X-SHAPE*. Stoe & Cie, Darmstadt, Germany.
5. Stoe (2007). *X-AREA*. Stoe & Cie, Darmstadt, Germany.
6. SHELXL-97, Sheldrick, G.M., University of Goettingen, Germany, 1997, Release 97-2

«Кротовые норы» - новый тип топологически устойчивых конфигураций параметра порядка в d-сверхпроводниках.

А.В. Радиевский¹, П.Ф. Бессараб²

¹ ИЗМИРАН ЗО, г. Калининград

² СПбГУ, г. Санкт Петербург

Исследована трехмерная, зависящая от времени модель Гинзбурга-Ландау для сверхпроводников с многокомпонентными параметра порядка (d - спаривание). В численном эксперименте была обнаружена устойчивая топологическая конфигурация: доменная граница + вихрь + доменная граница, которая целиком находится внутри сверхпроводника. Эта конфигурация топологически эквивалентна "кротовым норам" широко известным в квантовой гравитации и остается в стабильном состоянии даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Наличие "кротовых нор" в сверхпроводящем образце может существенно влиять на его термодинамические и магнитные свойства.

1. P.F. Bessarab, A.V. Radievsky , Journal of Physics: Conference Series **200** (2010) 012013 doi:10.1088/1742-6596/200/1/012013

Диэлектрическая и упругая релаксация в композите сополимер ВДФ₆₀/Тр₄₀ - пористое стекло

Л.Н. Коротков¹, О.А. Караева¹, В.В. Тарнавич¹, Д.В. Лиховая¹, А.А. Набережнов², Е. Rysiakiewicz-Pasek³

¹Воронежский государственный технический университет, 394026 Воронеж, Россия

²ФТИ им А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

³Institute of Physics, Wroclaw University of Technology, 50370 Wroclaw, Poland

В последние годы значительный интерес исследователей вызывают кооперативные процессы, протекающие в условиях ограниченной геометрии.

Целью данной работы стало изучение релаксационных явлений, связанных с процессом перехода в стеклообразное состояние в частицах внедренного в матрицу пористого стекла полярного сополимера винилиденфторида - трифторэтилена (ВДФ/Тр).

Для исследований использовали композиционный материал, полученный путем внедрения сополимера (ВДФ₆₀/Тр₄₀) в матрицу пористого стекла, имеющую трехмерную дендритную многосвязную систему каналов со средним диаметром пор около 320 нм, а также образец «объемного» сополимера. Измерения комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$ проводили в режиме медленного нагрева на частотах $f = 1 - 500$ кГц в интервале температур 200 – 350 К. Исследования температурных зависимостей упругого модуля и внутреннего трения (Q^{-1}) осуществляли с использованием обратного маятника на частоте $f \approx 25$ Гц.

Как в случае образца композиционного, так и объемного материала, эксперимент показал наличие максимумов на зависимостях $\epsilon''(T)$ и $Q^{-1}(T)$ в области температуры стеклования T_g . Эти максимумы, обусловлены замораживанием микроброуновского движения основной молекулярной цепи в некристаллическом пространстве полимерного материала. С увеличением частоты измерительного поля максимумы диэлектрических потерь смещается в область более высоких температур в соответствии с уравнением Вильямса – Ландела – Ферри:

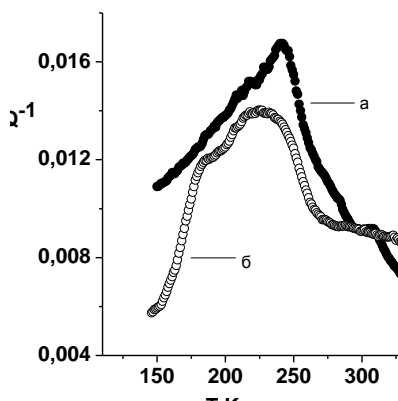
$$\ln a(T) = -\frac{C_1(T - T_g)}{C_2 + (T - T_g)},$$

где $a = \tau/\tau_{ст}$, $\tau_{ст} = 300$ с – так называемое стандартное время релаксации, C_1 и C_2 эмпирические постоянные, $\tau = 1/2\pi f$.

Данное уравнение удовлетворительно описывает позиции пиков как диэлектрических, так и упругих потерь (рис.). Это показывает, что процессы диэлектрической и упругой релаксации обусловлены одним общим механизмом.

Наряду с этим установлено, что температура стеклования T_g в частицах внедренного материала приблизительно на 10 К выше чем в объемном материале.

Экспериментальные результаты обсуждаются в рамках концепции свободного объема с учетом взаимодействия полимерных включений с внутренней поверхностью пор матрицы.



Работа выполнялась в рамках государственного контракта № 02.740.11.0399 (Федеральная целевая программа «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы) при поддержке РФФИ (Проекты N 08-02-01089-а, N 09-02-97503-р_центр_а)

Секция «Методы рассеяния»

Нейтроннографическая установка высокого давления «ГЕРКУЛЕС»

С.Н. Аксенов¹, Р. А. Садыков¹, Е.С. Клементьев^{1,2}, А.Г.Ляпин³, А. П. Булкин⁴, В. Л. Кузнецов¹,
Э.А.Коптелов¹

¹Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

²РНИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

³ИФВД РАН, Троицк, Россия

⁴ПИЯФ РАН, Гатчина, Россия

В докладе представлена нейтроннографическая установка, позволяющая проводить измерения под давлением. В настоящее время на 10 канале источника ИН-06 ИЯИ РАН

(г.Троицк, МО) идет монтаж нейтроннографической установки «Геркулес». Установка представляет собой герметичный сейф, внутри которого установлен пресс, позволяющий получать усилие более 200 тонн. На установке будут установлены дифракционные модули и модули неупругого рассеяния нейтронов, Это позволит проводить нейтроннографические измерения на образце до 100кбар, при размерах до 2см³. Специфика комплекса будет позволять проводить измерения *in situ* процесса наводороживания при высоких давлениях и в широком диапазоне температур, получать рекордное давление для образцов объемом до 1см², возможность одновременного измерения структуры и динамики материалов.

Для увеличения плотности потока нейтронов, падающих на образец «под давлением» был установлен концентратор, который благодаря «суперзеркалам», фокусирует нейтронный пучок. Устройство состоит из четырех трапециевидных плоских частей, имеющих «суперзеркальную» поверхность, соединенных в одну систему с внутренним каналом для нейтронов прямоугольного поперечного сечения с «суперзеркальной» поверхностью. «Суперзеркала» - нейтронно-оптические элементы с многослойным покрытием на основе Ti и Ni. «Суперзеркала» для «нейтронного концентратора» обеспечивают критический угол отражения нейтронов не менее 2.5 величины критического угла изотопа Ni (т.е. кратность «суперзеркала» $m \geq 2.5$). Нейтронный концентратор позволяет увеличить интенсивность падающего на образец потока нейтронов в ~ 3 раза для нейтронов с $\lambda > 2,5 \text{ \AA}$. Так же в нейтронно- оптического тракт были установлены последовательно три коллиматора.

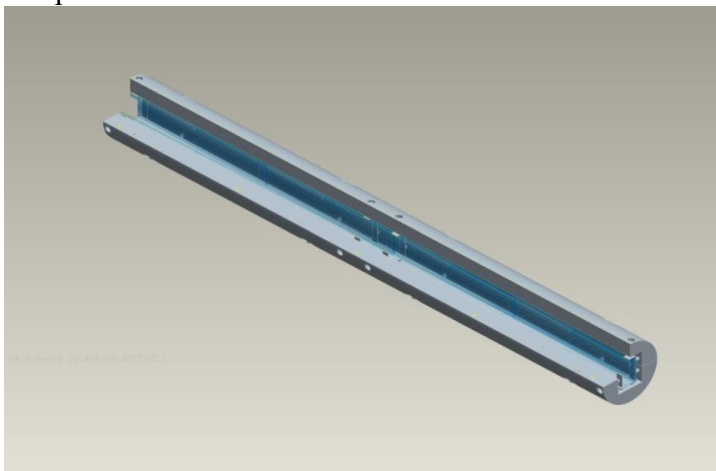


Рис.1 Изображение разреза концентратора с «суперзеркалами».

На рисунке 2 представлена схема сектора установки «Геркулес». Для удобства управления гидравликой пресса, вентили высокого давления будут расположены на внешней стороне сейфа. Это позволит менять давление на образце, не заходя в сейф, поскольку он герметичен и его можно будет заполнять аргоном или другими инертными газами для обеспечения безопасности. Так же была спроектирована и установлена ловушка нейтронов.

В ноябре 2010 года была запущена в действие установка «Геркулес»(см.рис2). В качестве детектора был использован сектор из трех гелиевых счетчика. В качестве тестовых образцов были померены Fe, TiZr и карбонадо. На рис 3 приведен примера образец карбонадо. Время измерения было примерно полтора часа и при частоте 10 Гц. При этом видно, что все пики достаточно хорошо видны. Это показывает, что установка вполне работоспособна даже не при полной мощности и не максимальной чистоте ускорителя.

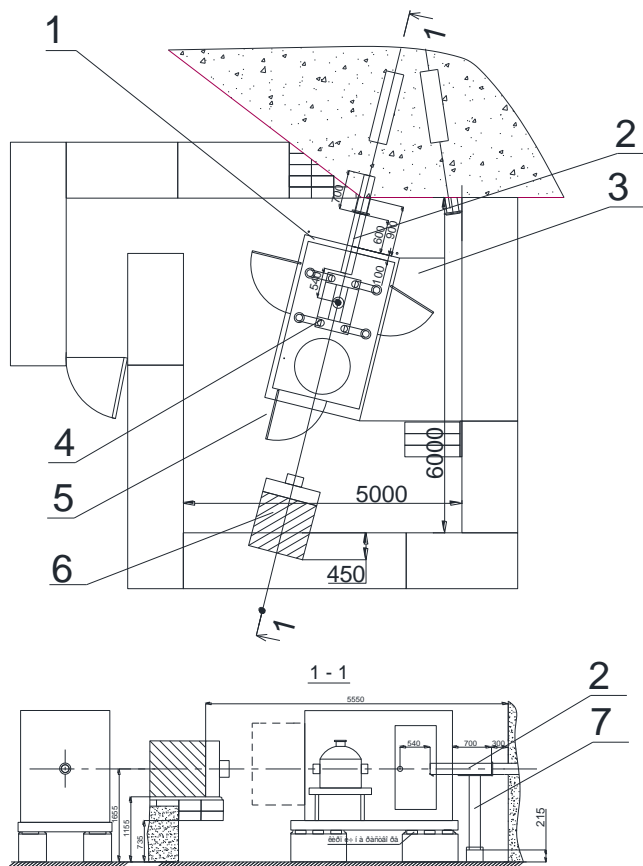


Рис. 2 Схема сектора «Геркулес».

1. Бетонная опора под пресс
2. Нейтронный концентратор
3. Металлическая платформа
4. Пресс
5. Герметичный сейф
6. Ловушка
7. Опора под концентратор

В данное время идет подготовка к монтажу секторов для «Геркулеса» на основе гелиевых счетчиков высокого давления «Гелий-4». Счетчики предназначены для регистрации малых потоков тепловых нейтронов в пропорциональном режиме, наполнены газом гелий-3

(8 атм). Так же для счетчиков были изготовлены предусилители. Для измерений в широком диапазоне температур были приобретены для комплекса нейтронографических установок ИН-06 печь, позволяющая проводить измерения до 1000 С, и криостат до 10К.

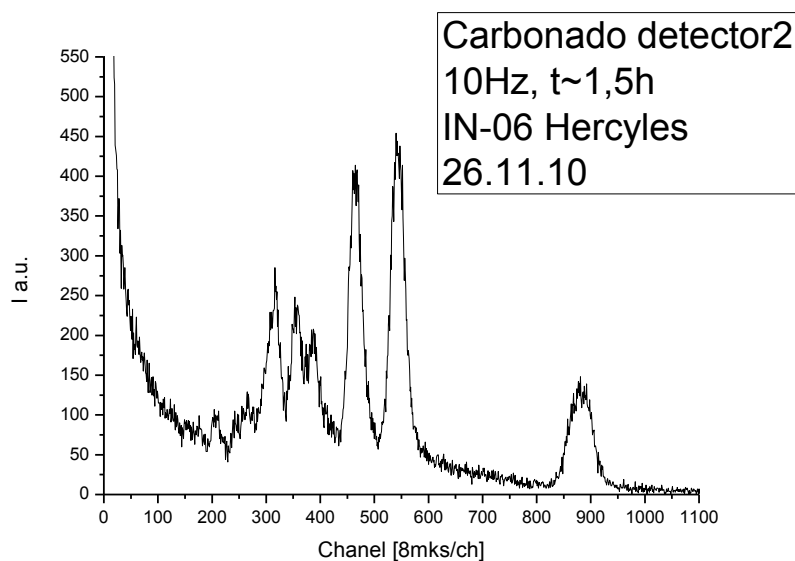


Рис. 3 Тестовый образец Carbonado

Данная нейтронографическая установка высокого давления создается совместно с РНЦ-КИ, ПИЯФ, ИФВД.

Технологическое обеспечение модели криогенного замедлителя нейтронов реактора ИБР – 2М

Ананьев В.Д., Беляков А.А., Богдзель А.А., Булавин М.В., Верхоглядов А.Е., Кулагин Е.Н., Куликов С.А., Кустов А.А., Мухин К.А., Петухова Т.Б., Сиротин А.П., Федоров А.Н., Шабалин Е.П., Шабалин Д.Е., Широков В.К.

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В план по модернизации реактора ИБР – 2М включен комплекс криогенных замедлителей нейтронов. Такой замедлитель представляет собой камеру, заполняемую рабочим телом в виде замороженных шариков из смеси ароматических углеводородов (мезитилен + *m*-ксилол) путем пневмотранспортировки потоком холодного гелия с температурой 30 – 40К. Криогенный шариковый замедлитель нейтронов представляет собой весьма сложную установку, требующую оптимизации режимов работы и проверки работоспособности всех его систем на специальном испытательном макете. Основной целью стенда является проведение экспериментов по загрузке камеры-имитатора замедлителя рабочим материалом, а также выбор оптимального режима работы. Загрузку камеры и работоспособность всего стенда обеспечивают основные технологические узлы и системы контроля: криостат с гелиевым циркулятором (газодувка), система контроля температуры, вакуумная система, дозирующее устройство, система детектирования шариков, система контроля за наполнением камеры-имитатора.

Фрактальный анализ шероховатости Mo/Si зеркал

Г. А. Вальковский¹, М. В. Байдакова¹

¹ Учреждение Российской академии наук Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

Интерес к многослойным системам (МС) Mo/Si обусловлен перспективностью их применения в качестве зеркал в литографической установке, использующей излучение с длиной волны $\lambda \approx 13.5$ nm [1]. Выбор материалов со значительной разницей плотностей (Mo и Si) обеспечивает высокий коэффициент отражения зеркал. Отличие реального коэффициента отражения от теоретически возможного объясняется структурным несовершенством МС. Например, шероховатость внутренних интерфейсов приводит к дополнительному диффузному рассеянию при рабочей длине волны.

Ранее было показано [2], что крупномасштабная шероховатость (с латеральными размерами L большими λ) главным образом наследуется от подложки, тогда как мелкомасштабная ($L \leq \lambda$) определяется процессом роста. Последняя хорошо описывается в рамках фрактального подхода, поскольку интерфейсы на таких масштабах можно считать само-аффинными. Тогда основной величиной, характеризующей поведение шероховатости, является фрактальный параметр шероховатости интерфейсов H ($H=3-D$, где D – фрактальная размерность).

В работе изучаются две серии зеркал, выращенных при различных технологических условиях. Малоугловые кривые качания, полученные в компланарной геометрии, несмотря на различие формы распределения диффузного рассеяния для образцов двух серий, являются неинформативными с точки зрения определения параметра H . Нечувствительность к фрактальному параметру объясняется наличием ограничения компланарной геометрии в измерении латеральной компоненты волнового вектора [3]. Использование некомпланарной геометрии, реализованной на источнике синхротронного излучения, позволило нам определить фрактальный параметр для зеркал обеих серий. Зеркала, первой серии имеют $H \approx 1$, что соответствует механизму поверхностной диффузии, доминирующему в процессе роста [2]. В работе [2] также сообщалось, что такой механизм характерен для наличия поликристаллического текстурирования. Тогда как для зеркал второй серии $H \approx 0.4$, что отвечает преобладающему механизму – «evaporation-recondensation» (испарение-переконденсация).

Полученные результаты хорошо согласуются с результатами методов рентгеновской дифракции (РД) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Так РД выявила наличие сильно выраженной текстуры для образцов первой серии ($H \approx 1$), в отличие от образцов второй серии ($H \approx 0.4$), для которых слои Mo рентгеноаморфные. ПЭМ показала, что в образцах первой серии присутствуют поликристаллические блоки Mo, ограниченные в латеральном направлении. В докладе обсуждается связь фрактального параметра с качеством Mo/Si зеркал.

1. B. Wu, A. Kumar, J. Vac. Sci. Technol. B **25**, 1743 (2007).

2. D.G. Stearns, D.P. Gaines, D.W. Sweeney, E.M. Gullikson, J. Appl. Phys. **84**, 1003 (1998).

3. T. Salditt, T.H. Metzger, Ch. Brandt, U. Klemradt and J. Peisl Phys. Rev. B, **54**(8), 5860 (1996).

Радиационная интроскопия веществ, материалов и изделий высоких технологий

Е.С. Коваленко, В.А. Соменков

НИИ «Курчатовский институт», Москва

Разработан ряд нетрадиционных нейтроно-синхротронных методик, включающих методики рефракционного, дифракционного и фазового контраста, а также микродифракцию на поли- и монокристаллах, рефлектометрию и малоугловое рассеяние. На этой основе на реакторе ИР-8 начато создание нейтронооптического комплекса экспериментальных установок, использующих белое, фильтрованное и монохроматическое нейтронное излучение. Разработаны и созданы прототипы установок и проведены эксперименты для диагностики веществ, материалов и изделий высоких технологий для широких областей применения в интересах атомной, аэрокосмической и оборонной промышленности. Изучено строение и технологические дефекты в моно и поликристаллических турбинных лопатках, сварных швах, микро и макротопливных композициях, композитных и монокристаллических сверхпроводниковых материалах. Исследованы возможности нейтронных методов для изучения био- и геоматериалов и метеоритного вещества. На основе полученных данных обсуждаются место и возможности нейтронной интроскопии в сравнении с другими методами лучевой диагностики.

Разработка позиционно-чувствительного монитора тепловых нейтронов

Д. С. Ильин, Д.С. Колотушкин

ПИЯФ РАН

Современные высокопоточные источники нейтронов (ПИК (ПИЯФ, Россия); HFIR (ORNL, США); HFR (ILL, Франция)), как стационарные, так и импульсные, для проведения исследований на выведенных нейтронных пучках нуждаются в оснащении специализированными детекторами, которые способны обеспечить непрерывное измерение интенсивности и профиля нейтронного пучка. Используемый для такой задачи детектор называется монитором.

Объектом разработки является позиционно-чувствительный детектор с высокой трансмиссией нейтронов (>95%), предназначенный для измерения интенсивности и пространственного распределения потока нейтронов.

В качестве базовой конструкции выбрана многопроволочная пропорциональная камера, что обусловлено:

- высокой эффективностью регистрации,
- низкой чувствительностью к фоновому гамма-излучению,
- хорошим пространственным разрешением,
- широкой апертурой и стабильностью рабочих характеристик.

Для регистрации потоков $I < 10^5$ н/(см²·с) предлагается использовать газовую смесь ³He/CF₄, для регистрации потоков $I > 10^5$ н/(см²·с) – газовую смесь N₂/CF₄.

С использованием методов компьютерной симуляции на основе пакетов GARFIELD¹ и SRIM² проведены оценки пространственного разрешения и эффективности детектора.

Ожидаемое пространственное разрешение Δx монитора тепловых нейтронов для выбранных рабочих газовых смесей:

50 mbar ³He + 950 mbar CF₄, $\Delta x = 3.1$ мм;

50 mbar N₂ + 950 mbar CF₄, $\Delta x = 4.1$ мм ;

- эффективность регистрации тепловых нейтронов

для газовой смеси ³He/CF₄: $\varepsilon = 0.8\%$ (1.8Å), $\varepsilon = 1.3\%$ (3Å), $\varepsilon = 4.0\%$ (9Å);

для газовой смеси N₂/CF₄: $\varepsilon = 3E-4 \%$ (1.8Å), $\varepsilon = 5E-4 \%$ (3Å), $\varepsilon = 14E-4 \%$ (9Å)

Для съема сигналов предлагается использовать метод съема информации на линию задержки. Это позволит обеспечить достаточное быстродействие детектора при минимальном количестве каналов регистрирующей электроники.

1. Garfield – simulation of gaseous detectors, <http://consult.cern.ch/writeup/garfield/>

2. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter, <http://www.srim.org/>

Интерференция полей переходного излучения электрического заряда и магнитного момента

А. С. Коньков, А. П. Потылицын, В. А. Сердюцкий.

Физико-технический Институт, Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет, 634050, Россия, Томск, пр. Ленина 30

В последние годы прогресс ускорительной техники позволяет получать и ускорять сгустки поляризованных электронов длиной менее 100 мкм. Известно, что такие сгустки излучают когерентно через любой механизм спонтанного излучения [1] на длинах волн, сопоставимых с длиной сгустка.

Поэтому необходима детальная проработка различных излучательных механизмов (для начала в одночастичном приближении) с точки зрения возможности их использования для детектирования когерентного излучения поляризованных пучков.

В квазиклассическом приближении будем рассматривать переходное излучение (ПИ) поляризованных электронов (позитронов) как излучение точечного заряда и спинового магнитного момента электрона.

Для определения явного вида интерференционного слагаемого и условий его существования используется метод изображений в формализме В.Е. Пафомова [2].

По результатам работы установлено, что интерференция возможна лишь в поглощающих средах, т.е. в материалах, имеющих отличную от нуля мнимую часть диэлектрической проницаемости, при поперечной относительно вектора скорости ориентации магнитного момента.

Согласно полученной оценке, в случае выхода электрона с энергией $E = 5 \text{ MeV}$ (Лоренц-фактор $\gamma = 10$) из титановой мишени в вакуум для энергии фотонов 454 eV (мягкий рентген)[3,4] относительный вклад в ПИ системы заряд – магнитный момент за счёт интерференции составляет величину $\sim 10^{-3}$, а от магнитного момента – 10^{-6} .

Таким образом, полученная асимметрия процесса (интерференционное слагаемое) на порядок меньше, чем в моттовском поляриметре, однако вероятность ПИ на несколько порядков превышает вероятность моттовского рассеяния. Следовательно, ПИ можно использовать для разработки поляриметров релятивистских частиц.

1. А.П. Потылицын, Излучение электронов в периодических структурах, Томск: ТПУ, 2009.
2. В.Е. Пафомов, Труды ФИАН **XLIV**, 28 (1969).
3. B.L. Henke, E.M. Gullikson and J.C. Davis, At. Data Nucl. Tables **54**, 181 (1993).
4. W. Knulst, M.J. van der Wiel, O.J. Luiten, Applied Phys. Lett. **83**, 4050 (2003).

Развитие теории дифракционного излучения для поверхностей конечной проводимости

К.О. Кручинин¹, Д.В. Карловец¹

¹ НИ ТПУ, 634050, Россия, Томск, пр. Ленина 30

В работе получено решение задачи о дифракционном излучении, возникающем при наклонном пролете точечной заряженной частицы вблизи тонкого прямоугольного экрана конечных размеров, обладающего произвольной проводимостью и частотной дисперсией. Также получено решение задачи об излучении, возникающем при наклонном пролете частицы через прямоугольную щель в экране конечных размеров и конечной проводимости. Решения найдены методом «поляризационных токов», недавно предложенным в работе [1].

Полученные выражения для спектрально-угловой плотности излученной энергии описывают дифракционный и черенковский механизмы излучения. В частном случае нулевой ширины щели полученные результаты совпадают с таковыми теории переходного излучения в пластинке.

Исследованы характеристики излучения в зависимости от действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости экрана. Проведен последовательный учет возможных многократных переотражений излучения внутри экрана, и анализируется важность учета переотражений для различных значений диэлектрической проницаемости.

1. Карловец Д.В., Потылицын А.П. // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. С. 368

Концепция модернизации малоуглового спектрометра на реакторе ИБР-2

С. А. Маношин¹, Р. Эрхан^{2, 1}, А.В. Белушкин¹, Н. В. Замфир²

¹ Лаборатория нейтронной физики им. Франка, Объединенный институт ядерных, Дубна, Россия

² Хория Холубей национальный институт ядерной физики и инженерии, Бухарест Румыния.

Предлагается для рассмотрения новая конфигурация малоуглового спектрометра на реакторе ИБР-2 с комбинированным замедлителем (теплый + холодный).

Первой особенностью предлагаемой установки является использование специальной neutron extraction system. Эта система состоит из двух каналов и произведет суммирование спектров с холодного и теплого замедлителя. Проведена оптимизация этой системы моделированием методом Монте-Карло программным комплексом VITESS [1]. После этой системы будет установлен собственно сам спектрометр.

Второй особенностью предлагаемой установки будет применение двух коллимационных систем, расположенных друг за другом. Первая система: нейтронно-оптическая: расходящийся нейтронный пучок (возможно использование эллиптического). Вторая коллимационная система: многощелевая (сходящаяся) система: multiple pinhole collimation. Эта система также частично аналитически оценена, промоделирована и оптимизирована программным комплексом VITESS с необходимыми локальными дополнениями.

Моделирование и оптимизация показали хорошие параметры нового спектрометра, в котором, в отличие от предшествующего инструмента, максимальный размер образца может быть увеличен при необходимости до 4x4 см при меньших значениях Q_{min} .

VITESS software package:

http://www.helmholtzberlin.de/forschung/grossgeraete/neutronenstreuung/projekte/vitess/index_de.html

Методика рефлектометрии: безщелевая схема с двумя совершенными кристаллами-монокроматорами

С.В. Метелев

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Обсуждается возможность использования для рентгеновской рефлектометрии и дифрактометрии схемы с двумя монокроматорами на плоских совершенных кристаллах. Один из них будет формировать пучок, другой перехватывать и направлять в детектор. Предлагается обойтись без щелей формирования пучка.

Мотивация такого решения: формирование пучка щелями приводит к удлинению конструкции и как следствие большим потерям интенсивности в воздухе, сложной юстировке, и при этом фактически избыточна.

Идея метода. Первое плечо прибора включает трубку и монокроматор. Монокроматор, освещенный изотропно расходящимся излучением рентгеновской трубки, в пределах своей апертуры разложит его в спектр. Обычно для измерений используют линии $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$. Каждая линия сформирует в своём брегговском направлении луч сечением $\sim 10 \times 0.1 \text{ мм}^2$ и расходимостью равной мозаичности кристалла. Юстировкой один из лучей направим на ось вращения образца.

Второе плечо, на котором установлены детектор и анализатор, как целое вращается вокруг оси прибора. Юстировкой анализатора обеспечим отражение выбранного на первом этапе луча в детектор в прямом пучке. Поскольку при вращении плеча как целого угол между анализатором и радиусом сохраняется, сохраняется и брегговское условие для выбранной длины волны.

При измерении в некотором диапазоне углов близ зеркального отражения должен наблюдаться пик интенсивности, с максимумом в зеркальной области. Площадь этого пика пропорциональна полной интенсивности отражения в данном направлении (в классической схеме «при открытой щели»), ширина характеризует как шероховатость, так и искривление зеркала.

При работе с рентгеновской трубкой такая схема выгодна ещё и потому, что мозаичность совершенных кристаллов (минимальная доходит до $11''$) почти совпадает с шириной обеих K_{α} линий, которая в угловых единицах у Ni, Cu, Zn составляет $\sim 15''$ при отражении от Si(111). То есть используется вся ширина альфа-линии и, с другой стороны, нет «лишней» расходимости. Ещё одним преимуществом является выведение трубки из прямого пучка, что должно уменьшить фон.

Идея анализатора используется, например, в многофункциональном рефлектометре [1], в котором формирование пучка происходит с помощью коллиматора, без монокроматизации, а регистрация производится с помощью нескольких плёночных (50 мкм толщиной) монокроматоров пиролитического графита, настроенных на K_{α} и K_{β} линии источника, каждая из которых отражает одну из линий спектра в свой детектор и пропускает основной пучок далее. Этот прибор может работать в режимах рефлектометра, дифрактометра, рефрактометра, малоугловой установки и кроме того, облучение образца «белым» пучком даёт возможность применять флуоресцентный анализ состава.

1. А.Турьянский, Н.Герасименко, И.Пиршин, В.Сенков, Многофункциональный рентгеновский рефлектометр для исследования наноструктур, Наноиндустрия, выпуск №5, (2009)

Новые возможности наблюдения перемагничивания тонких ферромагнитных плёнок после технического усовершенствования феррометра

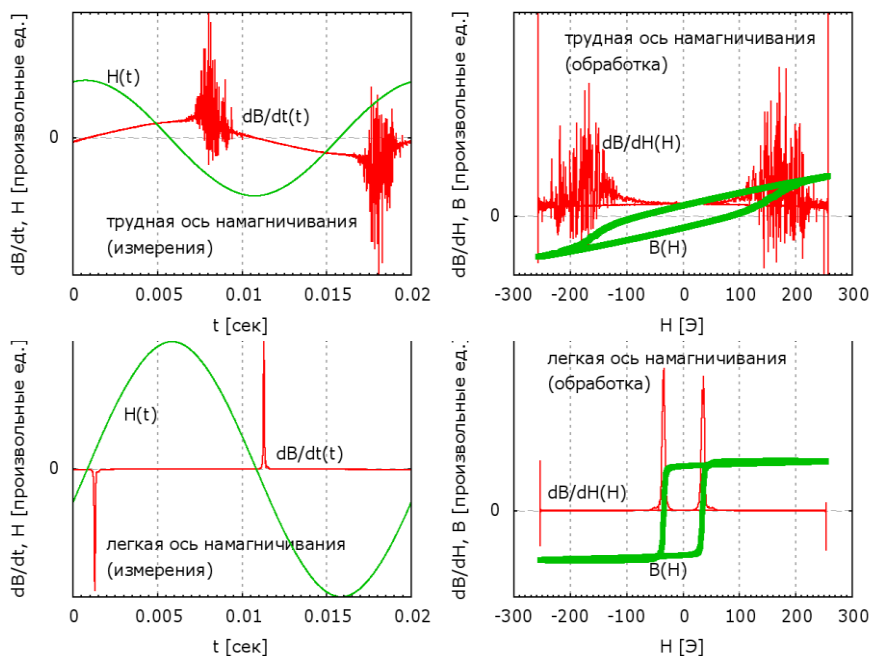
С.В. Метелев

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Феррометр предназначен для наблюдения петель гистерезиса ферромагнитных плёнок и определения их характеристик и представляет собой две катушки Гельмгольца, которые создают однородное магнитное поле максимальной амплитудой 250 Э осциллирующее с частотой 50 Гц. Измерительная часть состоит так же из двух катушек, расположенных в однородной области поля, оси которых расположены перпендикулярно направлению намагничивающего поля, на расстоянии 14 мм друг от друга. При измерениях образец (ферромагнитная плёнка) кладётся между измерительными катушками, при намагничивании образца на его краях появляется перпендикулярная плоскости образца компонента, которая генерирует сигнал в измерительных катушках. Величина сигнала пропорциональна изменению (производной) индукции.

Старая регистрирующая система включала в себя 8-битную АЦП, медленную и часто недостаточную по диапазону. Удалось для записи сигнала использовать компьютерную звуковую карту ESI Juli@, которая имеет 24-битную АЦП, способную работать на частоте до 196 кГц, диапазон измерений 0-10В, причём сигнал подаётся непосредственно с измерительных катушек на линейный вход.

На некоторых образцах был обнаружен интересный эффект, который по-видимому следует интерпретировать как эффект Баркгаузена---отчётливо видная на дифференциальном сигнале шумовая компонента, особенно выраженная при измерениях



вдоль трудной оси. В интегральном виде (на петле гистерезиса) эффект малозаметен, проявляется в её ступенчатости. Приведены графики измерений и построенных на основе измеренных данных, петли гистерезиса и дифференциального сигнала. Образец $Co_{68}Fe_{32}$, толщиной 2.5 мкм, на стеклянной подложке.

Численное моделирование энергетических спектров термоиндуцированных “запрещенных” отражений в вюрцитах ZnO и GaN

А.П.Орешко¹, Е.Н.Овчинникова¹, Г.Т.Мулявко¹, В.Е.Дмитриенко²

¹ МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет

² Институт кристаллографии РАН им. А.В.Шубникова

Резонансная дифракция рентгеновского излучения (**РИ**) широко используется в настоящее время для изучения структурных и магнитных свойств кристаллов и является методом, позволяющим изучать как дальний, так и ближний порядок в кристалле. Резонансная дифракция возникает при условии, что длина волны падающего излучения близка к краю поглощения какого-либо элемента, входящего в состав кристалла, то есть когда энергии рентгеновских квантов близки к энергии ионизации одного из основных атомных уровней.

В непосредственной близости от края поглощения (~50 эВ) возникает анизотропия резонансного рассеяния, что может приводить к появлению так называемых “запрещенных” отражений, отсутствующих вдали от краев поглощения [1].

Резонансная спектроскопия “запрещенных” рефлексов получает в последние годы все большее распространение, так как этот метод обладает уникальными возможностями при исследовании структуры и свойств твердых тел. В отличие от других резонансных методов, изучение свойств “запрещенных” рефлексов дает информацию о локальных атомных конфигурациях, не усредненную по элементарной ячейке. Возможность выделить рефлекс, вклад в которые дают определенные резонансные члены, позволяет изучать изменение параметров, связанных только с резонансными атомами, тогда как остальные элементы не дают никакого вклада.

В настоящее время экспериментально обнаружены аномальные температурные зависимости интенсивности “запрещенных” отражений в оксиде цинка и нитриде галлия со структурами вюрцита. Обе температурные зависимости имеют подобный вид и, по всей видимости, обусловлены интерференцией температурно-независимого (диполь-квадрупольного) и температурно-зависимого (диполь-дипольного) вкладов в тензорный атомный рассеивающий фактор.

В данной работе проводится численное моделирование энергетических зависимостей “запрещенных” рефлексов в *w*-ZnO и *w*-GaN, основанное на предварительном определении мгновенных атомных конфигураций методами *ab initio* молекулярной динамики. Моделирование проводилось при помощи программных комплексов *CPMD* (www.cpmc.org), *ABINIT* (www.abinit.org) и *FDMNES* (<http://www.neel.cnrs.fr/>) на суперкомпьютерном комплексе МГУ (<http://parallel.ru/cluster/>)

Полученные результаты моделирования энергетических зависимостей термоиндуцированных “запрещенных” рефлексов в *w*-ZnO и *w*-GaN находятся в хорошем соответствии с экспериментальными результатами, что подтвердило справедливость указанного выше подхода, позволило определить псевдопотенциалы, адекватно описывающие выше названные структуры, величины тепловых смещений атомов и изменений параметров решетки, и указало, что “запрещенные” брэгговские отражения могут дать информацию о влиянии тепловых колебаний атомов на электронные свойства кристалла.

Работа выполнена при поддержке грантами РФФИ 09-02-01293-а и 10-02-00768-а.

Структурная и магнитная хиральность поликристаллических образцов MnSi

*Н.М. Потапова¹, В.А. Дядькин¹, Е.В. Москвин¹, С.В. Малеев¹, Д. Мензель², Х. Эккерлебе³,
С.В. Григорьев¹*

¹*Петербургский институт ядерной физики РАН, 188300 Гатчина, Россия*

²*Technische Universität Braunschweig, 38106 Braunschweig, Germany*

³*Helmholtz Zentrum Geesthacht, 21502 Geesthacht, Germany*

В докладе представлены исследования поликристаллических образцов MnSi, являющихся геликоидальными кубическими магнетиками. Эти соединения кристаллизуются в кубическую нецентросимметричную структуру с пространственной группой R_{213} . Магнитная конфигурация представляет собой спиновую спираль с периодом от 180 Å, которая образуется в результате баланса двух взаимодействий: изотропного симметричного ферромагнитного обмена и антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мория.

Шесть различных поликристаллических образцов MnSi были получены быстрым охлаждением расплава после роста монокристалла с использованием метода Чохральского. Недавно было показано, что магнитная хиральность этих магнитных систем определяется кристаллографической хиральностью. Следовательно, определяя степень магнитной хиральности, можно получить информацию о хиральности структуры. С помощью малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов показано, что хиральность магнитной (кристаллической) структуры поликристаллических образцов значительно меняется на масштабе 2-3 мм, от отрицательных величин (~ -0.4) к положительным ($\sim +0.4$), демонстрируя присутствие областей с высокой степенью энантиомерного избытка. Средняя хиральность образца отклоняется от нулевого значения, и это коррелирует с кристаллографической хиральностью кристалла зародыша, используемого в методе Чохральского.

Работа выполнена в рамках Федеральной научно-технической программы (ГК 02.740.11.0874) и частично за счет РФФИ проекта 10-02-01205-а.

Взаимосвязанность недискретных процессов формирования множества элементарных частиц

А.А. Тюняев¹

¹ Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

Модель «Периодическая система элементарных частиц» [1] предложена для объяснения устройства мира элементарных частиц (ЭЧ). Поскольку «три величины \hbar , e , m_e позволяют получить размерности всех физических величин» [2], в модели каждая ЭЧ характеризуется: электрический заряд η , масса m , спин J , используемыми на основе троичной логики ($1 = m_e$), ($1 = e^-$), ($1 = \frac{1}{2}J$). Формулы ЭЧ строятся по схеме: $e^-(1;1;-1)$, где: e^- – обозначение ЭЧ, включение (1) или невключение (-1) соответствующего параметра в системе m_e, J, e . Выделение из физического вакуума его резона $\rho^0(0;0;0)$ на сегодняшний день является нерешаемой задачей. Однако обратившись к математической модели вещественных чисел и воспользовавшись её аксиомами, мы получим три точки: $-1 \neq 0 \neq -1$ (рождение пары [4]). Из этих точек сформируем векторную (полярную) систему координат. В ней есть угол ϕ и два луча $r_{1,2} = [0;|\pm 1|)$, соответствующие двум разнонаправленным единичным векторам – фотонам – квантам движения [4] – $\gamma^+(0;+1;0)$ и $\gamma^-(0;-1;0)$, а также пара разделённых электрических зарядов – $\eta^-(0;0;-1)$, $\eta^+(0;0;+1)$ и нулевая точка $\rho^0(0;0;0)$. Реакция известна, как $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$. Известен также эффект Казимира. За рождающимися парами фотонами следом рождается пара разноимённых электрических зарядов, которые с учётом их движения выступают уже как четвёрка новых элементарных частиц, у которых заполнены по два кластера: U-магнитон $\delta^-(0;+1;-1)$, S-магнитон $\delta^+(0;+1;+1)$, чёрный U-магнитон ${}^b\delta^-(0;-1;-1)$, чёрный S-магнитон ${}^b\delta^+(0;-1;+1)$.

Эта часть модели выглядит так: в условиях глубокого физического вакуума существуют только нулевые резоны – кванты пространства (вакуума) – ρ^0 . В нём самопроизвольно возникают флуктуации, в которых происходит разделение электрических зарядов η^\pm и их трансформация в пару разлетающихся магнитонов δ^\pm – квантов электромагнитного поля. По мере разбухания такой флуктуации под действием пары фотонов γ^\pm , она достигает своего предельного размера, и после этого формируется пара слетающихся магнитонов δ^\pm . В момент их соприкосновения происходит аннигиляция пары. Следующим актом образуется пара комплементарных ЭЧ: «чёрный электрон» – «+5» – ${}^b e^- (+1;-1;-1)$ и «виртуальный позитрон» – «-5» – ${}^v e^+ (-1;+1;+1)$ [3]. То есть в резоне физического вакуума произошло разделение электрических зарядов, они, разлетаясь от нулевого центра, привели к появлению массивных частиц семейства электронов и позитронов, то есть «согласно современным теоретическим представлениям, природа массы тесно связана с природой физического вакуума» [3]. Все представленные ЭЧ не являются дискретными. Все ЭЧ являются проявлениями того или иного свойства в пределах той или иной системы координат и при некотором положении наблюдателя. Вся система в целом ведёт себя как конденсированная среда, выступающая в физических взаимодействиях единым целым.

1. Тюняев А.А., Периодическая система элементарных частиц // Организмика – фонд. основа всех наук. Том III: Физика / Под ред. д. ф.-м. н., проф., академика РАЕН О. А. Хачатуряна. – М.: Спутник+, 2009.
2. Окунь Л.Б., Фундаментальные константы физики. УФН 161 (1991). – С. 177 – 194.
3. Окунь Л.Б., Что такое масса? (Из истории теории относительности) / В сборнике: Исследования по истории физики и механики. – М.: Наука. - 2008. - С. 236 – 253.
4. Окунь Л.Б., Теория относительности и теорема Пифагора. УФН. 178 (2008). - С. 653 – 663.

Исследование динамики решетки CdSe и твердого раствора CdS_{0,91}Se_{0,09}

Е. И. Чернышева¹, С. Б. Вахрушев², Р. Г. Бурковский¹

¹ Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет

² Физико-Технический Институт им. Иоффе РАН

Полупроводники на базе кадмия принадлежат к II-VI соединениям, для которых характерна широкая запрещенная зона, соответствующая сине-зеленой части видимого спектра. Благодаря пьезоэлектрическим свойствам и возможности управления их спектральными параметрами при изменении размеров, структуры кристаллов и параметров подложки, кадмий-содержащие полупроводники представляют большой интерес для современной оптоэлектроники [1,2,3]. Однако, на сегодняшний день структура их фононного спектра изучена недостаточно хорошо, поскольку традиционное для исследования фононов нейтронное рассеяние невозможно применить напрямую (ядра кадмия ¹¹³Cd, составляющего около 12% натуральных кристаллов Cd-содержащих полупроводников, активно поглощают нейтроны, и для проведения нейтронного эксперимента необходимо выращивать большие кристаллы с использованием непоглощающих нейтроны изотопов ¹¹⁴Cd или ¹¹⁶Cd). На данный момент опубликованы данные всего лишь двух экспериментов по нейтронному рассеянию на образцах CdS и CdSe [4,5]. Альтернативным методом исследования фононных дисперсионных кривых является методика неупругого рассеяния синхротронного излучения (СИ), позволяющая успешно исследовать динамику решетки сред, исследование которых с помощью нейтронов затруднено или невозможно.

Данная работа посвящена исследованию фононных дисперсионных кривых смешанного соединения CdS_{0,91}Se_{0,09} и CdSe, имеющих гексагональную решетку типа вюрцит, в направлениях высокой симметрии [x,0,0] и [0,0,z] (CdSe – в направлении [0,0,z]) методом неупругого рассеяния СИ. В ходе работы проведены оценочные расчеты динамики решетки для соединений CdS и CdSe, являющихся предельными случаями твердого раствора CdS_{1-x}Se_x при x=0 и x=1. Результаты моделирования хорошо согласуются с данными нейтронного рассеяния [4,5]. На экспериментальных фононных дисперсионных кривых CdS_{0,91}Se_{0,09} одновременно присутствуют оптические моды колебаний, характерные для CdS и CdSe в отдельности. Подобная картина наблюдается и для других трехкомпонентных соединений [6] и носит название двухмодового поведения, зарегистрированного с помощью неупругого рассеяния СИ впервые в данной работе.

1. Su-Huai Wei et al. Journal Of Applied Physics Volume 87, No. 3 (2000)
2. M.Thambidurai et al. J Mater Sci 45:3254–3258 (2010)
3. A.M.Alcalde, Weber. Semicond. Sci. Technol. 15 (2000)
4. A.Debernardi et al. Solid State Communications Vol. 103, No. 5 (1997)
5. F.Widulle. Physica B 263-264 (1999)
6. A.S.Barker, Sievers. Rev. Mod. Phys., Vol. 47 Suppl. No. 2 (Fall 1975)

Нейтронное многоволновое спиновое эхо

Ю. О. Четвериков¹, В. В. Пиядов¹, Л. А. Аксельрод¹, А. А. Сумбатян¹, С.В. Григорьев¹

¹ Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина

Экспериментально исследован режим многоволновой интерференции нейтронного спинового эхо. В этом режиме поляризованная нейтронная волна многократно расщепляется в магнитном поле резонансных катушек, что приводит к появлению дополнительной модуляции спин эхо сигнала, вызванной интерференцией "классической" и "резонансной" спин-эхо мод. Приведены простые аналитические выражения, хорошо описывающие экспериментальный результат. Показано, что многоволновая часть спин-эхо сигнала возникает в случае, когда в радиочастотных катушках "резонансного" спин-эхо прибора вероятность спинового переворота $\rho < 1$. Обсуждается возможность использования режима нейтронного многоволнового спинового эхо для исследования корреляционных функций высоких порядков - пространственных и временных корреляций трех и более частиц.

Работа выполнена в рамках Федеральной научно-технической программы (ГК 02.740.11.0874) и частично за счет РФФИ проекта 09-02-01023-а.

Секция «Нанотехнологии»

Термоэлектрическое увеличение фононов в квантовой проволоке в квантующем магнитном поле

Р.Г. Абасзаде¹, Г.Б. Ибрагимов¹

¹Институт Физики НАН Азербайджана

Исследование кинетических и оптических эффектов в размерно-ограниченных системах является важной задачей [1,2], поскольку особенности закона дисперсии зонных носителей делает такие квантовые системы перспективными для создания приборов с уникальными свойствами. Возможность изготовления квантовых структур субмикронных размеров привлекает значительный интерес к исследованию термоэлектрических эффектов в наноструктурах. Неравновесность фононного распределения, связанная с наличием градиента температуры, может при определенных условиях играть существенную роль в термоэлектрических явлениях.

В этой работе развита теория для фононной неустойчивости в квантовой проволоке (КП) с параболическим потенциалом при наличии температурного градиента. Кинетическое уравнение для функции распределения акустического фонона ($N_q(t)$) имеет вид [3]

$$\frac{dN_q(t)}{dt} = \gamma_q N_q - \left(\frac{N_q(t) - N_q^0}{\tau_q} \right),$$

где τ_q - время релаксации акустическими фононами, которое описывается формулой Ландау-Румера, N_q^0 - равновесная функция распределения фононов и γ_q - скорость увеличения фонона из-за столкновения с электронами при наличии градиента температура.

Фононы при этом считаются не подверженными влиянию неоднородностей, вызывающих появление квантовых ям для электронов, т.е. это обычные фононы в трехмерном кристалле. Рассмотрено два случая: образец включен в замкнутую и разомкнутую электрическую цепь.

Показано, что коэффициент термоэлектрического увеличения фононов возрастает с уменьшением поперечного сечения КП. Получено, что скорость увеличения фонона (γ_q) в КП больше, чем в объемном полупроводнике. Уменьшение “мерности” квантовой системы, т.е. увеличение локализации зонных носителей, приводит к возрастанию величины скорости увеличения фонона.

Получено, что скорость увеличения фонона в КП в присутствии магнитного поля увеличивается. Это связано с тем, что в магнитном поле носители в КП сильнее локализованы, поэтому процессы рассеяния носителей на фононах происходят более активно.

1. Ibragimov G.B. J.Phys.: Condens.Matter 15, 1427 (2003).
2. Ibragimov G.B. Phys.Stat.Sol.(b) 236, 112 (2003).
3. Nunes O.A.C. J.Appl.Pys.59(2), 651 (1985).

Исследования биогенных частиц продуцируемых бактериями *Klebsibella oxytoca* методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей

М.Балашою^{1,3}, Л. В. Ангел^{1,2}, А.В.Рогачев¹, Д.В. Соловьев¹, А.И. Куклин¹, Г.М. Арзуманян¹
Р.С. Исхаков⁴, Л.А. Ищенко⁵, С.В. Столяр^{4,5}, Ю.Л. Райхер⁶

¹ Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна

² Институт Химии при Академии Наук Молдовы, Кишинев

³ Национальный институт физики и ядерной инженерии им. Х. Хулубея

⁴ Институт Физики им Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск

⁵ Сибирский федеральный университет, Красноярск

⁶ Институт механики сплошных сред Уральского отделения РАН, Пермь

В последние годы к наночастицам и материалам на их основе, растет интерес в основном из-за их необычных физических характеристик, отличающихся от свойств соответствующих “BULK” материалов. В настоящее время разработан ряд физико-химических методов синтеза наночастиц, позволяющих получать наночастицы различного состава.

Наночастицы могут производиться и в биологических системах. Многие живые организмы, например, некоторые бактерии и простейшие организмы, производят минеральные вещества, которые состоят из структур наноразмерного диапазона.

Было выявлено, что бактерии *Klebsibella oxytoca* продуцируют наночастицы ферригидрита различных форм в результате изменения условий выращивания. Полученные биогенные частицы были исследованы методом мессбауэровской спектроскопии, методом ферромагнитного резонанса[1,2,3]. Сухие образцы выделенных частиц были исследованы методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и сканирующей электронной микроскопией [3,4].

В данной работе приводятся результаты исследования методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей биогенных наночастиц, синтезированных в процессе жизнедеятельности бактерий *Klebsibella oxytoca*. Таким образом, были изучены структурные свойства и стабильности в водном растворе.

1. Ю.Л. Райхер, В.И. Степанов, С.В. Столяр, и др. *Физика твердого тела*, том 52, No 2 (2010)277-283

2. С.В. Столяр, О.А. Баюков, Ю.Л. Гуревич, Р.С. Исхаков, В.П. Ладыгина, *Известия РАН. Серия Физическая*, том 71, No 9 (2007)1310-1314

3. С.В. Столяр, О.А. Баюков, Ю.Л. Гуревич, и др. *Материаловедение. Наноструктуры и Нанотехнологии*, No 7 (2006)34-38

4. M. BalasoIU, S.V. Stolyar, R.S. Iskhakov et.al., *Romanian Journal of Physics* Vol 55, No.7-8 (2010)782-789.

5. M. BalasoIU, L.A. Ischenko, S.V. Stolyar, et.al., *Optoelectronics and Advanced Materials –Rapid Communications*, Vol. 4, No. 12, (2010) 2136-2139.

Поглощение света с участием продольных оптических фононов в полупроводниковых квантовых точках

А. С. Баймуратов

*Национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики
Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики*

Спектроскопия однофотонного поглощения ансамблями полупроводниковых квантовых точек является хорошо известным и наиболее часто применяемым методом исследования таких систем [1]. Полученные этим методом экспериментальные данные [2] и их теоретическая интерпретация [3] легли в основу физики квазиульмерных структур. Использование нестационарной разновидности метода ("накачка-зондирование") для изучения квантовых точек позволяет получать данные об их релаксационных параметрах и константах электрон-фононного взаимодействия [4], а применение стационарной разновидности – дает информацию об энергетическом спектре электронных возбуждений квантовых точек [5], в том числе и для их ансамблей с большим неоднородным уширением оптических переходов ("выжигание долгоживущих провалов" в неоднородно уширенном контуре поглощения [6]).

Несмотря на то, что спектроскопия однофотонного поглощения представляет собой хорошо разработанный метод исследования квантовых точек в его рамках до сих пор остаются важные разделы, требующие детального анализа. Один из таких разделов основан на процессе стационарного однофотонного поглощения с участием продольных оптических (LO) фононов в квантовых точках, изготовленных из полупроводниковых материалов с высокой степенью ионности (A_1B_7 , A_2B_6 и A_3B_5). Насколько нам известно, в настоящее время отсутствует последовательное теоретическое описание таких процессов, учитывающее недиагональную часть взаимодействия электрон-дырочных пар с LO-фононами. Настоящая работа является первым шагом, направленным на то, чтобы заполнить имеющийся пробел.

В ходе работы в общем виде была сформулирована модель электронной и колебательной подсистем квантовой точки, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем, вычислена вероятность поглощения фотона с рождением и испусканием LO-фононами, а также рассчитан коэффициент поглощения света для ансамбля идентичных квантовых точек и ансамбля точек различных размеров для случая нормального распределения и распределения Лифшица-Слезова.

1. Федоров А. В., Рухленко И. Д., Баранов А. В., Кручинин С. Ю. Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. СПб.: Наука, 2011
2. Екимов А. И., Онущенко А. А., ФТП, **16**, 1215 (1982)
3. Эфрос А. Л., Эфрос А. Л., ФТП, **16**, 1209 (1982)
4. Harbold J. M., Du H., Kraussand T. D., Cho K.-S., Murray C. B., Wise F. W., Phys. Rev. B., **72**, 195312 (2005)
5. Matsumoto T., ichi Suzuki J., Ohnuma M., Kanemitsu Y., Masumoto Y., Phys. Rev. B., **63**, 195322 (2001)
6. Федоров А. В., Кручинин С. Ю. Опт. и спектр. **97**, 420 (2004)

Нанокристаллизация в аморфных алюминиевых сплавах системы Al-Ni-Fe-La при интенсивной пластической деформации сдвигом под давлением 4...10 ГПа

Н.Д. Бахтеева¹, А.Л. Васильев², Е.В. Тодорова¹

¹Учреждение Российской академии наук Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН,

²Учреждение Российской академии наук Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН

Интерес к изучению механизма нанокристаллизации, развивающейся в аморфных алюминиевых сплавах, обусловлен полученными в ряде работ по аморфно-нанокристаллическим сплавам уникально высокими механическими характеристиками: $\sigma_b=950...1300$ МПа, δ до 4 % (Inoue А. и др.). Наиболее перспективными среди алюминиевых сплавов с точки зрения повышения эксплуатационных и технологических характеристик являются сплавы с содержанием алюминия 80-90 ат.%, легированные переходными и редкоземельными металлами, которые образуют с алюминием интерметаллидные соединения. К такому классу материалов относятся исследуемые в работе сплавы с постоянным содержанием алюминия 85 ат. %, легированные Ni, Fe и La в различных соотношениях. Изысканию способов получения оптимальной аморфно-нанокристаллической структуры и изучению механизма нанокристаллизации, развивающейся при интенсивной пластической деформации (ИПД) сдвигом под давлением 4...10 ГПа, посвящена настоящая работа.

Установлено, что в сплавах после высокоскоростной закалки со скоростью охлаждения 10^6 К/с формируется рентгеноаморфная структура. Результаты электронно-микроскопического исследования показали, что в сплавах независимо от их легированности при ИПД 4...10 ГПа при комнатной температуре образуется фрагментированная структура размером 10...20 нм. По данным энергодисперсионного анализа пограничные области такой структуры обогащены Ni и La, а центры фрагментов – Al, что связано с расслоением пересыщенной аморфной матрицы по типу спинодального распада на две аморфные составляющие, различающиеся по химическому составу. Наиболее существенна разница в содержании никеля: в границах его количество достигает 18-20 ат.% при средней легированности сплавов 7-9 ат.%. Кристаллизация с образованием нанокристаллических зерен интерметаллидов размером 3-6 нм при малых степенях деформирования начинается в границах фрагментов, их центральные области при этом остаются аморфными. Формируется структура типа «ожерелья». Экстремально малые размеры нанозерен свидетельствуют о высокой скорости их зарождения и малой скорости их роста. Методами рентгеноструктурного и электронно-микроскопического анализов установлено, что кристаллическая фаза, сформированная на начальных этапах кристаллизации, близка по межплоскостным расстояниям к интерметаллиду Al_3Ni . После максимальной степени деформации $e=7,0...7,5$ ($\varphi=360^\circ \times 6$) при ИПД под давлением 4...10 ГПа в сплавах формируется сложная многофазная аморфно-нанокристаллическая структура, в состав которой входят твердый раствор на основе алюминия в аморфном состоянии, кристаллический алюминий и кристаллические интерметаллиды $Al_{13}Fe_4$, Al_3Ni_2 , Al_3Ni , $LaAl_3$. При снижении давления начала кристаллизации смещается в область больших значений деформации. В указанном интервале параметров ИПД кристаллизация не завершается, формируется аморфно-нанокристаллическая структура с размером зерен 3-6 нм. При прочих равных условиях с повышением давления увеличивается объемная доля кристаллизации. Показано, что в сплавах после ИПД с критическими степенями деформирования при непрерывном нагреве происходит смена двухстадийной кристаллизации на одностадийную с повышением температуры ее начала на 60-70 °С. Увеличение термической стабильности обусловлено реализацией первой стадии кристаллизации при ИПД.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 10-03-00622-а.

Влияние адсорбции различных газовых сред на электропроводность углеродных наноматериалов

Т. И. Буряков¹, А. И. Романенко^{1, 2}, О. Б. Аникеева^{1, 2}, Е. Н. Ткачев^{1, 2}, В. Л. Кузнецов^{2, 3}, И. Н. Мазов^{2, 3}, К. В. Елумеева^{2, 3}

¹ Учреждение Российской Академии Наук Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН

² Новосибирский государственный университет

³ Учреждение Российской академии наук Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения РАН

В работе рассмотрено влияние адсорбции воздуха, кислорода, водорода, метана и брома на температурные зависимости электропроводности многослойных углеродных нанотрубок и углерода луковичной структуры.

Многослойные углеродные нанотрубки были синтезированы методом термохимического разложения углеродсодержащих соединений на поверхности металлического катализатора. Углерод луковичной структуры был получен термическим отжигом наноалмазов в вакууме. Измерения электропроводящих свойств осуществляли четырех-контактным методом. Перед напуском газовых сред образцы углеродных материалов откачивали до давления 10^{-4} Торр.

В ходе исследований было выявлено два типа адсорбатов. Бром химически адсорбировался на поверхность углеродных наноматериалов при комнатной температуре, приводя к увеличению электропроводности в несколько раз (в зависимости от времени адсорбции). С повышением температуры паров брома процесс модификации свойств ускорялся. После модификации углеродных наноматериалов бромом изменялся угол наклона кривых температурных зависимостей электропроводности, что связано со смещением уровня Ферми вглубь валентной зоны и увеличением концентрации дырочных носителей тока в образцах.

Воздух (азот), кислород, водород и метан физически адсорбировались на поверхность углеродных наноматериалов. При комнатной температуре напуск вышеуказанных газов в измерительный объем не приводил к изменениям электропроводящих свойств. С понижением температуры количество адсорбированного на поверхности газа увеличивалось, приводя к уменьшению электропроводности на несколько процентов, максимум которого достигался при температуре кипения напускных газов и составлял величину: воздух –3%, O₂ –5%, H₂ –1%, CH₄ –5%. Изменение электропроводящих свойств связано с уменьшением подвижности носителей тока, так как адсорбированный на поверхности газ является эффективным центром рассеяния носителей тока.

Таким образом, в работе рассмотрено влияние различных типов адсорбатов на электропроводящие свойства многослойных углеродных нанотрубок и углерода луковичной структуры. Показано, что бром химически адсорбируется на поверхность углеродных наноматериалов, приводя к многократному увеличению электропроводности, а воздух (азот), кислород, водород и метан физически адсорбируются, приводя к уменьшению электропроводности на несколько процентов.

Работа поддержана программой «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы № П1215, П2601.

Эволюция мезоструктуры сульфатированного диоксида циркония на разных стадиях термической обработки

*Н.Н. Губанова¹, В.К. Иванов², Г.П. Копица¹, А.Е. Баранчиков², С.В. Григорьев¹,
В.М. Гарамус³*

¹*Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина 188300, Россия*

²*Институт общей и неорганической химии, Москва 119991, Россия*

³*GKSS Research Centre, Geesthacht, Germany*

Сульфатированный диоксид циркония - перспективный суперкислотный катализатор, эффективность работы которого напрямую зависит от его химического и фазового состава, удельной площади поверхности частиц, а также от фрактальной размерности. Структура материала определяется условиями его синтеза, в значительной степени кислотностью среды осаждения и условиями температурной обработки.

Мезоструктура сульфатированных аморфных ксерогелей $ZrO_2 \cdot xH_2O$, а также продуктов их термического отжига исследована методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) в диапазоне переданных импульсов $0.005 < q < 0.25 \text{ \AA}^{-1}$. Рентгенофазовый анализ образцов проводили на дифрактометре Rigaku D/MAX 2500 ($Cu_{K\alpha}$ - излучение), термогравиметрический и дифференциально-термический анализ осуществляли с использованием анализатора Pyris Diamond (Perkin-Elmer).

Было установлено существенное влияние pH среды на состав ксерогелей, их фрактальную размерность, а также на размер образующих их мономерных частиц. Было показано, что при увеличении pH осаждения от кислого до нейтрального и слабощелочного наблюдается существенный рост фрактальной размерности D_S данных ксерогелей, с одновременным ростом размера и концентрации мономерных частиц, образующих агрегаты. Также установлены основные закономерности изменения структуры гидратированных оксидов при термической обработке.

Работа выполнена при поддержке Министерства Науки и Образования РФ (проект 14.740.11.0281)

Корреляция между электрическим сопротивлением и магнитным упорядочением в многослойных наноструктурах $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{35}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{65}/\text{a-Si:H}]_{36}$

Е. А. Дядькина¹, С. В. Григорьев¹, D. Lott², А. В. Ситников³, Ю. Е. Калинин³

¹ *Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, Россия*

² *Helmholtz Zentrum, Geesthacht, Germany*

³ *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

В данной работе исследовано магнитное упорядочение в аморфных многослойных наноструктурах $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{35}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{65}/\text{a-Si:H}]_{36}$ в зависимости толщины (0,7; 1,1; 1,5; 2,3 и 2,8 нм) немагнитного полупроводникового (ПП) а-Si:H слоя методом рефлектометрии поляризованных нейтронов. Интенсивность отраженного пучка регистрировалась при комнатной температуре для двух направлений поляризации падающего пучка: параллельно ($+P_0$) и антипараллельно ($-P_0$) приложенному в плоскости образца магнитному полю H , варьируемому в диапазоне от 0 до 700 мТл. Средняя намагниченность индивидуального металл-диэлектрического (МД) $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{35}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{65}$ слоя была получена из разницы интенсивностей магнитных отражений $I(+P_0, Q_R)$ и $I(-P_0, Q_R)$. Ферромагнитное упорядочение в индивидуальном МД слое возникает в четырех образцах с толщинами ПП слоя 0,7; 1,1; 2,3 и 2,8 нм, для которых наблюдается насыщение намагниченности при $H = 100 - 250$ мТл. Образец с толщиной ПП слоя 1,5 нм, напротив, не намагничивается в поле вплоть до 700 мТл. Дополнительные исследования транспортных свойств данных наноструктур показали, что на зависимости сопротивления от толщины ПП слоя наблюдается минимум, соответствующий образцу с толщиной ПП слоя 1,5 нм. Отсюда можно сделать заключение, что сопротивление и магнитное упорядочение в данных наноструктурах скоррелированы. Механизм этой корреляции обсуждается.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-02-01231-а).

Влияние радиационных дефектов на емкость кремниевых диодов, облученных электронами с энергией 3,5 МэВ

Н.И.Горбачук¹, А.В.Ермакова¹

¹ Белорусский Государственный Университет, г.Минск, Республика Беларусь

Исследовалось изменение емкости C кремниевых p^+n -диодов, вызванное радиационными дефектами. Диоды изготавливались на пластинах однородно легированного фосфором монокристаллического кремния с удельным сопротивлением $90\text{ Ом}\cdot\text{см}$ и облучались при комнатной температуре электронами с энергией $3,5\text{ МэВ}$ флюенсом $\Phi=4\cdot 10^{16}\text{ см}^{-2}$. Режим облучения— импульсный; частота повторения импульсов— 200 Гц ; длительность импульса— 5 мкс ; плотность потока электронов в импульсе— $2\cdot 10^{15}\text{ см}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$. Изохорный (30 мин) отжиг радиационных дефектов проводился в диапазоне температур $T_a = 250\text{--}450^\circ\text{C}$. Определение импеданса и угла сдвига фаз выполнялось на измерителях LCR Agilent E4980A и Agilent 4285A. Диапазон частот f переменного тока составлял от 25 Гц до 30 МГц , амплитуда синусоидального напряжения 40 мВ .

В результате облучения для кремниевых диодов наблюдается снижение емкости во всем частотном диапазоне и смещение участка дисперсного спада емкости (участок $f=0,3\div 100\text{ кГц}$) (рис.1). Отжиг диодов при температурах $T_a\leq 300^\circ\text{C}$ незначительно сказывается на виде зависимостей $C(f)$ и не приводит к восстановлению исходных (до облучения) значений C . Увеличение температуры отжига до 350°C и более сопровождается ростом емкости во всем частотном диапазоне. Низкочастотная ($f<1\text{ кГц}$) емкость диодов отожженных при $T_a\geq 350^\circ\text{C}$ превышает емкость необлученных диодов. Для этого же диапазона частот наблюдается максимум (при $T_a= 400^\circ\text{C}$) на зависимостях емкости от температуры отжига (рис.2).

При облучении электронами с энергией $3,5\text{ МэВ}$ в кремнии образуются дефекты типа А- и Е- центров, а так же дивакансии [1]. Известно, что дивакансии и Е-центры отжигаются при температурах $T_a\leq 300^\circ\text{C}$ [2]. Поэтому наблюдаемые изменения $C(f)$ при $T_a\geq 350^\circ\text{C}$ можно связать с перестройкой А-центров и образование комплексов V_2+O или $V+O_2$.

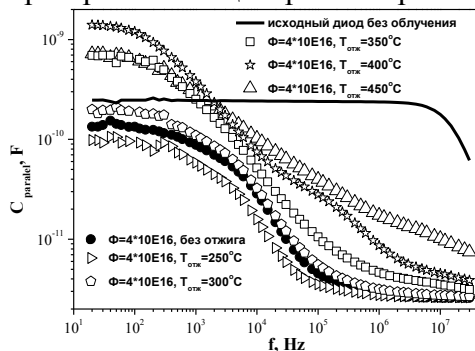


Рисунок 1. Зависимости емкости диодов от частоты. Температуры отжига и флюенс облучения указан на рисунке.

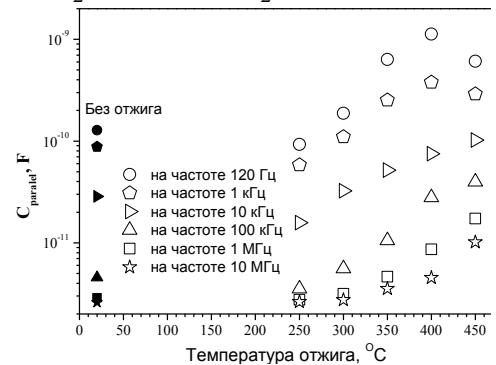


Рисунок 2. Емкости облученных и отожженных диодов.

1. Ф.П. Коршунов, Ю.В. Богатырев, П.М. Гурин, С.Б Ластовский, С.В. Шведов, С.В. Шпаковский Влияние электронного облучения на характеристики эпитаксиальных кремниевых p - n -структур // Ж.: «Известия Национальной академии наук Беларуси», № 3, 2007, с. 92–95
2. В.С. Вавилов, В.Ф. Киселев, Б.Н. Мукашев Дефекты в кремнии и на его поверхности // М.:«Наука», 1990.

Влияние термообработки на процесс очистки алмазсодержащей шихты

С.Н. Ивашевская

Учреждение Российской академии наук Институт геологии КарНЦ РАН

Алмазосодержащая шихта (diamond blend, АШ) – первичный продукт детонационного синтеза алмазов, при котором с помощью взрывчатых веществ удается получить ультрадисперсные алмазы (УДА). Шихта представляет собой порошок черного цвета, состоящий из УДА (30–60%), неалмазного углерода (40–60%) и металл содержащих примесей (5–15%). Она используется для получения композиционных материалов, сорбентов и других материалов с включениями наноалмазных частиц. Шихта содержит большой набор структурных форм углерода (турбоэстратный углерод 5–34 мас.; аморфный углерод 1–15 мас.; ультрадисперсный графит 5–15 мас.), в том числе и химически нестабильных, например карбины (1–5 мас.) [1]. Это ограничивает ее применимость в химически активных средах и составах. Кроме того, поверхность шихты сорбирует преимущественно неполярные и неионизованные вещества и малоактивна по отношению к полярным соединениям и ионам.

Удаление неалмазных форм углерода, составляющих большую часть примесей к УДА, является одной из основных задач процесса очистки. Практически все известные методы основаны на использовании различной устойчивости алмазных и неалмазных форм углерода к действию окислителей. Их реализация требует решения большого числа технических проблем, связанных с проведением экзотермической реакции при повышенных температурах и интенсивным газовыделением в ограниченном объеме [2]. Решающим фактором в выборе вариантов очистки является обеспечение безопасности.

В данной работе было исследовано влияние термической обработки (ТО) на процесс очистки алмазсодержащей шихты. Образец в виде черного мелкодисперсного порошка был получен из НП ЗАО “СИНТА” (марка АШ–А). Технические характеристики (стандартизировано по ТУ РБ 28619110.003-03): общий углерод (не менее 87 вес.%), алмазный углерод (32–55 вес.%), окисляемый углерод (не более 55 вес.%), зольность (3 вес.%), влажность сухого порошка (2 %), pH водных суспензий и паст (7.5–9). Назначение: получение антифрикционных смазочных и полимералмазных композиций, а также модифицированных УДА [3].

Процесс ТО проходил в вакууме при температуре 300°C. Химический состав был определен методом масс-спектрометрии (масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой ICP-MS Xseries2 (ThermoFisher Scientific)), анализ агрегации структурных элементов – методом СЭМ (Электронный микроскоп VEGA II LSH (ООО TESCAN) с приставкой для микрозондового анализа), анализ структурных параметров был проведен с помощью PCA (Thermo Scientific ARL X'TRA Powder X-ray Diffraction System), исследование термических процессов – методом термографии (DERIVATOGRAPH Q-1500D).

В результате проведенных исследований было обнаружено, что ТО в достаточно мягких условиях является перспективным вариантом очистки алмазсодержащей шихты с точки зрения экономики, безопасности и защиты окружающей среды.

Работа поддержана ОНЗ РАН-5, SI Visby project 00996/2008, РФФИ 080498825-р-север.

1. Г.И. Саввакин, В.И. Трефилов ДАН СССР, **321**, 1, с. 99 (1991).

2. В. Г. Сушев, В. Ю. Долматов, В. А. Марчуков, М. В. Веретенникова www.rql.kiev.ua/almaz_j (2008).

3. П.А. Витязь Физика твердого тела, **46**, вып. 4, с. 591 (2004).

Определение кристаллической структуры двух желтых органических пигментов по данным порошкового рентгеноструктурного анализа

С.Н. Ивашевская^{1,2}, Якко ван де Стрик², Мартин Шмидт²

¹ Учреждение Российской академии наук Институт геологии КарНЦ РАН г. Петрозаводск, Россия

² Институт Неорганической и Аналитической Химии, Франкфуртский университет, г. Франкфурт, Германия

Свойства пигментов зависят от их кристаллической структуры: большинство пигментов существует в различных полиморфных модификациях, демонстрируя при этом различные цвета. Структура многих органических пигментов остается неизвестной. Причина заключается в очень слабой растворимости пигментов во всех растворителях, что препятствует росту монокристаллов, подходящих для рентгеновских исследований. Определение кристаллической структуры по данным порошковой дифрактометрии становится альтернативой даже для конформационно гибких органических молекул, когда монокристаллы подходящего размера не могут быть выращены.

При работе с двумя промышленно производимыми желтыми пигментами (Пигмент Желтый 191 и Пигмент Желтый 183), представляющими собой соли кальция (Ca^{2+}), на основании объема элементарной ячейки было сделано предположение, что кристаллические структуры являются гидратами. Точное число молекул воды не могло быть установлено *a priori* из-за небольшого размера молекулы воды ($\approx 20 \text{ \AA}^3$) относительно органических фрагментов ($\approx 500 \text{ \AA}^3$). Так как молекулы были конформационно гибкими и из-за дополнительных степеней свободы иона кальция, попыткам определения структуры с максимальным числом молекул воды препятствовало увеличение числа степеней свободы.

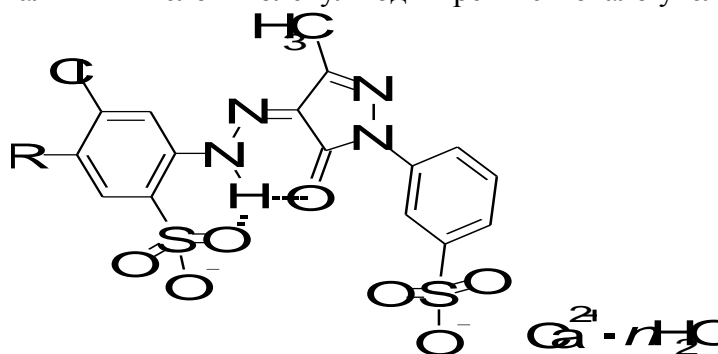


Рис.1 Химическая структура П.Ж. 183 ($\text{R} = \text{Cl}$) и П.Ж. 191 ($\text{R} = \text{CH}_3$), $n = 0-3$

Кристаллическая структура была определена итерационным методом. Положение молекулярных ионов было определено методом моделированного отжига, реализованного в пакете программ *DASH* [1]. Многократные частичные уточнения методом Ритвельда в программе *TOPAS* [2] использовались, чтобы поочередно определить положение отсутствующих молекул воды. Это обычная практика при определении структуры методом монокристалльного анализа, но для порошкового метода описана впервые. Частичные уточнения методом Ритвельда дали химически обоснованную координацию ионов кальция. Окончательное уточнение методом Ритвельда показало превосходное соответствие спектра, рассчитанного на основании полученной структуры и полученного экспериментально.

1. W.I.F. David, K. Shankland, J. van de Streek, E. Pidcock, W.D.S. Motherwell & J.C. Cole, *J. Appl. Cryst.* **39**, 910 (2006).

2. A.A. Coelho, *TOPAS-Academic 4.1* (2007).

Использование генетических алгоритмов для моделирования кластеров биметаллических наночастиц Pd-Co

Ю. В. Гуров, Ю. А. Козинкин

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону

Исследование строения наночастиц – это очень важная и актуальная задача. Мы провели моделирование кластеров для биметаллических наночастиц Pd-Co. Затем рассчитали спектры поглощения для каждой из полученных моделей. Полученные результаты сравнивались с экспериментальными с использованием метода генетических алгоритмов.

В данной работе представлена апробация этого метода для программы XKDQ, реализующей метод полного многократного рассеяния. Но он также может быть применен и к ряду других программ используемых для моделирования кластеров и расчета спектров. Ключевая идея используемая в работе – моделирование положения и учет реальных вакансий атомов в кластере наночастицы. В качестве структурной модели биметаллических наночастиц Pd-Co выбрана модель «ядро-оболочка» (core-shell), наиболее часто реализующаяся при синтезе наночастиц содержащих два различных металла. За основу был взят 43 атомный кластер Pd (центральный атом и 3 сферы окружения). Затем последняя сфера (24 атома) была заменена атомами Co, с учетом изменения расстояний для структуры Pd-Co. После чего, исходя из анализа экспериментальных данных, установлены следующие критерии необходимые для построения кластера: структурные искажения, дислокации, и реальное уменьшение координационных чисел по сравнению с объемным металлом.

На основе заданных нами правил была сформирована программа, которая, используя генетические алгоритмы, рассчитав более 300000 спектров, установила наиболее хорошо согласующиеся с экспериментом параметры для моделируемого кластера. Применение данных алгоритмов в контексте настоящего исследования представляет собой создание набора случайных атомных конфигураций, из которых на каждой итерации алгоритма выбираются наиболее подходящие под экспериментальные спектры с последующим скрещиванием. Для обеспечения наилучшей сходимости нами использовался оператор мутации для атомных конфигураций, который создает несколько копий данной конфигурации с небольшим случайным смещением узлов в ней в пространстве.

Данная работа представляет собой попытку применить генетические алгоритмы к задачам моделирования и расчета спектров биметаллической наночастицы Pd-Co. В дальнейшем планируется использование созданного программного комплекса и для других соединений.

Механизмы формирования К-спектров поглощения в наночастицах меди и кобальта

Ю. А. Козинкин, А. А. Новакович, Л. А. Бугаев

НИИ физики ЮФУ, Ростов-на-Дону, 344090 пр. Стачки 194

Сопоставление экспериментальных К-спектров поглощения Co и Cu в наночастицах диаметром около 5 нм с соответствующими спектрами массивных образцов показывает наличие заметных расхождений для спектров Co и практическое совпадение для спектров Cu. Для установления связи изменений между экспериментальными спектрами атома в наночастице и в массивном образце переходного металла с возможными изменениями атомной и электронной структуры в изучаемой многоатомной системе, при сильном уменьшении ее размеров, выполнены прямые расчеты рентгеновских К-спектров поглощения (K-edge XAS) металлов Cu, Co, как в кластерном подходе теории XAS, так и с использованием зонного метода. В рамках кластерного подхода исследована зависимость спектров от размеров кластеров: проведены расчеты спектров от малых кластеров (40 и менее атомов) до кластеров больших размеров (более 800 атомов). Расчеты околопороговой или XANES области спектров для различных размеров кластеров позволили провести детальный анализ электронного строения изучаемых наночастиц.

Расчеты проводились с использованием метода полного многократного рассеяния и реализующей его программы XKDQ. Сопоставление полученных результатов с экспериментальными XANES-спектрами позволило подобрать оптимальные одноэлектронные потенциалы для кластеров исследованных металлов. Расчеты выполнены для гранецентрированной кубической (ГЦК) структур меди и кобальта, а также для гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структуры кобальта.

Зонные расчеты проведены с использованием пакета программ WIEN2K, реализующих метод потенциала не muffin-tin (MT) типа, а именно линейаризованный метод полного потенциала присоединенных плоских волн (ЛППВ). Полученные спектры сопоставлены с экспериментальными спектрами и спектрами рассчитанными методом полного многократного рассеяния в рамках кластерного приближения. Определены тип обменно-корреляционного потенциала, количество k-точек, определяющее разбиение обратного пространства, а также энергия обрезания плоских волн, дающие наилучшее согласие с экспериментом. Сравнение зонных расчетов спектров с расчетами методом полного многократного рассеяния в рамках кластерного MT-подхода дает хорошее согласие формы спектров.

Нестационарная спектроскопия внутризонного поглощения света в полупроводниковых квантовых точках

М. Ю. Леонов

*Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики,
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49*

Одной из важнейших проблем физики низкоразмерных систем является определение скоростей релаксации энергии состояний электронной подсистемы полупроводниковых квантовых точек. Хотя изучению энергетической и фазовой релаксации в квантовых точках посвящено большое число работ, имеющиеся в настоящее время данные достаточно противоречивы. В связи с этим требуются дополнительные систематические исследования релаксационных процессов, которые позволят приблизиться к решению этой проблемы. Трудности, возникающие в этом направлении, обусловлены тем, что до сих пор нет общепризнанного понимания того, какими доминирующими механизмами определяются релаксационные процессы, протекающие при возбуждении состояний квантовых точек [1]. Кроме того, в настоящее время недостаточно развито адаптированное к квантовым точкам теоретическое описание оптических методов исследования кинетики населенности таких состояний.

Известно, что одним из наиболее перспективных оптических методов изучения скоростей энергетической релаксации возбужденных состояний квантовых точек является импульсный метод накачка-зондирование [2]. В его рамках может быть реализовано несколько различных схем, которые позволяют исследовать не только полную скорость энергетической релаксации (время жизни) того или иного состояния электронной подсистемы квантовой точки, но и индивидуальные скорости внутризонной релаксации электронов и дырок.

Ранее нами была разработана последовательная теория этого метода для схемы, в которой несущие частоты импульсов накачки и зондирования резонансны межзонным переходам [3, 4] в квантовых точках. В настоящей работе представлено теоретическое описание ряда схем метода, в которых несущая частота оптических импульсов накачки близка к резонансу с межзонным переходом электронной подсистемы квантовой точки, а несущая частота импульсов зондирования резонансна внутризонному переходу. Предполагается, что конечные состояния, в которые переходит электронная подсистема в результате поглощения импульса накачки и зондирующего импульса, связаны между собой процессами внутризонной релаксации. Анализируется поглощение энергии зондирующего импульса, индуцируемое импульсом накачки, в зависимости от времени задержки между импульсами. Показано, что при определенных условиях эта зависимость может описываться одной, двумя или тремя экспонентами. Показатели экспонент пропорциональны скоростям релаксации энергии резонансно возбуждаемых состояний электрон-дырочных пар, а предэкспоненциальные множители зависят от скорости внутризонной релаксации.

1. Sanguinetti S., Guzzi M., Grilli E. et al. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 085313.
2. Shah J. Ultrafast spectroscopy of semiconductors and semiconductor nanostructures, 2nd ed., Berlin: Springer-Verlag, 1999.
3. Леонов М.Ю., Баранов А.В., Федоров А.В. // Опт. и спектр. 2010. Т. 109. № 3. С. 449.
4. Леонов М.Ю., Баранов А.В., Федоров А.В. // Опт. и спектр. 2011. Т. 110. № 1. С. 28

Каталитическая активность Pt/C нанокатализаторов. Всегда ли размер имеет значение?

I. N. Leontyev¹, S. V. Belenov¹, R.Revenko¹, V. E. Guterman¹

¹ Южный Федеральный Университет, г.Ростов-на-Дону, Россия

В настоящее время наноразмерные Pt катализаторы являются наиболее перспективными для использования в низкотемпературных топливных элементах, что вызывает к ним повышенный интерес. Однако в литературе имеются противоречивые данные о влиянии размера частиц на каталитическую активность таких материалов. Цель настоящего исследования – синтез Pt/C катализаторов, изучение и оценка влияния на их каталитическую активность структурных и микроструктурных характеристик. В работе также обсуждается возможность применения рентгенографии к характеристике таких характеристик наночастиц как: их форма и распределение частиц по размерам.

Pt/C катализаторы изготавливали методом химического восстановления прекурсора металла из углеродной суспензии на основе растворителя вода – диметилсульфоксид (ДМСО) [1]. Анализ рентгенограмм, полученных на Швейцарско-Норвежской линии Европейского центра синхротронного излучения, показал что: 1) размер D наночастиц синтезированных образцов составляет от 1.6 до 5.3 нм, причем уменьшение концентрации ДМСО в маточном растворе вызывает как увеличение размера наночастиц, так и уширение распределение частиц по размерам. Электрохимические исследования показали, что каталитическая активность синтезированных материалов в реакции электровосстановления кислорода немонотонно зависит от степени дисперсности платины, достигая максимума при размере частиц около 2.7нм. Наблюдаемое изменение каталитической активности может быть обусловлено изменением формы частиц от усеченного куба к кубооктаэдру и, далее, к усеченному октаэдру при уменьшении их размера (увеличении концентрации неводного компонента растворителя). Такое изменение формы приводит к увеличению площади плоскостей типа (111), которые менее активны в реакции электровосстановления кислорода чем плоскости типа (100). По мере уменьшения размера частиц скорость электровосстановления кислорода первоначально увеличивается за счет увеличения суммарной площади поверхности платины, а далее, когда превалирующим становится эффект формы, каталитическая активность начинает падать..

1. Гутерман В.Е. и др, Неорганические материалы. **45(5)**, 552 (2009).

Характеризация платиново-кобальтовых электрокатализаторов на углеродном носителе с помощью дифракции и малоуглового рассеяния рентгеновских лучей

А.С. Михайкин, И.Н. Леонтьев, Е.Б. Пахомова, В.Е. Гутерман

Южный федеральный университет

Композитные материалы, содержащие платиновые наночастицы, осажденные на высокодисперсный углеродный носитель, - наиболее многообещающие катализаторы для низкотемпературных топливных элементов. Применение подобных материалов ограничивается, однако, их высокой стоимостью и недостаточной стабильностью: в агрессивной среде топливного элемента наночастицы платины агломерируют, что существенно уменьшает площадь поверхности металла и ведет к снижению каталитической активности материала. Использование сплавов платины с такими переходными металлами, как кобальт и никель позволяет снизить стоимость катализатора, а по некоторым данным увеличить каталитическую активность.

Другой сложностью производства подобных катализаторов является неоднородность покрытия углеродного носителя наночастицами и существенное распределение частиц по размерам. Поэтому контроль за размером и распределением частиц, за степенью их агломерации является важной научной и технической задачей создания оптимальной технологии синтеза.

Нами были синтезированы Pt₃Co электрокатализаторы на углеродном носителе с высокой удельной площадью поверхности Timtech HSAG-300 (250 м²г⁻¹) с помощью жидкофазного боргидридного метода. Для этого суспензия углеродного носителя в водно-органическом растворе пропитывалась прекурсорами металлов в молярном соотношении 3:1. Металлы восстанавливались при комнатной температуре с помощью водного раствора боргидрида натрия. В качестве органической составляющей раствора был взят этиленгликоль. Задача данного исследования была проследить влияние состава растворителя на структурные и микроструктурные характеристики катализаторов. Образцы E23, E25 и E27 синтезировались при соотношении вода-этиленгликоль 1:5, 1:1 и 5:1 соответственно.

Для определения среднего размера наночастиц и их распределения была использована дифракция и малоугловое рассеяние рентгеновских лучей.

Для характеристики каталитической активности образцов были сняты хроноамперограммы при комнатной температуре на вращающемся дисковом электроде (в реакции восстановления кислорода).

В результате данных исследований установлено, что

- 1) Pt₃Co/C катализаторы имеют средний размер наночастиц металла 2-5 нм;
- 2) с ростом доли органической составляющей растворителя увеличивается средний размер наночастиц катализатора;
- 3) распределение частиц по размерам с ростом доли этиленгликоля в растворителе становится более широким;
- 4) активность катализаторов изменяется следующим образом E27<E25<E23, т.е. с уменьшением среднего размера наночастиц активность в реакции восстановления кислорода растет;
- 5) рентгеновская дифракция и малоугловое рассеяние рентгеновских лучей дают сопоставимые результаты по распределению частиц по размерам.

1. D. Thompsett, Handbook of Fuel Cells. Fundamentals Technology and Applications, vol. 3, Wiley & sons Ltd., NY, USA, 2003

2. I.N. Leontyev, et al. Applied Catalysis A: General **357**, 1-4 (2009)

Анализ фрактальных агрегатов с помощью DLA-модели

А.А. Пономарева, М. Б. Криштаб

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ"

В последние годы усилился научный интерес к фрактальной концепции описания физических явлений. Использование представлений о фракталах позволило значительно повысить уровень понимания, как структурной организации различных физико-химических систем, так и закономерностей протекания в них разнообразных процессов. Ярким примером подобных процессов являются агрегационные явления, лежащие в основе современного золь-гель метода получения наноструктурированных материалов [1].

В данной работе проводились исследования полученных смешанных наночастиц и смешанных нано- и микрофракталов с использованием квазитемплантного синтеза на основе полиэтилсилоксана используя теорию фракталов.

Удалось создать фрактальные агрегаты микро размеров из пересыщенных растворов специально выявленных прекурсоров (коллоидные растворы тетрээтоксисилана и гидрохлорида олова модифицированные полиэтилсилоксаном), которые оказались подобны Виттен-сэндеровским агрегатам (рис. 1).

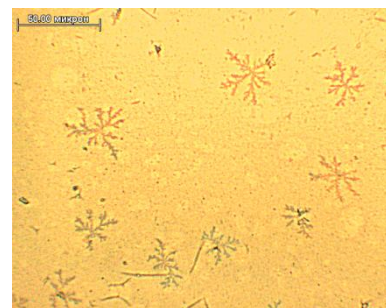
По линейным параметрам была оценена фрактальная размерность полученных агрегатов, которая составляет $\sim 1,86$. При этом расчеты опирались на допущение, что фрактальные образования являются двумерными агрегатами и лежат в плоскости параллельной подложке.

Также, были промоделированы процессы образования фрактальных агрегатов в золь-гель системах и эволюции их структуры. Для этого были созданы программные продукты, воспроизводящие рост фрактальных объектов в рамках диффузионно-лимитируемой агрегации (DLA) и позволяющие визуализировать образующиеся структуры. Благодаря этому программному обеспечению была также рассчитана фрактальная размерность двумерного фрактального агрегата, которая оказалась равной $D = 1.724 \pm 0.027$, что хорошо согласуется с

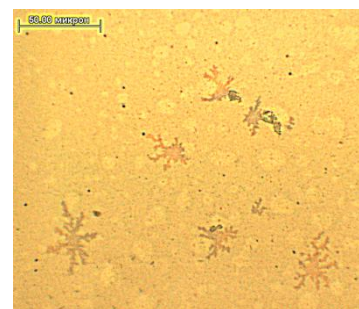
результатами, полученными другими исследователями ($D = 1.71$) [2], и не сильно отличается от результатов, полученных на реальных объектах.

Работа выполнена при поддержке ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" (2009-2013 г.), госконтракты ПЗ99 от 30.07.2009, П2279 от 13.11.2009 г. и 02.740.11.5077 от 20.07.2009 г.

1. Максимов А. И., Мошников В. А., Таиров Ю. М., Шилова О. А. Основы золь-гель технологии нанокompозитов. 2-е издание. СПб.: ООО "Техномедиа" / Изд-во "Элмор", 2008. 225 с.
2. P.Meakin. J. Sol-Gel Sci. Technol., 15, 97 (1999)



a



b

Рисунок 1. Микрофотографии фракталов:

*a - иллюстрирует развитые фракталы,
b - иллюстрирует образование зародышей.*

Боросиликатные стекла с магнитными свойствами

Н.И. Поречная, Пляцов С.А.

Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет

В настоящее время большое внимание уделяется нанокompозитным материалам (НКМ) на основе диэлектрических пористых матриц. Вещества, внедренные в такие матрицы, проявляют новые, нехарактерные для объемного материала, свойства. Существуют и другие способы получения подобных НКМ, среди которых наибольший интерес вызывают активные (сегнетоэлектрические или магнитные) матрицы. В таких нанокompозитных материалах возникает взаимодействие между наночастицами внедренного материала и самой матрицей.

В Институте химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН были разработаны и изготовлены двухфазные щелочноборосиликатные стекла (ЩБС-стекла), допированные оксидом железа (Fe_2O_3). В результате сквозного химического травления из них были получены магнитные пористые матрицы с размером пор $d = 3 - 6$ нм, пористость 15% (МИП) и $d = 23$ нм, пористость 60% (МАП), на базе которых, в дальнейшем, предполагается создание нанокompозитных материалов с сегнетоэлектрическим и магнитным упорядочением.

Целью данной работы является исследование морфологии полученных матриц и оптимизация технологии их приготовления.

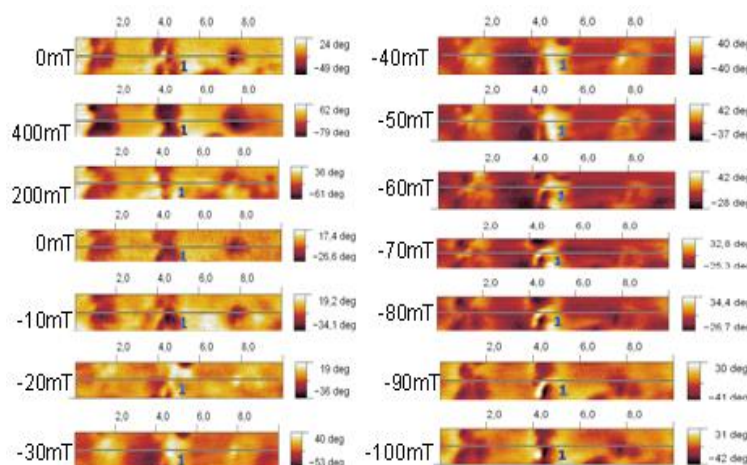
Для анализа поверхностей образцов и их магнитных свойств применялись методы атомно-силовой (АСМ) и магнитно-силовой микроскопии (МСМ).

Были рассмотрены образцы с разным содержанием оксида железа, а также с разной температурой ликвации. При исследовании топографии обнаружены значительные отличия между обычными и магнитными ЩБС. Для непористых образцов показано существование областей с магнитным упорядочением.

На рисунке показано изменение магнитного контраста поверхности ЩБС с 20 % содержанием Fe_2O_3 при разных значений (по величине и направлению) приложенного магнитного поля. Хорошо видна перемена цвета магнитных областей при изменении величины поля, свидетельствующая о перемагничивании областей с магнитным порядком.

Из полученных данных была получена оценка величины коэрцитивного поля, которое составляет приблизительно 80 мТ.

Для аттестации матриц также использовалась широкополосная диэлектрическая спектроскопия, с помощью которой были получены и впоследствии проанализированы температурные зависимости диэлектрической проницаемости и проводимости для каждого из образцов. На основе полученных данных оптимизированы режимы получения



Magnetic studies of bimetallic core/shell FeRh nanoparticles by local XMCD and macroscopic FMR methods

A. Smekhova^{1,2}, *A. Semisalova*¹, *D. Ciuculescu*³, *A. Trunova*⁴, *F. Wilhelm*²,
*C. Amiens*³, *A. Rogalev*², *N. Perov*¹, *M. Farle*⁴

¹ *M.V. Lomonosov Moscow State University (MSU), Moscow*

² *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble*

³ *Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC), Toulouse*

⁴ *Universität Duisburg-Essen (UDE), Duisburg*

Production of different nano-size objects and further characterization of their physical properties have been of great interest during the last decades and continuously attracts a lot of attention.

Recently, a novel one-pot method was developed to prepare bimetallic nanoparticles (NPs) with a core/shell structure from solutions of two precursors [1]. The method allows to reverse the core/shell structure of nanoparticles just by choosing reactants and reaction conditions and to obtain NPs with the magnetic 3d metal core (Fe or Co) covered by the shell of noble rhodium [2]. NPs with such a structure are attractive for possible applications since they show an enhanced air- and chemical- stability; and moreover, their potential bio-compatibility could be exploited in medicine.

Depending on NPs composition and the core/shell order, nanoparticles exhibit different structural and magnetic properties, checked by WAXS, XANES at the K- and L_{2,3}- absorption edges of Fe (Co) and Rh [3,4], macroscopic (SQUID) magnetizations, FMR [5] and XMCD techniques.

Here, we present results of the magnetic studies of the extremely small (~2nm) oxide-free bimetallic Fe_xRh_(1-x) (x=50,80) nanoparticles with a different core/shell order by either macroscopic ferromagnetic resonance (FMR) or local element-selective XMCD spectroscopy. The temperature dependence of the FMR signal was used to determine the anisotropy fields of the investigated NPs. The shift of the FMR resonance field at lower temperature was found to be in good agreement with SQUID measurements. XMCD spectra have shown a 4d magnetic polarization on initially non-magnetic Rh atoms; and its magnitude has been estimated via sum rules analysis [6]. The values of spin and orbital contributions to the total induced magnetic moment of rhodium atoms are presented. The correlation between the macroscopic and local magnetic moments is discussed.

1. D. Ciuculescu, C. Amiens, M. Respaud et al., *Chem. Mater.*, **19**, 4624 (2007)
2. D. Ciuculescu, N. Atamena, A. Smekhova et al., *Chem. Commun.*, **46**, 2453 (2010)
3. A. Smekhova, N. Atamena D. Ciuculescu et. al., *J. of Physics.: Conference Series*, **200**, p.072091 (2010)
4. A. Smekhova, D. Ciuculescu, P. Lecante, F. Wilhelm et. al., *Magnetics, IEEE Transactions on*, **44**, 2776 (2008)
5. A.V.Trunova, J.Lindner, R.Meckenstock, M. Spasova et.al., *JMMM*, **321**, 3502 (2009)
6. B. T. Thole, P. Carra, F. Sette, and G. van der Laan, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 1943 (1992);
7. P. Carra, B. T. Thole, M. Altarelli, X. Wang, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 694 (1993)

Электрофизические свойства материалов на основе каталитических многослойных углеродных нанотрубок различной дефектности

*Е.Н. Ткачев^{1,2}, А.И. Романенко^{1,2}, О.Б. Аникеева^{1,2}, Т.И. Буряков^{1,2},
К.Р. Жданов^{1,2}, В.Л. Кузнецов^{2,3}, К.В. Елумеева^{2,3}*

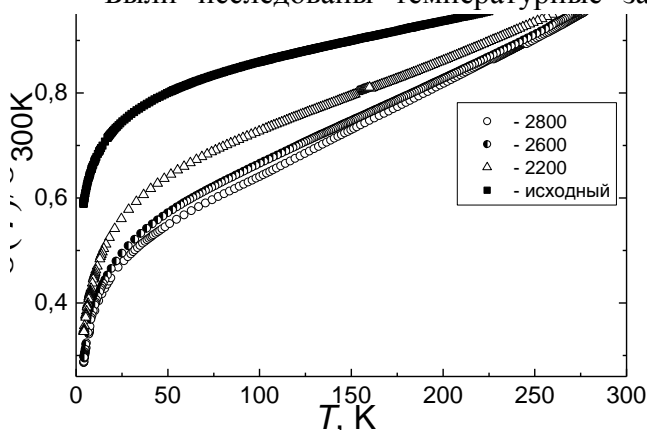
¹Институт неорганической химии СО РАН, Новосибирск, 630090, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, 630090, Россия

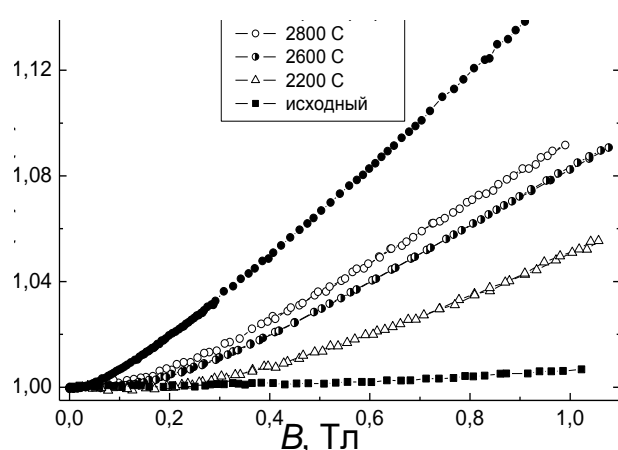
³Институт катализа СО РАН, Новосибирск, 630090, Россия

Большое количество приложений материалов, состоящих из углеродных наноструктур (нанотрубок, фуллеренов, углерода луковичной структуры, графеновых пленок), основано на их уникальных электропроводящих свойствах. В этой работе исследовано влияние дефектности слоев каталитических многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ) на их электрофизические свойства. Для решения этой задачи МУНТ прокачивали в токе высокочистого аргона при 2200 – 2800°C, в результате чего получали менее дефектные МУНТ и содержание металлических примесей составляло менее 1 ppm. Исходные МУНТ были синтезированы CVD-методом.

Были исследованы температурные зависимости электропроводности материалов,



состоящих из исходных и отожженных при температурах 2200, 2600, 2800°C МУНТ. На приведенном графике эти зависимости нормировались на $\sigma_{300\text{K}}$ — значение электропроводности при комнатной температуре. При увеличении температуры отжига МУНТ наблюдалось увеличение угла наклона зависимости $\sigma(T)/\sigma_{300\text{K}}$. Это связано с уменьшением концентрации носителей тока при увеличении температуры отжига МУНТ.



Проводились исследования магнетопроводимости $\sigma(B)/\sigma(0)$ в полях B до 1 Тл при температуре 4,2 К для отожженных при различных температурах МУНТ. С увеличением температуры отжига образцов зависимость $\sigma(B)/\sigma(0)$ приближается к зависимости $\sigma(B)/\sigma(0)$ для пиролитического графита. Для объяснения этого явления были измерены зависимости $\sigma(B)/\sigma(0)$ в полях до 6 Тл для исходных и отожженных МУНТ. Длина свободного пробега увеличивается в 4 раза при отжиге МУНТ при 2800°C по сравнению с исходными МУНТ, что согласуется с другими исследованиями по характеристике этих образцов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-02-00331-а, Минобразования и науки РНП.2.1.1/10256 и гос. контрактами № ПЗ39, П889, 16.740.11.0016, 16.740.11.0146.

Модификация спектров экстинкции гранулированных пленок Ag на сапфире при нанесении на них полиметинового красителя, термическом и лазерном воздействиях

Н.А. Торопов, А.А. Старовойтов, Н.Б. Леонов, Е.Н. Калитеевская, Т.А. Вартамян

Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики

В настоящее время актуальной является проблемы создания материалов с заданными свойствами (оптическими, фотоэлектрическими и т.д.) для применений в нанoeлектронике, дифракционной оптике, медицине и т.д. Металлические гранулированные пленки, образующиеся по механизму Фолмера–Вебера при термическом напылении в вакууме, не позволяют в полной мере воспользоваться привлекательными свойствами металлических наночастиц, из которых они состоят, из-за разброса параметров отдельных наночастиц и корреляции между их формой и размерами. В связи с этим встает задача поиска средств для управления морфологией и оптическими свойствами гранулированных металлических пленок.

Согласно данным атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии полученные нами серебряные пленки состоят из отдельных островков разных форм и размеров. Средний размер частиц составлял несколько десятков нанометров. Спектры поглощения островковых пленок демонстрировали ярко выраженный максимум, обусловленный плазмонным резонансом. Положение его зависит от формы островков, их поверхностной плотности и размеров.

Простейшим способом модификации островковых пленок является нагрев. При отжиге островковых пленок при температуре 200°C максимум спектра смещается в сторону меньших длин волн, а ширина его уменьшается. Сдвиг максимума связан с тем, что при нагреве частицы приобретают более округлую форму, а уменьшение ширины спектра вызвано сужением функции распределения островков Ag по формам.

Управлять формой наночастиц можно и с помощью лазерного излучения. При облучении пленок серебра рубиновым лазером в импульсном режиме (длительность импульса 17 нс, плотность энергии варьировалась от 33,3 до 51,7 мДж/см²) на длине волны близкой длине волны лазера наблюдались провалы в спектрах поглощения. Одновременно происходит рост поглощения на длине волны ≈ 600 нм. В отличие от термического воздействия более округлую форму в данном случае приобретают не все частицы, а только те, плазмонный резонанс которых близок к частоте лазера.

Нанесение слоя красителя на гранулированную пленку серебра позволяет изменять ее оптические свойства. Для получения воспроизводимых результатов относительно взаимного влияния серебряных наночастиц и молекул красителя необходимо было исключить непосредственное влияние растворителя на морфологию гранулированной металлической пленки. Установлено, что после помещения в этанол свеженанесенной серебряной пленки ее спектр экстинкции заметно изменяется, что естественно связать с удалением непрочного закрепленных наночастиц серебра. Обработанные таким образом серебряные пленки в дальнейшем не изменяют свое строение при многократном повторении циклов нанесения и смыва красителя.

На промытые в этаноле пленки серебра методом spin-coating наносился органический полиметиновый краситель DTDCI (3,3'-диэтил-тиадикарбоцианин йодид). Концентрация этанольного раствора варьировалась от $1,7 \cdot 10^{-4}$ М/л до $1,8 \cdot 10^{-3}$ М/л. Оказалось, что спектры оптической плотности металлической пленки, покрытой красителем, не сводятся к простой сумме поглощения компонентов. Значительное усиление поглощения в области перекрытия

полос связано с усилением поля падающей волны в ближнем поле наночастиц, в котором оказываются молекулы красителя.

Таким образом, продемонстрирован ряд возможностей направленной модификации морфологии и оптических свойств гранулированных металлических пленок.

Внутризонные оптические переходы в полупроводниковых квантовых точках в режиме сильного конфайнмента

В. К. Турков

Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, 197101, Санкт-Петербург, Кронверский пр., 49, Россия

Внутризонные оптические переходы представляют интерес для физики квазиульмерных систем с фундаментальной и прикладной точки зрения. Прежде всего, они играют важную роль в нелинейной спектроскопии полупроводниковых квантовых точек. В настоящее время нет общепризнанного понимания того, какими доминирующими механизмами определяются релаксационные процессы, протекающие при возбуждении состояний квантовых точек [1]. В ранних работах [2], в которых исследовалась релаксация электронной подсистемы квантовых точек, рассматривались процессы с участием акустических фононов, и было предсказано замедление скорости релаксации с уменьшением размера квантовой точки. Однако имеются экспериментальные наблюдения быстрой пикосекундной и даже фемтосекундной внутризонной релаксации в коллоидных квантовых точках [3]. В тоже время имеются данные о медленной внутризонной релаксации от десятков пикосекунд [4] до наносекунд [5], полученные для аналогичных квантовых точек. Эти результаты показывают, что скорость внутризонной релаксации в квантовых точках может меняться в широких пределах от 10^8 с^{-1} до 10^{13} с^{-1} и зависит от способа их выращивания, размера, формы, материала квантовой точки и свойств матрицы. Для интерпретации экспериментальных данных были предложены механизмы релаксации, определяемые взаимодействием с дефектами поверхности квантовых точек, многофононными переходами, а также Оже-процессами и процессами безызлучательного переноса энергии. Неясным остается вопрос о релаксации энергии в малых квантовых точках с бездефектной поверхностью при слабой электрон-фононной связи и эффективными массами электронов и дырок близкими по величине, поскольку перечисленные выше релаксационные механизмы будут подавлены. В частности, для таких систем эффективный механизм релаксации может быть обусловлен внутризонными оптическими переходами.

В настоящей работе проведен детальный анализ внутризонных оптических переходов в квантовых точках. Как известно (см., например [6]), в дипольном приближении можно использовать так называемые **Er**- и **Ap**-представления оператора электрон-фотонного взаимодействия. В работе были получены аналитические выражения для внутризонных матричных элементов электрон-фотонного взаимодействия в **Er**- и **Ap**-представлениях для квантовых точек в форме прямоугольного параллелепипеда, сферы и цилиндра, электронная подсистема которых находится в режиме сильного конфайнмента. Показано, что матричные элементы операторов взаимодействия, вычисленные в разных представлениях для одного и того же внутризонного перехода, имеют различную зависимость от размеров квантовой точки. Для описания электронных состояний квантовых точек использовалась модель потенциала с бесконечно высокими стенками. На основе полученных результатов была вычислена скорость внутризонной излучательной релаксации

(радиационное время жизни) и установлено, что она может достигать величины порядка 10^9 с⁻¹.

1. S. Sanguinetti, M. Guzzi, et al., Phys. Rev. B. **78**, 085313 (2008).
2. G. Bastard, U. Bockelman, Phys. Rev. B. **42**, 8947 (1990).
3. R. D. Schaller, J. M. Peitryga, et al. Phys. Rev. Lett. **95**, 196401 (2005)
4. P. Guyot-Sionnest, B. Wehrenberg, D. Yu, J. Chem. Phys. **123**, 074709 (2005)
5. P. Guyot-Sionnest, A. Pandey, Science **322**, 929 (2008)
6. М. О. Скалли, М. С. Зубайри Квантовая оптика, М:Физматлит (2003)

Поверхностная реакционная диффузия возгоняющихся веществ

Д. В. Пермикин, В. С. Зверев

Уральский государственный университет им. А. М. Горького

Явление поверхностной реакционной диффузии (ПРД) заключается в твердофазном растекании одного вещества по поверхности другого, сопровождающегося химической реакцией. Эффект активно проявляется при твердофазном взаимодействии веществ $\text{MoO}_3 / \text{WO}_3$, Cu / MoO_3 , ZnO / WO_3 , $\text{Pb}_2\text{MoO}_5 / \text{MoO}_3$. Необходимыми и основными условиями возникновения поверхностной реакционной диффузии являются низкая поверхностная энергия (термодинамический фактор) и высокая поверхностная подвижность (кинетический фактор) одного или обоих участников взаимодействия. Вследствие этого термодинамически выгодно и кинетически осуществимо распределение диффузанта по поверхности реагирующего с ним вещества (подложки).

Результатом быстрого твердофазного растекания являются тонкие пленки на поверхности вещества, которые являются предметом экспериментальных исследований.

В настоящем докладе дается математическое описание роста пленок при условии перераспределения диффузионных потоков на поверхности, внутри подложки и возгонке диффузанта. Построенная модель процесса решается приближенными аналитическими методами, что позволяет выписать временной закон роста поверхностного слоя, а также прямым численным моделированием.

В широком диапазоне значений параметров модели численное и аналитическое решения хорошо согласуются друг с другом, в том числе предельных случаях. С одной стороны это подтверждает справедливость оценок, сделанных при построении аналитического решения, с другой стороны - графики косвенно подтверждают сходимость численного решения.

При построении приближенного аналитического решения удалось выписать закон распространения фронта реакции внутри подложки: $l \sim \ln t$. Этот результат отличается от классического результата Фишера (модель диффузии с оттоком), который дает оценку $l \sim t^{1/4}$. Отличие наблюдается вследствие испарения. Полученный логарифмический закон – наиболее медленный среди всех ранее полученных результатов при описании поверхностной реакционной диффузии. Он лучше описывает наблюдаемое явление, экспериментальные результаты.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» и частично поддержана грантом РФФИ № 10-01-96045-р_урал_a.

Золь-гель синтез и исследование органо-неорганических покрытий для защиты каменных памятников культурного наследия от биоразрушений

Т. В. Хамова, О. А. Шилова, Д. Ю. Власов, И. Б. Глебова

Учреждение Российской академии наук Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова РАН, Санкт-Петербург

Настоящее исследование направлено на решение одной из важнейших в современном мире фундаментальных проблем – поиску эффективных мер противодействия биоповреждениям. Известны случаи, когда фактор биоповреждения был одним из основных, приведших к обрушению строительных конструкций жилых домов и промышленных зданий города. Уникальное собрание каменных памятников Санкт-Петербурга, а также многие музеи и дворцы уже пострадали от биокоррозионного воздействия. Поэтому задача создания покрытий для защиты каменных материалов от биоразрушений является актуальной.

Данная работа посвящена золь-гель синтезу и исследованию биоактивных покрытий, формируемых на основе эпоксисилоксановых золь, модифицированных мягкими биоцидами. Для приготовления эпоксисилоксанового золь в качестве силикатной составляющей использовали тетраэтоксисилан $\text{Si}(\text{OEt})_4$, а в качестве эпоксидной составляющей циклоалифатическую эпоксидную смолу EPONEX. Эти составляющие сливали в соотношении 1:1 и тщательно перемешивали. В качестве отвердителя применяли трифторид бора. Далее в формируемую систему вводили мягкие биоцидные добавки: водный раствор сульфированного дифталоцианина лютеция ($\text{SO}_3\text{-Pc}_2\text{Lu}$) и наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) в виде суспензии в воде. Концентрации вводимых добавок составляли от 0.05 до 0.25 мас.% ДНА и от 0.0004 до 0.002 мас.% $\text{SO}_3\text{-LuPc}_2$. После введения биоцидов полученные золь-гель системы подвергали интенсивному перемешиванию. В результате при комнатной температуре получали прозрачный золь, который использовали для формирования покрытий на различных подложках.

С применением оптической, атомно-силовой микроскопии, микрорентгеноспектрального анализа, метода малоуглового рассеяния рентгеновских лучей исследовали структуру, состав и состояние поверхности покрытий. Для оценки биологической стойкости покрытий использовали как стандартные, так и разработанные авторами оригинальные методики.

В результате систематизации и анализа полученных данных установлены корреляционные связи между условиями золь-гель синтеза, природой и концентрацией введенных модифицирующих добавок, структурой и свойствами биостойких покрытий.

1. Т. В. Хамова, О. А. Шилова, Д. Ю. Власов, и др., Строительные материалы. 86, 4 (2007).
2. Д. Ю. Власов, М. А. Архипова, В. Ю. Долматов, О. А. Шилова и др., Проблемы в медицинской микологии, 26, 8 (2006).
3. Д. Ю. Власов, А. М. Маругин, О. А. Шилова, О. В. Франк-Каменецкая, Д. Ю. Долматов, Т. В. Хамова и др., Фундаментальные основы инновационных биологических проектов в «Наукограде». Труды Биол. НИИ СПбГУ. Спб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2008, вып. 54, с. 244.
4. Патент РФ № 2382059, приор. от 21.08.2008 г. Композиция для получения биологически стойкого покрытия (Шилова О. А., Хамова Т. В., Хашковский С. В., Долматов В. Ю., Власов Д. Ю.), зарег. 20.02.2010.

Магнитные характеристики полиимида, имплантированного ионами кобальта

А. А. Харченко¹

¹ Белорусский государственный университет, г. Минск, Республика Беларусь

Ионная имплантация полимеров - эффективный метод создания наноструктурных композитов с широким спектром магнитных свойств. Формирование магнитных наночастиц при имплантации ионов 3d металлов позволяет рассматривать такие материалы как перспективные для приборов спинтроники, устройств записи, хранения и считывания информации [1].

Пленки полиимида толщиной 40 мкм были имплантированы ионами Co^+ с энергией 40 кэВ в интервале доз $2,5 \cdot 10^{16}$ - $1,25 \cdot 10^{17}$ см^{-2} при плотности ионного тока $j = 4$ $\text{мкА}/\text{см}^2$. Петли гистерезиса намагниченности и температурные зависимости намагниченности измерялись сверхпроводящим квантовым магнитометром SQUID в температурном интервале 4,5 - 300 К.

На рис.1 показаны температурные зависимости намагниченности, измеренные в режиме ZFCM и FCM, т.е. при охлаждении образца без и в магнитном поле ($H=10$ Э) для пленки, имплантированной дозой $D=2,5 \cdot 10^{16}$ см^2 . Наблюдаемый пик на кривой ZFCM при температуре блокировки $T_b=10\text{К}$ свидетельствует об образовании магнитных кластеров кобальта. Оценка диаметра по T_b дает величину $d = 2$ нм. Увеличение дозы приводит к росту T_b и, следовательно, к увеличению диаметра нанокластера, и при достижении пороговой дозы $D=1,25 \cdot 10^{17}$ см^{-2} формируется перколяционный магнитный кластер. На рис.2 приведена открытая петля гистерезиса намагниченности с коэрцитивной силой $H_c=$

20 Э при $T=300$ К для имплантации дозой $D=1,25 \cdot 10^{17}$ см^2 .

Таким образом, имплантация ионов кобальта с энергией 40 кэВ в интервале доз $2,5 \cdot 10^{16}$ - $1,25 \cdot 10^{17}$ см^2 при плотности ионного тока в интервале 4 $\text{мкА}/\text{см}^2$ приводит к формированию магнитных наночастиц кобальта в матрице полиимида находящихся в суперпарамагнитном состоянии. При дозе $D=1,25 \cdot 10^{17}$ в результате роста магнитных кластеров образуется перколяционный магнитный кластер и наноккомпозит переходит в ферромагнитное состояние.

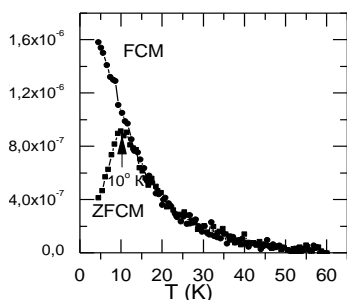


Рисунок 1. - Температурная зависимость намагниченности в режиме ZFCM и FCM ($H = 10$ Э) для образца имплантированного дозой $D = 5 \cdot 10^{16}$ см^{-2} .

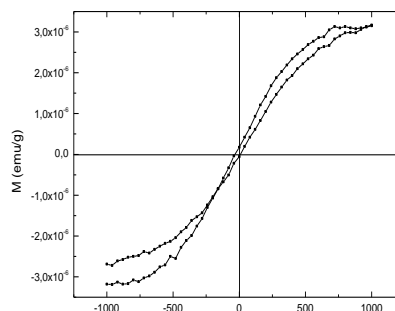


Рисунок 2. - Петля гистерезиса намагниченности при $T = 300$ К для образца имплантированного дозой $D = 1,25 \cdot 10^{17}$ см^{-2} .

1. X. Battle, A. Labarta, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, 15 (2002).

Исследование магнитных свойств многослойных $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{(1-x)}]/\text{a-Si:H}]_m$ наноструктур методом рефлектометрии поляризованных нейтронов

В. А. Уклеев¹, Е. А. Дядькина², С. В. Григорьев², D. Lott³, А. В. Ситников⁴, Ю. Е. Калинин⁴

¹ Санкт-Петербургский Академический Университет НОЦ Нанотехнологий РАН

² Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б. П. Константинова

³ Helmholtz Zentrum, Geesthacht, Germany

⁴ Воронежский государственный технический университет

В данной работе исследованы магнитные свойства многослойных наноструктур $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{(1-x)}]/\text{a-Si:H}]_m$ с числом бислоев m в зависимости от концентрации магнитной фазы ($x = 34, 47$ и 60 ат. %) и толщин металл-диэлектрического (МД) $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ и полупроводникового (ПП) а-Si:H слоев. Намагниченность индивидуального магнитного слоя измерялась методом рефлектометрии поляризованных нейтронов. Интенсивность отраженного пучка регистрировалась при комнатной температуре для двух направлений поляризации падающего пучка: параллельно ($+P_0$) и антипараллельно ($-P_0$) приложенному в плоскости образца магнитному полю H , варьируемому в диапазоне от 0 до 700 мТл. На кривых отражения наблюдается серия рефлексов вплоть до 4-ого порядка с импульсами $Q_Z = nQ_R$, где $Q_R = 2\pi/d$, d – толщина бислоя, n – номер рефлекса. Для трех образцов с толщиной бислоя 5 нм расщепление между $I(-P_0)$ и $I(+P_0)$ кривыми не наблюдается вплоть до $H = 700$ мТл, что говорит о нулевой намагниченности индивидуального МД слоя. Кривые отражения для образцов с толщинами бислоя 10 и 18 нм показывают расщепление между $I(-P_0)$ и $I(+P_0)$ при приложении магнитного поля. При этом кривые $I(-P_0)$ демонстрируют интенсивные пики первого и третьего порядка, в то время как четные гармоники подавлены. На кривых $I(+P_0)$, напротив, значительны вторая и четвертая гармоники, нечетные пики погашены. Такое поведение интенсивностей наиболее ярко выражено для образцов с высокими концентрациями $x = 60$ ат. % и почти не заметно для малых концентраций $x = 34$ ат. %. Подавление/усиление четных/нечетных пиков на кривых отражения определяется форм-фактором индивидуального бислоя. Подобная модуляция интенсивностей $I(-P_0)$ и $I(+P_0)$ наблюдалась в [1] и была интерпретирована как неоднородное распределение намагниченности в пределах индивидуального магнитного слоя. Мы связываем такое перераспределение интенсивностей с наличием в каждом МД слое магнитно активной центральной части и двух магнитно мертвых частей на интерфейсах. По методу Парратта [2] произведена количественная оценка толщин магнитно-активного и магнитно-мертвых слоев в пределах одного МД слоя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-02-01231-а).

1. J. F. Ankner, C. F. Majrzak, H. Homma, J. Appl. Phys. **73**, 6436 (1993).
2. L. G. Parratt, Phys. Rev. **95**, 359 (1954).

Дифракция инвертированных опалоподобных кристаллов на основе кобальта

*А.В. Чумакова¹, С.В. Григорьев¹, А.А. Мистонов², Н.А. Григорьева²,
К.С. Напольский³, Н. В. Саполетова³, А. А. Елисеев³, А. Петухов⁴*

¹*Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, С.-Петербург, 188300, Россия*

²*СПбГУ, С.-Петербург, 198504, Россия*

³*Московский государственный университет, Москва, 119992, Россия*

⁴*Debye Institute, Utrecht University, 3584 CH Utrecht, The Netherlands*

В работе проведены исследования кристаллической структуры инвертированных опалоподобных кристаллов на основе кобальта методом малоугловой дифракции синхротронного излучения с микро радианным разрешением.

Образцы были изготовлены методом электрохимического осаждения металла в пустоты пространственно-упорядоченных коллоидных кристаллов. Потенциостатический режим осаждения металла позволил контролировать заполнение пустот и сформировать инвертированные опалоподобные кристаллы различной толщины со 100 % заполнением матрицы пор.

В работе исследовались 3 опалоподобных кристалла на основе кобальта различной толщины, матрицы которых состояли из 3, 7 и 11 слоев полистирольных сфер. Анализ дифракционных картин показал, что период структуры инвертированных опалоподобных кристаллов на основе кобальта составляет $a_0 = 770 \pm 20$ нм. Были проведены оценки по таким параметрам как: позиция (q) и ширина рефлекса (Δq) на q -зависимости интенсивности, которые характеризуют период структуры и его когерентную область, а также позиция максимума рефлекса и его ширина ($\Delta\omega$) на кривой качания, характеризующие мозаичность. Проведены количественные оценки продольной и поперечной когерентных длин рассеяния для инвертированных опалоподобных кристаллов на основе кобальта различной толщины. Результаты представлены в таблице.

Толщина образца, кол-во слоёв	q, nm^{-1}	$\Delta\omega, ^\circ$	$L_{\text{long}}, \text{nm}$	$L_{\text{tran}}, \text{nm}$
3	$0.02093 \pm 8 \cdot 10^{-6}$	10.48 ± 1.07	1650	4760
7	$0.02297 \pm 6 \cdot 10^{-6}$	8.15 ± 0.97	1930	4110
11	$0.02319 \pm 7 \cdot 10^{-6}$	6.65 ± 1.03	2340	4110

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-02-00634-а).

Постерные доклады

Разрешение межатомных расстояний методом Фурье-анализа рентгеновских спектров поглощения неупорядоченных соединений.

*Л. А. Авакян¹, В. В. Прядченко¹, В. В. Срабионян¹, А. Л. Бугаев¹, Е. В. Положенцев¹,
Л. А. Бугаев¹*

¹ Южный федеральный университет

Одним из успешных и перспективных методов изучения локальной атомной структуры аморфных и неупорядоченных соединений является рентгеновская абсорбционная спектроскопия (X-ray absorption, XAS). Метод основан на Фурье-преобразовании структурного фактора $\chi(k)$, выделяемого из экспериментального спектра, который формируется атомами, окружающими поглощающий центр, и последующей многопараметрической оптимизации получающегося Фурье-образа.

Метод Фурье-анализа XAS спектров позволяет определять параметры первой координационной сферы с высокой точностью (межатомные расстояния с точностью до 0.005 Å и координационные числа с точностью до 10 %). Однако, возможность применения метода к изучению искажений первой координационной сферы (например, при изучении активных центров катализаторов), либо, к изучению смеси различных координаций поглощающего атома (имеющих место, например, на поверхности и в ядре наночастицы), затруднена существующими оценками точности метода, которые необходимо уточнить.

В данной работе проведено уточнение пределов разрешимости координационных сфер с радиусами, различающимися хотя бы на ~ 0.03 Å, и представлена методика, позволяющая определять малые искажения локальной атомной структуры с помощью анализа достаточно коротких (~ 100 - 150 эВ) спектров поглощения. Пределы разрешения были оценены применением методики к модельным функциям, имитирующим поведение экспериментальных спектров, а также к теоретическим спектрам поглощения оксидов кремния и алюминия, требующим для своего расчета существенного машинного времени. Методика, позволяющая получать информацию об искажениях первой координационной сферы, применена для Фурье-анализа As K-XAFS спектра InAs под давлением 11 ГПа.

1. L.A. Bugaev, L.A. Avakyan, V.V. Srabionyan, A.L. Bugaev, Phys.Rev.B, **82**, 064204 1 (2010)

Образование приповерхностной плазмы при барьерном разряде и её исследование

В. В. Андреев, Л. А. Васильева

Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, г. Чебоксары

Плазмохимические реакторы, в разрядной ячейке которых происходит приповерхностный барьерный разряд, нашли в настоящее время широкое применение. В частности, наиболее эффективные способы электросинтеза озона основаны на использовании барьерного разряда. В то же время, в технологии плазмохимического синтеза выход желаемого продукта сложным образом зависит от множества взаимосвязанных процессов в электрических разрядах и кинетике химических реакций.

Барьерный разряд формируется из целой серии отдельных микрозарядов, длительность существования каждого из которых составляет порядка 10 нс. В ячейке, где происходит барьерный электрический разряд, канал микрозаряда обычно имеет сложное строение и содержит расширенную область, образуемую непосредственно на поверхности диэлектрика. Такое приборьерное пятно играет важную роль в протекании реакций плазмохимического синтеза. Так, в работе [1] было показано, что при электросинтезе озона наиболее производительной по озону является приборьерное пятно канала микрозаряда. Одной из причин этого является то, что в барьерном разряде в ходе реакции $O_2 + O \rightarrow O_3^*$ возникает возбуждённая молекула озона. Если быстро не снимать данное возбуждение, то происходит разложение молекулы озона. Возбуждение молекулы O_3^* снимается в результате её столкновения с другой частицей. Если же электросинтез озона происходит в приборьерном пятне барьерного электрического разряда, то вероятность столкновения возбуждённой молекулы озона с твёрдой поверхностью диэлектрика, в результате которого снимается его возбуждение, значительно возрастает.

Кроме того, эффективность плазмохимического синтеза существенным образом зависит от величины напряжённости электрического поля. Так, наряду с генерацией электронов в барьерном разряде, требуется обеспечить наибольшую длительность существования напряженности электрического поля, соответствующей наибольшей эффективности диссоциации молекул [2].

В данной работе проведены исследования электрофизических характеристик приповерхностной расширенной части канала барьерного микрозаряда. Получены аналитические выражения для определения длительности микрозарядов ΔT и максимального диаметра приборьерного пятна ξ_{\max} для различных геометрических конфигураций электродов, имеющие достаточно простой вид. Они позволяют оценить оптимальные геометрические и физические характеристики электродов и диэлектрического барьера при разработке плазмохимических реакторов на барьерном разряде, а также исследовать их влияние на эволюцию приборьерного пятна разряда на поверхности диэлектрика.

Полученные в работе результаты могут использоваться при разработке новых плазмохимических реакторов для оценки режимов их работы с целью увеличения выхода целевого продукта при одновременном снижении энергопотребления установкой.

1. Ю. П. Пичугин // Матер. 25-го Всерос. Семинара «Озон и другие экологически чистые окислители. Наука и технологии», - М., 2003. С. 36- 47.
2. М.В. Соколова // Оптимизация образования озона в электрическом разряде// Известия Академии Наук СССР. Энергетика и транспорт. 1983. №6. С. 99- 107.

Рентгеноструктурные исследования твёрдых растворов системы $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ при комнатной температуре

И. Н. Андрюшина, Л. А. Шилкина, Л. А. Резниченко,

Научно – исследовательский институт физики Южного федерального университета

Объектом настоящего исследования явились твёрдые растворы (ТР) системы $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ (ЦТС) ($0.0 \leq x \leq 1.0$), полученные по обычной керамической технологии.

Рентгенографические исследования проводили методом порошковой дифракции с использованием дифрактометров ДРОН-3 и АДП (FeK_{α} -излучение; Mn-фильтр; FeK_{β} -излучение; схема фокусировки по Брэггу - Brentano).

Изучены концентрационные зависимости структурных характеристик ТР в целом по системе. Обращают на себя внимание следующие факты (см рис.): экспериментальный объём ($V_{\text{эксп.}}$) с ростом x уменьшается (с разной скоростью на разных участках) в соответствии с логикой уменьшения размера B- катиона ($Zr \rightarrow Ti$), но медленнее, чем теоретический объём ($V_{\text{теор.}}$), особенно в ромбической (Р)-, ромбоэдрической (Рэ) -, и морфотропных областях (МО); в тетрагональной (Т)- фазе скорость изменения $V_{\text{эксп.}}$ ($V_{\text{эксп.}}$) увеличивается и при $x=0.83$ их значения сравниваются (до этой концентрации $V_{\text{эксп.}} < V_{\text{теор.}}$); параметр c в Т- фазе остается постоянным во всем концентрационном интервале существования этой фазы, угловой параметр α в Рэ- фазе также почти не изменяется. Несовпадение величин $V_{\text{эксп.}}$ и $V_{\text{теор.}}$ при $x < 0.83$, несомненно, является следствием влияния дефектной подсистемы ТР на процессы фазообразования.

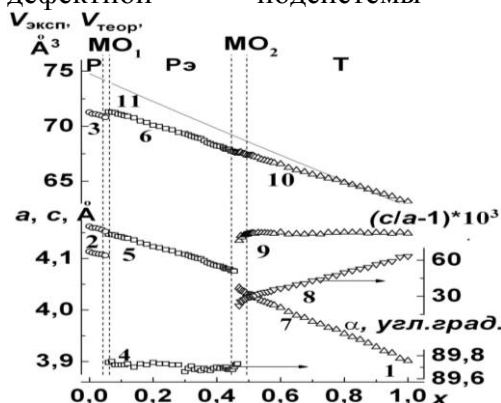


Рис. Зависимости структурных характеристик ТР от x в интервале $0.0 \leq x \leq 1.0$: параметры псевдотетрагональной Р ячейки, c (1), a (2), объём, $V_{\text{эксп.}}$ (3); параметры Рэ ячейки, α (4), a (5), объём, $V_{\text{эксп.}}$ (6); параметры Т ячейки, a (7), c (9), $c/a-1$ (8), объём, $V_{\text{эксп.}}$ (10); теоретический объём, $V_{\text{теор.}}$ (11). Пунктиром показаны области морфотропных фазовых переходов: MO_1 – область перехода между Р и Рэ фазами, MO_2 – область перехода между Рэ и Т фазами

В Рэ- фазе уменьшение $V_{\text{эксп.}}$ с ростом x происходит неравномерно. При этом уменьшение $V_{\text{эксп.}}$ по сравнению с $V_{\text{теор.}}$ (близость к инварианту эффекта, ИЭ) свидетельствует о структурной перестройке (внутрифазовых превращениях), связанных как с кластеризацией структуры (исчезновением Р- фазы и появлением Рэ, псевдокубической (ПСК), Т-фаз), так и с сосуществованием фазовых состояний, инициированных переменной валентностью Ti, образованием и упорядочением плоскостей кристаллографического сдвига (ПКС). В случае, когда $V_{\text{эксп.}} > V_{\text{теор.}}$, дополнительный механизм уплотнения структуры обусловлен, по нашему мнению, увеличением размеров ПКС, их поворотами и появлением новых. В Т- области также, как и в предыдущих случаях, поведение структурных параметров немонотонно и причина этого та же - периодичность процессов фазообразования на фоне изменения реальной дефектной ситуации: появления, накопления, упорядочения кислородных вакансий и исключения их кристаллографическим сдвигом с образованием ПКС. Постоянство параметра c здесь связано с особенностями структуры $PbTiO_3$, допускающими размещение (2...3)% ионов Pb^{2+} в вытянутых кислородных октаэдрах вдоль ПКС. Такое размещение возможно вследствие "гантелеобразного" строения электронной оболочки Pb^{2+} и склонности поляризующихся ионов к понижению

координации. Тот факт, что при $x > 0,83$ $V_{\text{эксп.}} \sim V_{\text{теор.}}$ свидетельствует о реализации практически бездефектных ТР.

Рефлектометрия металлических наногетероструктур в условиях аномального рассеяния рентгеновских лучей

Ю. А. Бабанов¹, Ю. А. Саламатов¹, Э.Х.Мухамеджанов²

¹ Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург

² Российский научный центр "Курчатовский институт", 123182 Москва

Чтобы найти функцию распределения электронной плотности по глубине из рефлектометрических данных традиционно применяется метод наименьших квадратов, использующий теорию Парратта [1]. При таком подходе нет необходимости находить фазу рассеянной волны (так называемая «фазовая проблема»), так как добиваются согласия рассчитанного сигнала с экспериментальными данными, варьируя параметры модели. Однако известно, что в этом случае ни устойчивости, ни единственности решения нет.

В настоящем докладе предложен метод, при помощи которого из рефлектометрических данных можно получить концентрационные профили элементов, входящих в состав исследуемого образца. За основу взято интегральное уравнение, полученное в рамках первого борновского приближения (кинематического приближения) и описывающее связь коэффициента отражения с распределением электронной плотности [2]. Показано, что оно может быть преобразовано в уравнение, связывающее коэффициент отражения с концентрационными профилями элементов. Селективность по элементам достигается использованием аномальных условий рентгеновского рассеяния (вблизи K -края поглощения одного из элементов).

Первая особенность подхода заключается в решении задачи без использования модельных представлений. И это главное.

Вторая особенность – формулировка задачи (вывод интегрального уравнения) в терминах *парциальных* функций Паттерсона. В этом случае тоже обходится «фазовая проблема», но имеется возможность определить *парциальные* расстояния между интерфейсами, состоящими из атомов разных сортов, например, Fe и Cr. Такая задача не решается однозначно традиционными методами в силу низкой контрастности при рассеянии рентгеновских лучей.

Третья – обратная задача для полученного уравнения является плохо обусловленной и при её решении используется метод регуляризации по Тихонову [3], причем из одного интегрального уравнения ищется несколько неизвестных *парциальных* функций.

Эффективность метода показана в процессе выполнения модельных численных расчётов для многослойных систем Fe-Cr.

На образцах-трехслойках Cr/Fe/Cr проведены эксперименты по рентгеновской рефлектометрии на краях поглощения элементов Fe и Cr. Измерения выполнены на станции «Прецизионная рентгеновская оптика» Курчатовского источника синхротронного излучения. Результаты, полученные предложенным методом, сравниваются, в частности, для образца тонкой пленки Cr с окисленным верхним слоем с данными, полученными как с применением алгоритма Парратта, так и при решении задачи с использованием логарифмического дисперсионного соотношения («фазовая проблема»)[4].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 08-02-99083 р_офи) и Программы Президиума РАН № 27 (проект № 09-П-2-1032).

1. Parratt L. G., Phys. Rev. **95**, p. 359. (1954).
2. Zimmerman K. M. Advanced analysis techniques for x-ray reflectivities: theory and application. Диссертация на соискание учёной степени доктора наук. Университет Дортмунда, Карлсруэ. (2005).
3. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. Изд. 2-е. (1979).
4. Klibanov M. V., Sacks P. E., J. Math. Phys. **33** (11), p. 3813. (1992).

Отсутствие звука в некоторых случайных решетках

Я. М. Бельтюков¹

¹ СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия

В последнее время широко исследуются гранулярные среды, в англоязычной литературе получившие название *jammed solids*. Такие среды имеют свойства как твердого тела (при большой концентрации гранул), так и жидкости (при малой концентрации). Примерами таких сред могут быть майонез, зубная паста и крем для бритья. При приближении к точке перехода система становится предельно мягкой, в ней нарушается аффинность деформаций и перестают распространяться звуковые колебания (фононы) [1]. Мы показали, что поведение системы в критической точке может быть описано случайными матрицами. При этом частицы могут располагаться в узлах кристаллической решетки, но иметь случайные связи со своими соседями.

Колебания механической системы в гармоническом приближении полностью описываются динамической матрицей M [2]. В случае единичных масс она совпадает с матрицей силовых констант. Собственные числа динамической матрицы – квадраты собственных частот. В неупорядоченных средах элементы динамической матрицы являются до некоторой степени случайными величинами. Но между ними должны существовать нетривиальные корреляции, обеспечивающие механическую устойчивость системы (положительность квадратов собственных частот). Мы показали, что корреляции будут учтены автоматически, если динамическую матрицу представить в виде $M=AA^T$, где A – некоторая квадратная матрица [3]. Для построения кубической решетки со случайными связями будем строить матрицу по правилу: A_{ij} – случайное число (с нулевым средним и некоторой дисперсией), если атомы с номерами i и j соседние и ноль в противном случае. Диагональный элемент вычисляется так, чтобы сила взаимодействия частиц зависла только от разности смещений из положений равновесия. В полученной системе будут взаимодействовать только соседние частицы и частицы, следующие за соседними.

В такой системе плотность колебательных состояний оказывается примерно постоянна при низких частотах. Но акустические фононы дают вклад пропорциональный квадрату частоты. Поэтому в нашей системе отсутствуют фононы. Оказывается, это связано с предельной мягкостью такой системы – среднее значение модуля Юнга быстро падает с ростом размера системы как $E \sim 1/N$, где N – число частиц в системе.

Мы также показали, что колебания распространяются диффузионным образом, а не в виде плоских волн.

1. M van Hecke, J. Phys.: Cond. Matter **22**, 033101 (2010).
2. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. Мир, М. (1965). 383 с.
3. Я. М. Бельтюков, Д. А. Паршин. Физика Твердого Тела **53** (2010) стр. 142-152.

Модели фазовых переходов в композитах на основе алмазной и графеновой фаз

П.И. Белобров, И.А. Денисов, А.А. Рясик

Сибирский федеральный университет, МОЛПИТ, Институт биофизики СО РАН, 660036 Красноярск

Физическое описание конденсированного состояния наночастиц требует новых подходов [1]. Прямой структурный переход частиц алмаза в луковичи при повышении температуры в среде без кислорода и обратный переход луковиц в наноалмаз при электронном облучении (ссылки и детали в [1]) – один из интересных обратимых переходов в алмазе, у которого нет точного описания. Даже последние расчеты [2] не учитывают, что отслоение алмазной фазы на поверхности частицы с превращением в сферические слои графена идет последовательно, и определяется коллективными состояниями Тамма в подслое алмазной частицы. Поэтому, принимая за основу эффект Зеемана, Оже-процесс и заселенность уровней Ландау электронно-колебательных состояний при захвате кванта магнитного потока частицей алмаза (термодинамически устойчивой фазой алмаза - наноалмазом) размером около 5 нм, мы строим свою модель.

Рассмотрены композиты на основе алмазной и графеновой фаз, физические свойства которых изменяются в зависимости от отношения массы графеновой фазы (graphene flakes) к массе алмазной фазы (\square). При изменении \square от 0 до 80 % существенно изменяется ширина запрещенной зоны композита, который из диэлектрика становится полупроводником с высокой проводимостью. Модель структуры наноалмаза, созданная на основе ЭПР, PEELS, КР, ИК и Оже-спектроскопии [3-6], была подтверждена недавно методом твердотельной спектроскопии ЯМР.

Наслаивание графеновой фазы при изменении \square от 0 до 30 % по спектральным свойствам аналогично температурному отслаиванию графеновой сферы (верхней оболочки луковицы). Свойства электронов Тамма в подслое частицы алмаза таковы, что термодинамически устойчивая алмазная частица обладает рядом инвариантных характеристик, которые не зависят от того, какие функциональные группы имеет сама частица на поверхности [3, 5]. Энергия когезии $\sim 0,1$ эВ на поверхности алмаза проявляется в колебательных спектрах в области ~ 800 см⁻¹. Показано, что на верхнем пределе устойчивости наноалмаза в нем формируется поверхностный подслой коллективных (неспаренных) электронов, что согласуется с другими расчетами и объясняет ряд экспериментальных данных.

Модели зонной структуры и поверхности Ферми композита были использованы для анализа экспериментов в нашем подходе. Это позволило сравнить оценки, сделанные разными методами, для границ применимости понятия фазы к алмазной частице.

Работа частично поддержана грантами: РФФИ (№ 09-08-98002-р_сибирь_a и 08-02-00259-а), Минобрнауки РФ (№ 2.2.2.2/5309) и CRDF США (№ RUX0-002-KR-06/BP4M02).

1. A.S. Barnard. Modelling of nanoparticles: approaches to morphology and evolution // *Rep. Prog. Phys.* **73** 086502 (2010).
2. A. Datta, M. Kirca, Y. Fu, A.C. To. Surface structure and properties of functionalized nanodiamonds: a first-principles study // *Nanotechnology*, **22** (6), 065706 (2011).
3. Белобров П.И., Гордеев С.К., Петраковская Э.А., Фалалеев О.В. Парамагнитные свойства наноалмаза // *Доклады РАН*, **379** (1), 38-41 (2001).
4. J.L. Peng, S. Bulcock, P. I. Belobrov, L.A. Bursill. Surface bonding state of nano-crystalline diamond balls // *Int. J. Modern Physics B*, **15** (31), 4071-4085 (2001).
5. P. I. Belobrov, L. A. Bursill, K. I. Maslakov, and A. P. Dementjev. Electron spectroscopy of nanodiamond surface states // *Appl. Surf. Sci.*, **210**, 169-177 (2003).
6. I.A. Denisov, P.I. Belobrov, S.S. Tsegelnik, K.A. Shaikhutdinov, D.A. Znak, D.A. Balaev, O.A. Bayukov, S.B. Korchagina, E.A. Petrakovskaya, D.A. Velikanov, N.V. Volkov, S.K. Gordeev. Magnetization of diamond-graphene flakes composites // Abstract to Trends in NanoTechnology (TNT2009), Sept. 2009 Barcelona-Spain.

Электросинтез на основе поверхностного барьерного разряда

Л.А. Васильева, В.В. Андреев

Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, г. Чебоксары

Исследованию поверхностного барьерного разряда в плазмохимических реакторах в настоящее время уделяется значительное внимание, так как на его основе можно реализовать электросинтез различных соединений, в том числе и наночастиц, в промышленных масштабах. Также следует отметить, что поверхностный барьерный разряд может быть использован для управления высокоскоростными потоками воздуха путём воздействия на характеристики пограничного слоя.

В данной работе исследован поверхностный барьерный разряд, возникающий в разрядной ячейке, представленной на рис.1. Здесь r_0 - ширина электрода; a - расстояние между центрами соседних плоских электродов; d - расстояние между параллельными однородными сетками; s - смещение центров плоских электродов верхней и нижней сеток друг относительно друга. Промежуток между сетками заполнен диэлектриком. В работе найдены аналитические формулы для расчёта напряжённости электрического поля, создаваемого двумя параллельными плоскими электродами-сетками. Полученные выражения для компонент напряжённости электрического поля позволяют определить оптимальные условия возникновения и развития поверхностного барьерного разряда.

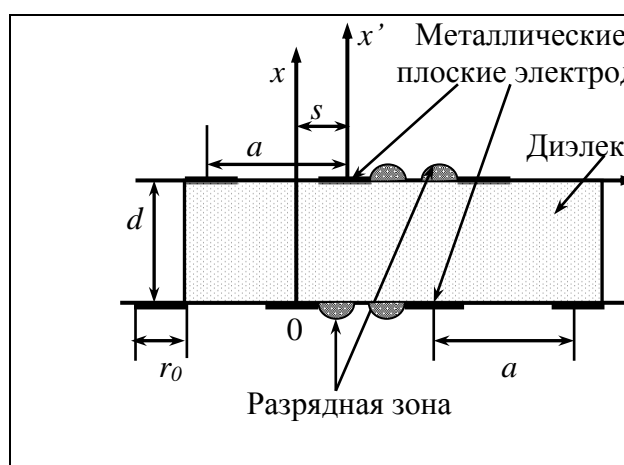


Рис. 1. Разрядная ячейка поверхностного барьерного разряда, состоящая из двух параллельных однородных сеток, состоящих из заряженных тонких плоских металлических электродов ширины r_0 . Ось z направлена к нам.

Известно, что в технологии плазмохимического синтеза выход желаемого продукта сложным образом зависит от большого количества взаимосвязанных процессов в электрических разрядах и кинетике химических реакций. В данной работе с учётом пространственно-временной структуры поверхностного барьерного исследован электросинтез озона. В то же время, полученные результаты и разработанный алгоритм легко могут быть адаптированы для исследования других процессов электросинтеза в

плазмохимических реакторах, основанных на применении поверхностного барьерного разряда.

Синтез и электропроводность дивалентного перовскитоподобного ванадата висмута с различным соотношением допантов.

Величко Е.В.¹, Буянова Е.С.¹, Морозова М.В.¹, Петрова С.А.²

¹ *Уральский государственный университет, Екатеринбург, Россия*

² *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Сложнооксидные фазы являются основой для материалов, используемых в различных электрохимических устройствах. Тщательное исследование соотношения структура-свойство необходимо для понимания механизмов и закономерностей поведения материалов и последующего целенаправленного их модифицирования. Одним из перспективных соединений для использования в качестве кислородно-ионных проводников с высокими значениями электропроводности при достаточно низких температурах является $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$. Наилучшими показателями проводимости обладает высокотемпературная γ -модификация данного соединения. Путем замещения ванадия другими металлами удастся снизить температуру существования этой модификации. При этом получены материалы с общей формулой $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{11-\delta}$, известные как семейство BiMeVOX .

Работа посвящена исследованию влияния на общую электропроводность сложных оксидов $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x-y}\text{Cr}_x\text{Fe}_y\text{O}_{11-\delta}$ ($x+y \leq 0.7$, $\Delta=0.1$) различного соотношения концентраций железа и хрома.

Все образцы синтезировали по стандартной керамической технологии в интервале температур от 600 до 800 °С. Аттестация полученных составов производилась методом РФА.

Электропроводность твердых растворов исследована методом импедансной спектроскопии в диапазоне температур 473-1073 К. Измерения проводились двухконтактным методом с платиновыми электродами на предварительно подготовленных спеченных брикетах. Форма импедансной кривой меняется с изменением температуры. При относительно низких температурах (623 К) годограф состоит из нескольких сочетающихся полуокружностей. С ростом температуры низкочастотная часть всё более сглаживается. Эквивалентные схемы ячеек, соответствующие протеканию процессов в определенном температурном интервале, подбирали с использованием программы Zview software (Version 2.6b, Scribner Associates, Inc.). По результатам импедансных исследований проводимости построены температурные зависимости общей проводимости образцов от обратной температуры. Установлено, что ход зависимостей является характерным для семейства BiMeVOX : до определенной суммарной концентрации допантов проводимость растет, а при больших концентрациях наблюдается заметное снижение электропроводности. Показано, что с ростом величины отношения концентрации железа к концентрации хрома, электропроводность образцов увеличивается.

По результатам данной работы были определены образцы с наибольшей электропроводностью и установлено наилучшее соотношение концентраций хрома и железа при двойном замещении ванадия в ванадате висмута.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы»

Эффекты модифицирования ниобатных сегнетокерамик системы $[(\text{Na}_{0,5}\text{K}_{0,5})_{1-x}\text{Li}_x](\text{Nb}_{1-y-z}\text{Ta}_y\text{Sb}_z)\text{O}_3$.

И.А. Вербенко, К.П. Андриюшин, Х.А. Садыков, А.Г. Абубакаров

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета

Основу практически всех известных и освоенных мировой практикой электроактивных материалов составляют твёрдые растворы (ТР) токсичных свинецсодержащих соединений. Бесспорной альтернативой Pb-содержащим ТР являются материалы на основе ниобатов щелочных металлов (ЩМ), промышленному применению которых препятствует ряд технологических трудностей [1], которые можно исключить путем модифицирования. Целью настоящей работы является установление закономерностей фазообразования в системе $[(\text{Na}_{0,5}\text{K}_{0,5})_{1-x}\text{Li}_x](\text{Nb}_{1-y-z}\text{Ta}_y\text{Sb}_z)\text{O}_3$ в зависимости от качественного-количественного состава вводимых в нее модификаторов ($\text{CuO}+\text{TiO}_2$, CdO)

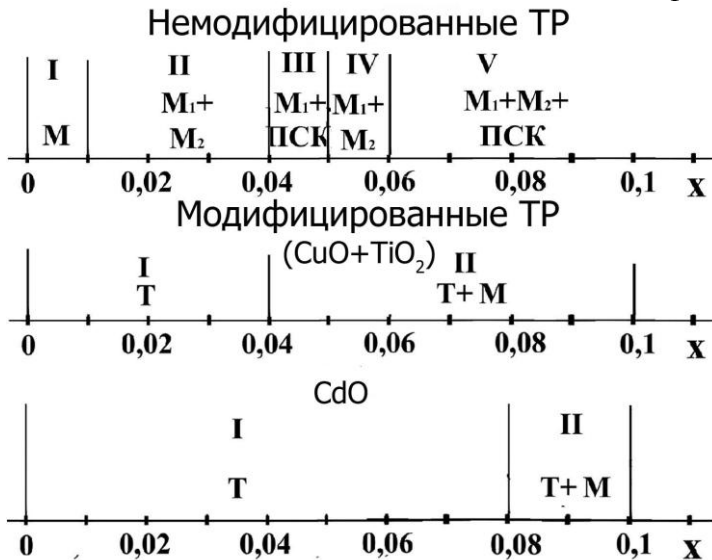


Рисунок 6 - Фазовые диаграммы немодифицированных и модифицированных ТР, полученных из гидрокарбонатов щелочных металлов.

Синтез осуществлялся в 2 стадии $T_{\text{синт.}} = (850 \div 870)^{\circ}\text{C}$ в течение $\tau_1 = \tau_2 = 6$ час. Спекание - $T_{\text{сп.}} = (1110 \div 1160)^{\circ}\text{C}$ в течение 1 час. В качестве исходных реагентов использовали гидрокарбонаты ЩМ.

Введение модификаторов позволило расширить интервалы оптимальных температур синтеза и спекания ТР, исключить явления их гидролиза и чрезмерного анизотропного роста зерен.

Общей особенностью изображённых на рисунке фазовых картин является наличие обширных областей сосуществования различных фаз, которые и составляют большую часть фазовой диаграммы (это моноклинные (М), тетрагональные (Т) фазы и области с нечёткой симметрией, которые, в

силу слабости линий, трактуются нами как псевдокубические (ПСК)). Сложность фазового состава ТР свидетельствует о богатом полиморфизме изученных объектов.

Несмотря на трудности, связанные с интерпретацией столь сложного материала, для указанной группы можно выделить ряд четких корреляций между составом и структурой керамик. Так, в модифицированных объектах наблюдается упрощение фазовой картины и стабилизация высокосимметричных фаз.

Выделены ТР с перспективными для практических применений электрофизическими параметрами.

1. Вербенко И.А., Разумовская О.Н., Шилкина Л.А., Резниченко Л.А., Андриюшин К.П. Неорг. мат. **45**. 702. (2009).

Индукцированная кислотность поверхности оксидов

К.В. Воронина, А.В. Рудакова, А.А. Цыганенко

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Известно, что сила электроноакцепторных центров поверхности оксидов от наличия примесей и преадсорбированных молекул. Ранее было показано, что кислотность Si-ОН групп диоксида кремния увеличивается после адсорбции на нем таких кислых молекул, как CO₂, SO₂, NO₂ или H₂S и даже приводит к протонированию оснований, таких как аммиак, пиридин или 2,6-диметилпиридин [1,2]. Такой же эффект индуцированной кислотности наблюдался на оксиде магния [3] при адсорбции на нем H₂S или SO₂. Таким образом, индуцированная льюисовская кислотность, возникающая в результате взаимодействия кислотных молекул с ионами кислорода на поверхности, ожидаема. В данной работе методом представлены результаты ИК спектроскопического исследования кислотных свойств поверхности оксидов CaO, ZrO₂ и TiO₂ с помощью низкотемпературной адсорбции CO и влияние на них адсорбции молекул CO₂, SO₂, и SO₃.

Адсорбция CO на немодифицированной поверхности CaO, полученной прокаливанием гидроксида кальция при 500°C, а также гидратированной поверхности образцов, получаемой с помощью последующей адсорбции паров воды, не сопровождается появлением полос поглощения при частотах выше 2155 см⁻¹ [4]. В спектре образцов, прогретых в вакууме при 700°C обнаруживается слабая полоса при 2163 см⁻¹ [5]. Адсорбция CO₂ на CaO приводит к появлению характерных полос карбонатных ионов, последующий напуск CO при 77 К приводит к появлению полосы при 2169 см⁻¹, которая смещается при последовательной откачке, достигая 2179 см⁻¹. Адсорбция CO на CaO с предварительно адсорбированным SO₂, приводит к полосе поглощения CO, смещенной в сторону высоких частот, достигая при малых покрытиях значения 2184 см⁻¹. Еще более сильный эффект усиления электроноакцепторных центров наблюдается после приведения CaO в контакт с парами SO₃. По мере откачки максимум наиболее высокочастотной полосы смещается здесь до 2189 см⁻¹. Адсорбция 2,6-диметилпиридина на поверхности CaO не приводит к протонированию оснований с характерными полосами поглощения в области 1670-1620 см⁻¹. Таким образом, высокочастотную полосу CO можно отнести к молекулам координационно связанных с поверхностным катионом, электроакцепторная способность которого возрастает при хемосорбции кислот.

Для чистого ZrO₂, приготовленного при 773 К, наивысшее положение полосы поглощения CO было получено со значением 2206 см⁻¹, показывая тем самым сильную льюисовскую кислотность. При адсорбции SO₃ на поверхности диоксида циркония образуются поверхностные ионы сульфата, при этом сдвиг полосы CO при низких покрытиях достигает значения 2211 см⁻¹.

Адсорбция CO на чистой поверхности TiO₂ дает высокочастотную полосу 2211 см⁻¹. При модификации поверхности оксида CO₂ и SO₂ сдвиги частоты CO составляют соответственно 2216 см⁻¹ и 2218 см⁻¹.

Таким образом, взаимодействие молекул CO₂, SO₂ и SO₃, приводящее к замещению анионов O²⁻, окружающих поверхностные катионы, на анионы CO₃²⁻, SO₃²⁻, SO₄²⁻, приводит к закономерному возрастанию электроноакцепторной способности катионов поверхности по мере увеличения размеров аниона. Это проявляется в повышении частоты адсорбированных молекул CO, наблюдаемой при предельно низких покрытиях. Предельным случаем возрастания размера аниона и делокализации отрицательного заряда является случай цеолитов с малым содержанием алюминия, где отрицательный заряд размазан по каркасу цеолита, и заряд

катиона в минимальной степени ослаблен окружающими атомами кислорода. На чистой поверхности оксида, напротив, частота адсорбированных молекул наиболее низка, и соответствует крайне низкой электрооакцепторной способности катионов кальция.

1. Tsyganenko A.A., Storozheva E.N., Manoilova O.V., Lesage T., Daturi M., Lavalley J.-C. Catal. Lett. **2000**, 70, 159.
2. Travert A., Manoilova O.V., Tsyganenko A.A., Maugé F., Lavalley J.-C. J. Phys. Chem. B **2002**, 106, 1350.
3. Oliviero L., Leclerc H., Manoilova O.V., Blasin-Aube V., Maugé F., Kondratieva E.V., Poretsky M.S., Tsyganenko A.A. 14th ICC Pre-Symposium **2008**.
4. Родионова Т.А., Цыганенко А.А., Филимонов В.Н., сб. «Адсорбция и адсорбенты» **1982**, 10, 33.
5. M.A.Babaeva, D.S.Bystrov, A.Yu.Kovalgin, A.A.Tsyganenko. J.Catalysis **1990**, 123, 396.

Спиральная цепочка потенциалов нулевого радиуса

А. А. Григорькин¹

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константиновой*

В последние годы метод потенциалов нулевого радиуса нашел широкое применение в расчетах транспортных свойств квазиодномерных систем и при изучении структуры спектра наноструктур. Суть метода состоит в замене потенциальной ямы малого радиуса граничным условием для волновой функции в точке нахождения ямы. Потенциалами нулевого радиуса моделируются заряженные и нейтральные примеси в полупроводниках [1], контакты проводников [2]. В работе [3] этим методом найдена плотность состояний углеродной нанотрубки.

В данной работе исследована модель трехмерной квантовой системы, обладающей спиральной симметрией. Система представляет собой спиральную цепочку потенциалов нулевого радиуса. В зависимости от соотношения периода спирали T и межузельного расстояния b данная модель может соответствовать различным структурам: при $T \gg b$ – спиральной цепочке квантовых точек, при $T \sim b$ – нанотрубке, обладающей спиральной симметрией.

В зависимости от количества узлов, укладываемых на одном витке спирали, рассматриваемая система может обладать периодом, равным одному или нескольким периодам спирали, или не иметь периода вообще – когда период спирали и межузельное расстояние являются несоизмеримыми числами.

При вычислении электронного спектра использован метод перехода в систему координат, соответствующую симметрии задачи. Это позволило найти спектр периодической и непериодической систем и показать, что в обоих случаях он обладает зонной структурой. Найдено дисперсионное уравнение, определяющее спектр системы при любых значениях параметров. В частном случае большого периода спирали удалось найти явный вид дисперсионной зависимости электронной энергии от квазиимпульса, соответствующего движению электрона вдоль спиральной цепочки.

Аналогично прямой цепочке потенциалов нулевого радиуса, получено два типа собственных функций. Волновые функции первого типа имеют вид блоховской волны, бегущей вдоль цепочки, и экспоненциально убывающей при удалении от нее. Этим состояниям соответствует зона отрицательных энергий. Положительным энергиям отвечают собственные функции второго типа, представляющие собой результат рассеяния плоской волны на спиральной цепочке.

В общем случае зоны энергий локализованных и рассеянных на цепочке состояний отделены друг от друга щелью. Особенностью спиральной системы является

сильная зависимость ширины щели от периода спирали. При определенных значениях T_z/b щель может обращаться в ноль.

1. В.Д.Кревчик, А.В.Левашов, ФТТ. **48**, 449 (2006).
2. V. Margulis, M. Pyataev, Phys. Rev. B **76**, 085411 (2007).
3. В. А. Гейлер, О.Г. Костров, В. А. Маргулис, ФТТ. **44**, 449 (2002).

DETERMINATION OF OPTICAL PARAMETERS OF $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ SYSTEM CHALCOGENIDE GLASS-LIKE CONTAINING Sm IMPURITY

S.I. Mekhtiyeva, A. I. Isayev, R. I. Alekperov, N.T. Hasanov, G.J.Guseynov

*Institute of Physics of the Azerbaijan NAS
AZ 1143, Baku, G.Javid pr., 33*

Chalcogenide glass-like semiconductors (CGS) attract investigations as perspective materials for use in IR technique, various switching, memory and also acoustooptical devices. It's connected with such unique properties of mentioned materials as the change of structure and electron properties under the effect of light, in particular occurrence of unpaired spins registered by electron spin resonance and photoluminescence with Stokes shift and etc. Interest of CGS materials is due to the fact that their most local states relate to charged defects D^- and D^+ (U^- - centers with negative effective energy of electron correlation) which concentrations can be supervised by the introduction of impurity atoms shown as charged centers that allow parameters of electric charge transfer and photosensitivity to be improved significantly [1-2]

Use of rare-earth elements [REE] as impurities due to taking effect as mainly as charged centers and must influence on U^- centre concentrations that must be told on the electron properties. Besides mentioned impurities in CGS band gap form states attributed by 4f states of REE ions and in this case optical width of CGS band gap overlaps in energy to the utmost possible number of transitions permitted for REE ions (Sm) that leads to significant change of optical, photoelectric and electric properties [3]. Insight into mechanism of electron processes responsible for above-mentioned peculiarities requires complex investigation of structure and physical properties.

Given paper deals with the investigation of $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ system CGS containing Sm impurity, especially determination of such fundamental parameters as optical width of "band gap", refractive index also extinction coefficient which are closely allied with atomic and electron structure of the material and energy spectrum of electron states. Knowledge of mentioned parameters is also important for checking perspective material for optoelectronic aims. Choice of given composition is due to the fact that it is more stable both in structure and in electron properties [2].

Synthesis of $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ composition CGS with Sm impurity has been carried out by melting appropriate quantity of chemical elements of special purity in vacuum quartz ampoules at over 900°C in rotary furnace with subsequent cooling in OFF regime. Impurity is made in synthesis process, its concentration is within $0.01 \div 1$ at%. Optical transmission spectrum has been studied by method of two-beam spectroscopy in energy interval $1 \div 2,8\text{eV}$ all experiments have been made out at room temperature.

By investigation of optical properties of $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ composition CGS with different content of Sm impurity there has been determined refractive index and extinction coefficient. It is shown that dependence of these values on Sm atom concentration has non-monotonic behaviour: small concentrations (up to 0.05 at %) increase their values and big ones decrease their values. Taking

into consideration CGS of $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ system structural peculiarities, i.e. presence of ordered microregions with high coordination number, remote from one another by regions with low atomic density it is concluded that optical properties can be explained within Penn model.

1. Isayev A.I., Kazakova Z.P., Lebedev E.A., Mekhtiyeva S.I., Yatlinko I.I. "Method of Se-As typed chalcogenide glass-like semiconductors production" A.S. №1512015., Moscow, 1989.
2. Isayev A.I., Kazakova Z.P., Lebedev E.A., Mekhtiyeva S.I., Yatlinko I.I. "Local states controlling carrier transfer in glass-like semiconductors of Se-As system and influence of galogen impurities." CV.: Defects in semiconductors Petersburg, pp. 61, (1992)
3. Isayev A. I., Mekhtiyeva S.I., Rzayev A. K. Turkish.J. of Physics, **22**, 263(1998)

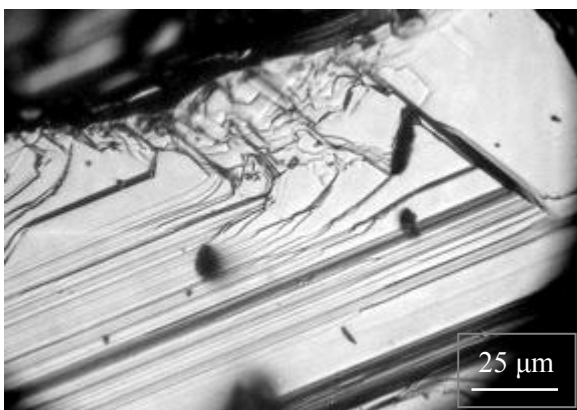
МИКРО- И НАНОМЕХАНИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ТРОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИТТРИЯ

З. Даницэ

*Университет Академии Наук Молдовы
Институт прикладной физики АНМ*

Тройные соединения иттербия, YbZn_2Sb_2 , принадлежат к группе типичных диамагнитных полуметаллов. Их электромагнитные свойства были изучены в работах [1-3]. Однако механические характеристики остаются мало изученными. Поэтому цель настоящей работы - изучить микроструктуру и основные механические свойства соединений YbZn_2Sb_2 . Исследования были проведены на грани (0001). Как было показано в [4], тройные соединения YbZn_2Sb_2 имеют тригональную структуру. В соответствии с этим в нашей работе кристаллографически ориентированные ступени роста были выявлены на изучаемой плоскости. Их ориентация соответствовала направлениям $\langle 1100 \rangle$ и составляла углы 60° или 120° (Рис.1).

Квазистатическая твердость (H_V) и динамическая (H_B) были использованы для исследования механических параметров. Было найдено, что кристаллы обладают средней твердостью: $H_V = 3,15$ ГПа и $H_B = 3,50$ ГПа. Модуль Юнга (E) равнялся 50,0 ГПа. Анизотропия твердости на грани (0001) была измерена микросклерометрическим методом. Максимальная и минимальная склерометрическая твердость составила 1,28 ГПа и 1,09 ГПа, соответственно. Коэффициент анизотропии твердости оказался равным $K=17,5\%$.



104

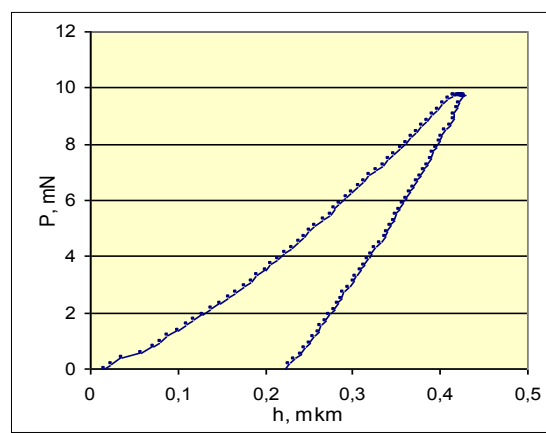


Рис.1. Оптическая микроскопия.
Поверхность тройных соединений
 YbZn_2Sb_2 на грани (0001)

Рис.2. Кривая ‘нагружение/разгрузка’ для
тройного соединения YbZn_2Sb_2 , полученная
методом динамического индентирования

Исследование кривых ‘нагружение/разгрузка’ продемонстрировало значительное упругое восстановление (Рис.2). Кривая ‘нагружение/разгрузка’ указывает на протекание довольно однородной пластической деформации с едва заметным проявлением pop-in и pop-out эффектов. В то же время вокруг отпечатков и царапин были выявлены тонкие трещины небольшого размера. Таким образом, тройные соединения YbZn_2Sb_2 проявляют одновременно как пластические, так и хрупкие свойства, обусловленные кристаллографической структурой.

1. C. Pfleiderer, R. Vollmer, M. Uhlarz, A. Faißt, H. v. Löhneysen and A. Nateprov // *Physica B: Condensed Matter*, vol. 312-313, 2002, pp. 352-353
2. T.J. Zhy, C. Yu, J. He, S.N. Zhang, and Terry M. Tritt // *Journ. of Electronic Materials*, DOI: 10.2007 / s11654-009-0667-9, 2009, TMS
3. E.I. Gladyshevskii, P.I. Kripyakevich, O.I. Bodak, *Ukr. Fiz. Zh.* 12 (1967) 447–452
4. O.Ya. Zelinska, A.V. Tkachuk, A.P. Grosvenor, A. Mar // *Chem. Met. Alloys*, v. 1, 2008, pp. 204-209

Обобщённая решёточная модель конденсированных систем с внутренними степенями свободы.

Н.В. Евстигнеева, А.Ю. Захаров, М.И. Бичурин

Новгородский государственный университет, Великий Новгород, Россия

Физические свойства реальных твёрдотельных гетерогенных систем предопределяются как характеристиками компонентов и их взаимодействий, так и технологией приготовления образцов. Важность технологии обусловлена тем, что полное термодинамическое равновесие в твёрдотельных системах, как правило, не успевает установиться за время существования образца. Это обстоятельство препятствует прямому применению методов статистической термодинамики к исследованию подобных систем.

Цель данной работы состоит в построении теории микрогетерогенных состояний систем, характеризующихся двумя типами систем свободы:

- Быстрые степени свободы, время релаксации которых значительно меньше времени существования образца;
- Медленные (“замороженные”) степени свободы, по которым равновесия не достигнуты за время существования образца.

Теория основана на обобщённой решёточной модели, приведённой к форме типа Гинзбурга–Ландау и Кана–Хилларда (ГЛКХ), в явном виде учитывающей удельные атомные объёмы компонентов, дальнедействующие части межатомных потенциалов и наличие внутренних степеней свободы компонентов (электрические и магнитные моменты атомов) [1–3].

Получены уравнения для распределения частиц в конденсированных системах в состояниях полного и неполного равновесия. Показано, что при наличии “замороженных” степеней свободы квазиравновесное распределение магнитных и электрических моментов в классической статистике подчиняется уравнению типа Шрёдингера.

1. Захаров А.Ю., Бичурин М.И., // Физика и механика материалов. Приложение к научно-теоретическому и прикладному журналу “Вестник Новгородского государственного университета”, 2009, №50, С. 11—13.
2. Zakharov, A.Yu., Bichurin, M.I. // [arXiv:0809.1495v1](https://arxiv.org/abs/0809.1495v1) [cond-mat.stat-mech] 9 Sep 2008, 17pp.
3. Zakharov, A.Yu., Bichurin, M.I. // [arXiv:0910.0861v1](https://arxiv.org/abs/0910.0861v1) [cond-mat.stat-mech] 5 Oct 2009, 12pp.
4. Zakharov, A.Yu., Bichurin, M.I., Priya S. // [arXiv:1012.0594v1](https://arxiv.org/abs/1012.0594v1) [cond-mat.stat-mech] 2 Dec 2010
5. Zakharov, A.Yu., Schneider A.A., Udovsky A.L. // [arXiv:1003.2731v1](https://arxiv.org/abs/1003.2731v1) [cond-mat.stat-mech] 13 Mar 2010

Фрустрации низкоразмерных магнетиков в магнитном поле

Ф.А. Кассан-Оглы¹, Б.Н. Филиппов¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург.

На основе точных аналитических решений одномерных моделей: Изинга [1], 3-вершинной и 4-вершинной стандартной модели Поттса [2], 4-вершинной планарной модели Поттса [3], модифицированных 6-вершинной и 8-вершинной [4], а также 12-вершинной моделей Поттса, исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций от величины внешнего магнитного поля. На основе точных решений [5,6] для двумерной модели Изинга исследованы фрустрации на треугольной и кагоме решетке. Сформулировано понятие термодинамического параметра порядка и получены выражения для энтропии и теплоемкости через этот параметр порядка. Введено количественное определение меры фрустраций. Показано, что при перевале через любую точку фрустраций (как в присутствии, так и в отсутствии магнитного поля) происходит кардинальное изменение структуры.

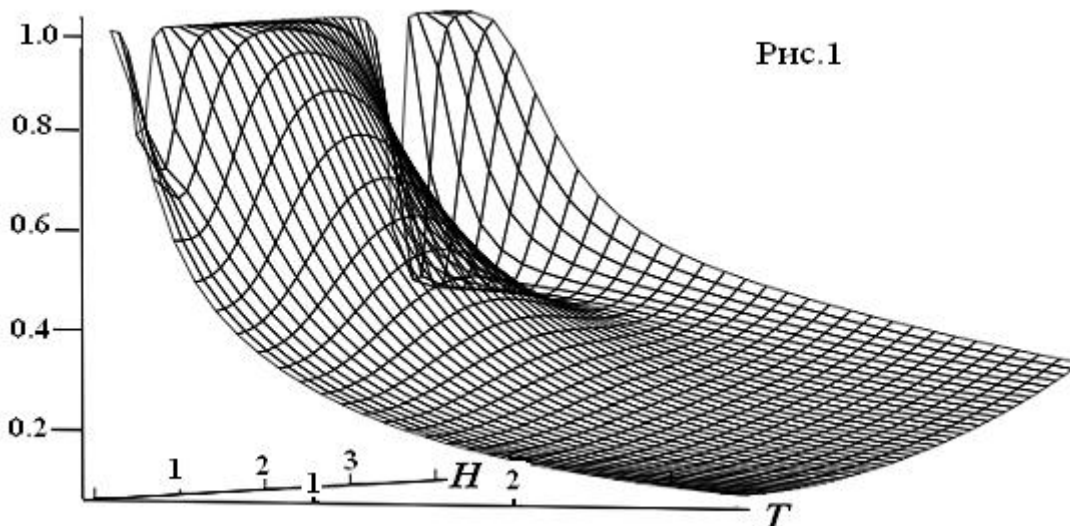
В любом случае отсутствия фрустраций (фазовый переход) при стремлении температуры к нулю термодинамический параметр порядка стремится к единице, а энтропия стремится к нулю. В противном случае наличия фрустраций (отсутствие фазового перехода) при стремлении температуры к нулю термодинамический параметр порядка стремится к величине, меньшей единицы, а энтропия стремится к величине, не равной нулю. Дополнительным свидетельством перехода в 1D случае служит стремление спин-спиновой корреляционной функции к дельта-функции при $T \rightarrow 0$. В 2D случае таким свидетельством чаще всего служит наличие острого лямбда-образного пика в теплоемкости, но в некоторых частных случаях (частичного упорядочения) лямбда-образный пик в теплоемкости отсутствует, несмотря на то, что термодинамический параметр порядка стремится к единице (температура фазового перехода равна нулю).

Основные формулы.

Термодинамический параметр порядка η , энтропия S , теплоемкость C , мера фрустраций f :

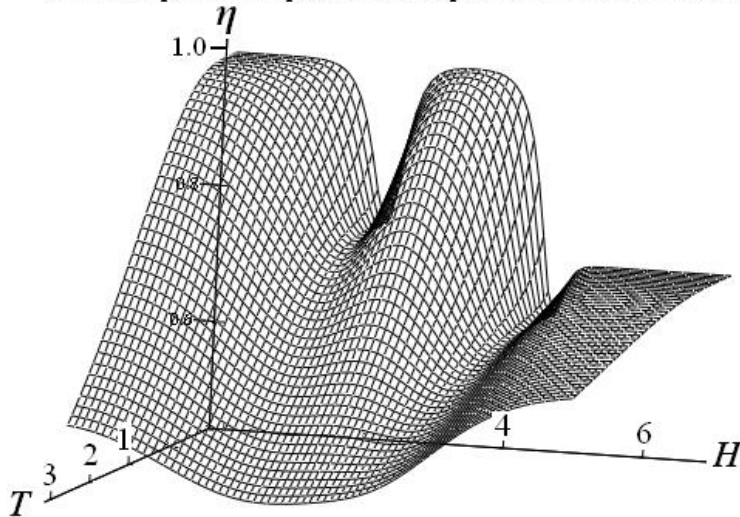
$$\eta = \frac{-1}{\ln(q)} \cdot \frac{d}{dT} \left(T \cdot \ln \frac{\lambda}{q} \right) \quad (1), \quad S = \ln(q) \cdot (1 - \eta) \quad (2), \quad C = -T \ln(q) \cdot \frac{d}{dT} \ln \eta \quad (3), \quad f = (1 - \eta(T=0))$$

где q – это число состояний на узле решетки, определяемое гамильтонианом модели.



В качестве примеров на рис.1 изображена зависимость параметра порядка от T и H в одномерной модели Изинга с отрицательными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями, а на рис.2 – зависимость параметра порядка от T и H в одномерной 12-вершинной модифицированной модели Поттса только с отрицательным взаимодействием между ближайшими соседями.

Рис.2. Параметр порядка в 12-вершинной модели Поттса



На рис. 3 изображена зависимость меры фрустраций от числа вершин в одномерной стандартной модели Поттса. Из рис.3 следует, что мера фрустраций растет с ростом числа состояний на узле, однако это тенденция может быть и обратной.

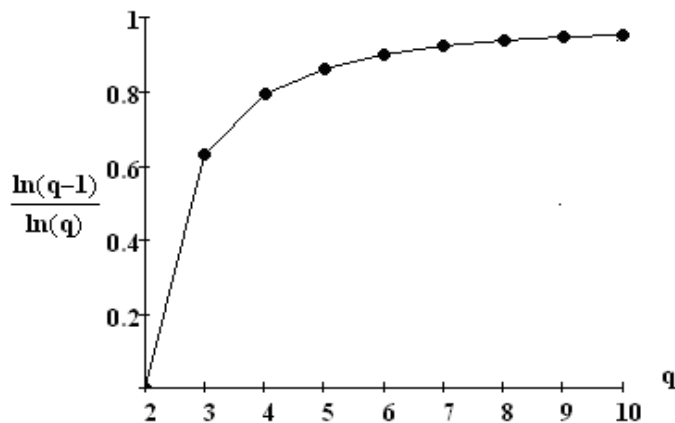


Рис.3. Зависимость меры фрустраций от числа вершин в стандартной модели Поттса.

Работа поддержана РФФИ, проект № 10-02-00435 и проектом Президиума УрО РАН, № 09-Т-2-1015.

1. Kassan-Ogly F.A., *Phase Transitions* **74**, 353, (2001).
2. Kassan-Ogly F.A., *Phase Transitions* **71**, 39, (2000).
3. Кассан-Оглы Ф.А., Найш В.Е., Сагарадзе И.В., *ФММ*. **98**, 5, (2004)
4. Kassan-Ogly F.A., *Phase Transitions* **72**, 223, (2000).
5. R.M.F. Houtappel, *Physica*. **16**, 425, (1950).
6. K. Kano, S. Naya, *Prog. Theor. Phys.* **10**, 158, (1953).

ПОЛИТИПИЯ И КАСКАДЫ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Ф.А. Кассан-Оглы¹, А.Е. Шестаков², В.Е. Архипов¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург.
²РФЯЦ – ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия

Политипия (частный случай полиморфизма) — способность вещества кристаллизоваться в виде нескольких модификаций, каждая из которых при двух идентичных параметрах элементарной ячейки отличается лишь третьим, зависимым чаще всего от расстояния между соседними слоями. Политипные модификации представляют собой различные варианты наложения одинаковых двумерных структурных фрагментов и различаются способом и периодичностью их наложения. При этом два параметра решетки неизменны, а третий меняется, оставаясь кратным постоянной величине.

Политипия может существовать даже при одной температуре, если разности свободных энергий разных кристаллических структур данного вещества (или разных состояний атомов) порядка энергии теплового движения атомов, причем сами свободные энергии на несколько порядков выше. В противном случае полиморфные превращения реализуются как структурные фазовые переходы (или каскады переходов) по температуре. Эти каскады переходов могут различаться в зависимости от скорости изменения температуры.

Построена теория одиночных структурных фазовых превращений из высокотемпературной ОЦК структуры (прародитель) в ГЦК, ГПУ, ДГПУ и каскадов фазовых переходов на основе псевдоспинового гамильтониана Изинга, описывающего кооперативные колебания плоскостей атомов в двукратном потенциале [1].

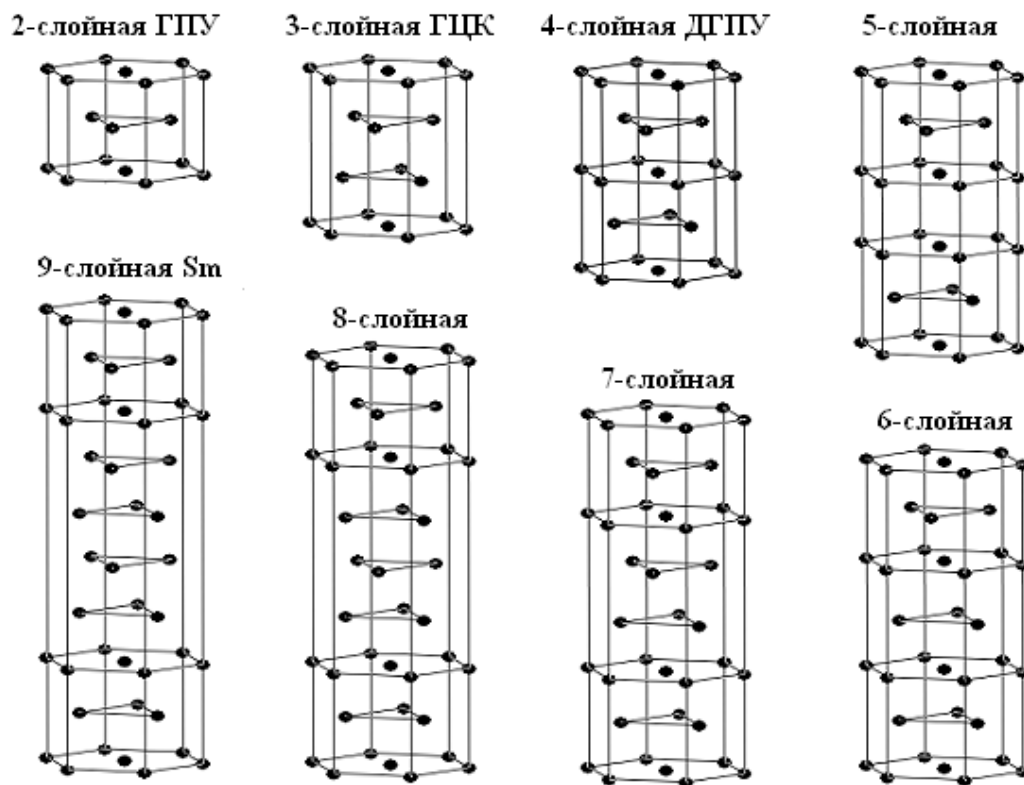


Рис.1. Плотноупакованные структуры, получающиеся из высокотемпературной ОЦК структуры.

Рассчитана картина высокотемпературного диффузного рассеяния, а также совместная перестройка исходных Брэгговских рефлексов и эволюция диффузного рассеяния в Брэгговские рефлексы при переходах в низкотемпературные фазы [2]. Развитый подход объясняет существующие переходы и предсказывает новые переходы в другие плотноупакованные структуры (рис.1). Обсуждается возможность обобщения теории на множественные полиморфные превращения (рис.2) в кристаллах с высокотемпературной структурой типа α -AgI.

В высокотемпературной ОЦК фазе (прародитель) существуют колебания 6 семейств плоскостей типа $\{110\}$, а в обратном пространстве модулированные Брэгги и диффузные стержни (6 семейств). Все эти колебания и всё это рассеяние описывается 6-компонентным параметром порядка:

$$\eta = (\eta_{xy}, \eta_{x\bar{y}}, \eta_{yz}, \eta_{y\bar{z}}, \eta_{zx}, \eta_{z\bar{x}}) \quad .$$

Из решения системы 6 уравнений для параметра порядка следует, что при высоких T компоненты равны, а при понижении T в некоторой точке один из компонентов скачком возрастает, а остальные 5 падают (фазовый переход 1-го рода). В результате возникает новая фаза, а кристалл разбивается на домены с шестью ориентировками.

В частном случае отрицательного (положительного) взаимодействия только между ближайшими соседями новая фаза — это почти ГПУ (ГЦК), но в ней ещё сохраняется одно семейство диффузных стержней, которые при $T \rightarrow 0$ превращаются в Брэгги, так что при $T=0$ новая фаза превращается в точную ГПУ (ГЦК), причем в каждом переходе существует подгрупповая связь (выполняется гипотеза Ландау).

Учет взаимодействий между вторыми, третьими, и т.д. соседями в псевдоспиновом гамильтониане дает возможность получить многослойные плотноупакованные структуры.

Подобные полиморфные превращения происходят и в кристаллах с высокотемпературной фазой типа α -AgI (прародитель).

Работа поддержана проектом Президиума УрО РАН, № 09-Т-2-1001

1. Кассан-Оглы Ф.А., Архипов В.Е., Шестаков А.Е., *ФММ*, **109**, 608 (2010)
2. Kassan-Ogly F.A., Naish V.E. and Sagaradze I.V., *Phase Transitions*, **49**, 89 (1994).

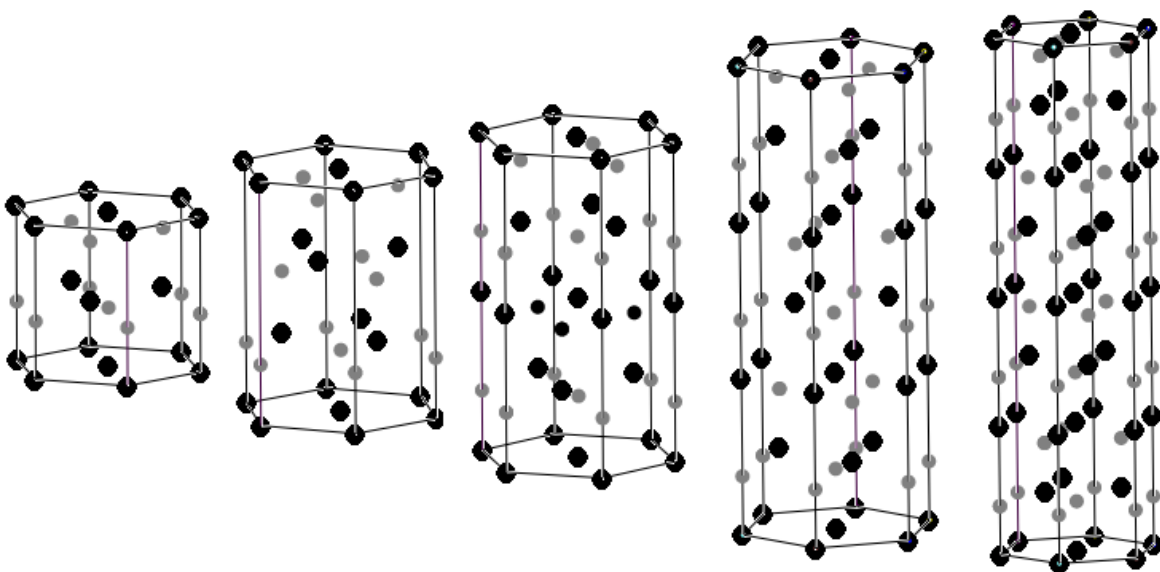


Рис.2. Структуры, получающиеся из высокотемпературной структуры типа α -AgI

Магнитокалорический эффект сплавов Гейслера в области магнитоструктурного перехода

Ю.С. Кошкидько

¹ *Тверской государственной университет*

В последнее время, появилось множество работ посвященных исследованию сплавов Гейслера со стехиометрическим составом $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ (1,2). Причиной этого является то, что в данных соединениях помимо магнитного фазового перехода, наблюдается структурный переход. В соединениях со стехиометрией $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$, существует область, в которой температура Кюри T_C совпадает с температурой мартенситного превращения T_m (2). Вследствие чего, в соединении $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ ($0,18 \leq x \leq 0,27$), мартенситный и магнитный переходы протекают слитно, как единый магнитоструктурный фазовый переход I-го рода, который может сопровождаться такими явлениями, как гигантский магнитокалорический эффект (МКЭ) и магнитная память формы (1).

В большинстве работ посвященных исследованию МКЭ в сплавах Гейслера, исследование величины МКЭ проводятся косвенными методами, однако, наиболее полную информацию о величине МКЭ можно получить лишь прямым измерением величины МКЭ.

На основании этого, в данной работе были поставлены следующие задачи: провести прямое измерение величины МКЭ и сопоставить их с литературными данными полученными косвенными методами.

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009 - 2013 годы и при поддержке гранта РФФИ 09-02-01274.

1. V. V. Khovaylo, K. P. Skokov, Yu. S. Koshkid'ko and al. Adiabatic temperature change at first-order magnetic phase transitions: $Ni_{2,19}Mn_{0,81}Ga$ as a case study// Phys. Rev. B, **78**, , P. 060403-1 (2008)
2. V. V. Khovaylo, V. D. Buchelnikov and al. Phase transitions in $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ with a high Ni excess// Phys. Rev. B **72**, P. 224408 (2005)

Исследование структурных свойств бидисперсной магнитной жидкости

Е.В.Крутикова¹, Е.А.Елфимова¹

¹ *Уральский государственный университет им. А.М.Горького, Екатеринбург*

Магнитные жидкости (феррожидкости) представляют собой высокодисперсные системы из ферро- или ферромагнитных частиц в жидких носителях. Магнитные жидкости широко применяются в различных отраслях промышленности (автомобильная, строительная и т.д.). В медицинской сфере данным системам уделяется особенное внимание, как перспективному материалу для ранней диагностики заболеваний и раковой терапии.

Магнитные жидкости обладают рядом уникальных свойств, обусловленных их структурой. Информацию о внутренней структуре магнитных жидкостей можно получить, зная парную корреляционную функцию $g(\vec{r})-1$, которая имеет смысл плотности вероятности нахождения двух случайно выбранных частиц на заданном расстоянии.

По своей природе магнитные жидкости полидисперсны, однако качественное поведение свойств можно отследить уже на частицах двух размеров. В рамках бидисперсной модели, где все частицы формально делятся на два класса (частицы с разными диаметрами, условно «мелкие» и «крупные»), необходимо отдельно рассматривать характерные расстояния между центрами частиц – r_{ss} («мелкая» - «мелкая»), r_{ll} («крупная» - «крупная») и r_{sl} («мелкая» - «крупная»), и строить соответствующие им различные составляющие парной корреляционной функции. Метод расчета парных корреляционных функций подробно описан в работах [1, 2] для случая моделирования частиц монодисперсными дипольными мягкими \ твердыми сферами.

В работе построены парные корреляционные функции для трех характерных расстояний, проведен их анализ. Применяя преобразование Фурье к построенной парной корреляционной функции, вычислен структурный фактор бидисперсной системы дипольных твердых сфер. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН г/к 02.740.11.0202 и гранта Президента МК-1673.2010.2.

1. Елфимова Е.А., Иванов А.О., ЖЭТФ, **137**, 1, (2010).

2. Cerda J., Elfimova E., Ballenegger V., Krutikova E., Ivanov A., Holm C., Physical Review E., **81**, (2010).

Первопринципные расчеты фазовой диаграммы натрия при высоких давлениях и температурах

С. В. Лепешкин^{1,2}, Е. Г. Максимов¹, М. В. Магницкая³

¹*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва*

²*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.*

³*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московская обл.*

В настоящей работе с помощью двух первопринципных подходов исследовано плавление натрия при высоких давлениях и температурах. В первом из них, основанном на расчетах фононных частот и среднеквадратичных отклонений атомов в квазигармоническом приближении, температура плавления определялась по критерию Линдемана. Показано, что недавно открытое аномальное плавление Na хорошо объясняется поведением при сжатии фононного спектра и, соответственно, амплитуд тепловых колебаний. В рамках данного подхода удалось количественно описать немонотонное поведение кривой плавления $T_m(p)$ натрия в очень широком интервале давлений и температур, и в частности, падение температуры плавления при $p \sim 1$ Мбар до более низких значений, чем при нормальном давлении.

Во втором подходе $T_m(p)$ определялась с помощью молекулярно-динамического моделирования нагрева твердой фазы вплоть до плавления. Этот подход позволяет адекватно описывать свойства материалов при конечных температурах с полным учетом ангармонических эффектов. В этом случае T_m определялась по возникновению диффузии в жидкой фазе.

Результаты, полученные с помощью обоих подходов, хорошо согласуются между собой, а также с экспериментальной кривой плавления Na в ОЦК и ГЦК фазах в диапазоне давлений до ~ 1 Мбар и температур от 300 до 1000 К. Хорошее согласие двух подходов говорит о малости эффектов ангармонизма в натрии.

1. С.В. Лепешкин, М.В. Магницкая, Е.Г. Максимов "Динамика решетки и особенности плавления щелочных металлов Li и Na", Письма в ЖЭТФ **89**, 688 (2009).

2. Е. Г. Максимов, С. В. Лепешкин, М. В. Магницкая "Первопринципные расчеты динамики решетки и фазовой диаграммы натрия при высоких давлениях и температурах", Кристаллография **56**, 2011.

Испытания нейтронного рефлектометра-малоуглового спектрометра на импульсном источнике нейтронов ИН-06

*В.С. Литвин¹, В.А. Трунов², В.А. Ульянов², А.П. Булкин², С.И. Калинин²,
М.Р. Колхидашвили², Р.А. Садыков¹, Э.А. Коптелов¹*

¹ *Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия*

² *Петербургский институт ядерной физики РАН, Гатчина, Россия*

На импульсном испарительном (spallation) источнике нейтронов ИН-06 ИЯИ РАН (г. Троицк) сооружена многофункциональная установка «Горизонт», которая может работать и как времяпролетный нейтронный рефлектометр с вертикальной плоскостью рассеяния нейтронов, и как малоугловой спектрометр. Вертикальная плоскость рассеяния позволяет исследовать методом нейтронной рефлектометрии поверхности и границы раздела жидкостей.

Установка состоит из зеркального изогнутого нейтроновода, двух автоматизированных коллимирующих щелевых устройств, отклоняющего суперзеркала, виброустойчивого узла образца и консоли с детектором нейтронов. Нейтроновод имеет зеркальный канал длиной 7 м, изогнутый в вертикальной плоскости, с радиусом кривизны 520 м. Верхние и боковые стенки канала представляют собой многослойные суперзеркала NiMo/Ti с $m=2$, а нижние стенки – Ni-зеркала с $m=1$. Нейтроновод обеспечивает увеличение плотности потока тепловых и холодных нейтронов на образце и задерживает нейтроны с длиной волны менее 1 Å. Угол падения пучка нейтронов на образец может изменяться с помощью отклоняющего суперзеркала NiMo/TiZr с $m=2$. Планируется оснащение установки двухкоординатным детектором нейтронов, который позволит наблюдать анизотропию малоуглового рассеяния, а также малоугловое рассеяние при скользящих углах (GISANS). Установка может быть оснащена зеркалом-поляризатором, анализатором поляризации и спин-флипперами для рефлектометрии на поляризованных нейтронах.

В январе 2011 г. Был произведен пуск источника и получены спектры прямого пучка в позиции образца с отклоняющим суперзеркалом и без него, а также расходимость пучка, падающего на образец.

Исследование структуры сплава 40ХНЮ методом малоуглового рассеяния нейтронов

Р. А. Садыков^{1,2}, В. С. Литвин¹, А. В. Гулютин², M-S. Arravou³, А. Ioffe³

¹ *Институт ядерных исследований РАН*

² *Институт физики высоких давлений РАН*

³ *Julich Center for Neutron Science, Germany*

Сплав 40ХНЮ (Ni 58%, Cr 39%, Al 3%) является перспективным материалом, т. к. обладает твердостью, не уступающей закаленным сталям (до 60 ед. по Роквеллу), и в то же время низкой магнитной восприимчивостью (не более $3,5 \times 10^{-6}$ см³/г) [1, 3]. Одно из применений сплава — немагнитные камеры высокого давления системы поршень-цилиндр, которые могут применяться для нейтронографических исследований [1, 3]. Данный сплав после закалки (нагрева до 1150-1250 °С и быстрого охлаждения) становится мягким. Для достижения заданной твердости сплав после закалки подвергают отжигу при температурах до 650 °С [1-3].

Методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) были исследована структура сплава в зависимости от температуры отжига, а следовательно, и от твердости. Измерения были проведены на малоугловом дифрактометре KWS-II на реакторе FRM-II (Мюнхен, Германия). Спектры МУРН не подвергавшихся отжигу закаленных образцов имеют три характерных участка, из чего можно сделать вывод о наличии частиц трех видов: с характерными размерами более 500 нм, с характерными размерами около 10 нм и менее 1 нм. Отжиг при температурах выше 450 °С приводит к увеличению размеров наночастиц до 20 нм. Отжиг при температурах 450-650 °С приводит к увеличению концентрации данных наночастиц.

1. Y. Uwatoko, S. Todo, K. Ueda, A. Uchida et al., J. Phys.: Condens. Matter, **14**, 11291 (2002).

2. Б. В. Мотовилов (ред.). Прецизионные сплавы. Справочник. М.: Наука, 1974, 521 с.

3. R. A. Sadykov, N. S. Bezaeva, A. I. Kharkovskiy, P. Rochette, J. Gattaccea, V. I. Trukhin, Rev. Sci. Instrum. **79**, 115102 (2008).

Моделирование каналирования атомарных и молекулярных структур в углеродных нанотрубках

И. В. Лысова, А. В. Степанов

ГОУ ВПО «ЧГПУ им.И.Я. Яковлева», Чебоксары

Одним из важнейших методов исследования наноматериалов является построение их компьютерных моделей. В работе средствами компьютерного моделирования исследуется каналирование атомарных и молекулярных структур в углеродных нанотрубках. Взаимодействие частиц с атомами УНТ и самих атомов УНТ друг с другом описывается с применением различных модельных потенциалов. В расчетах учитываются потери энергии каналирующих частиц на электронном газе. Рассматривается каналирование таких частиц, как молекулярный ион водорода и молекула водорода в УНТ разной хиральности, в изогнутых УНТ, исследуется степень закручивания молекулярных структур, каналирующих в хиральных и изогнутых нанотрубках. Также исследуется фокусировка атомных и молекулярных структур вблизи оси нанотрубки. Как известно, в центральной части нанотрубки значения потенциала взаимодействия движущейся частицы с атомами УНТ на несколько порядков ниже, чем у стенок. Степень фокусировки каналирующих частиц в УНТ зависит не только от поперечного размера УНТ, но и от ее хиральности. В работе показано, что концентрация каналирующих частиц в центральной части выше для нанотрубок с промежуточной хиральностью.

Вторичный ионный фотоэффект на ионах кремния

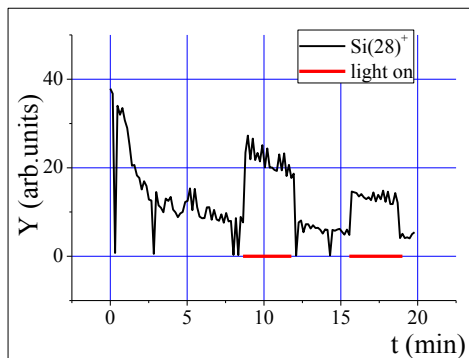
М. Д. Матасов¹, А. Г. Роках¹

¹*Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского*

Вторично–ионный фотоэффект (ВИФЭ) заключается в изменении выхода вторичных ионов из полупроводниковых фотопроводящих мишеней, при освещении мишени светом [1,2].

Изначально это явление, как полагалось, может наблюдаться на очень узком классе материалов. Этими материалами являлись твёрдые ограниченные растворы сульфида свинца и кадмия $CdS(x)-PbS(1-x)$ [3]. Образцы представляли собой гетеро фазные фотопроводящие полупроводники, изучаемыми ионами являлись ионы кадмия, свинца, а также их оксидов. Все ионы были однократно положительно ионизованы.

В процессе исследований были выделены два типа эффекта нормальный и аномальный. Нормальный эффект заключался в уменьшении выходы вторичных ионов из мишени, а аномальный в увеличении этого выхода. Объяснения нормального эффекта можно было найти в литературе. Аномальный эффект не предсказывался учёными работающими в области масс-спектрометрии. Первое объяснение этого явления было сформулировано, основываясь на наличие пространственно энергетического рельефа.



Присутствие включений с разной шириной запрещённой зоны и разного размера, обеспечивало накачку широкозонной фазой узкозонную, тем самым расшатывая решётку увеличивая интенсивность распыления в целом, а в частности, и выход вторичных ионов узкозонной фазы.

При изучении явления выяснилось, основным условием, наличия реакции на свет изменения выхода вторичных ионов является наличие фотопроводимости у вещества. В первоначальных исследованиях использовалось

химическое распыление ионами кислорода, последующие эксперименты были проведены на ионах аргона. Также впервые был расширен класс веществ, на которых исследовался ВИФЭ. Явление стало изучаться на двух типах оксида кремния $Si(II)O$, и $Si(IV)O_2$. Явление присутствовало и при кинетическом распылении, но у него наблюдалась одна особенность, для всех типов ионов наблюдался только аномальный эффект, только увеличение выхода положительно заряженных ионов. На рисунке приведён пример изменения выхода ионов кремния при освещении $Si(II)O$ во время его травления. Объяснение такой особенности можно связать с энергетическим строением зон на поверхности данного оксида. Наличие реакции на свет ионов, широко применяемого вещества оксида кремния имеет большое значение. Этот факт показывает, что главная причина явления это наличие фотопроводимости у материала. При распылении $Si(IV)O_2$ тоже наблюдался аномальный фотоэффект. Реакция на свет ионов имела слабую зависимость от того в сколько материала было стравлено.

1. А.Г. Роках, М.Д. Матасов. Парадоксы фотопроводящей мишени и оптическое управление выходом вторичных ионов. // ФТП, 2010, т 44, в 1, С 101-108.

2. А.Г. Роках, М.Д. Матасов, А.Г. Жуков. Спектральное управление вторично- ионным фотоэффектом путь к оптоионике// Российские нанотехнологии. – 2010. Т. 5, в. 5-6. – С. 69-74.

3. A.G. Rokakh, A.A. Serdobintsev, S.V. Stetsyura, A.G. Zhukov, M.D. Matasov, I.V. Malyar. Optical Control of Ion Sputtering // Handbook on Mass Spectrometry: Instrumentation, Data and Analysis, and Applications / Ed. by J. K. Lang. – Nova Science Publishers, 2009, pp.325-344.

Особенности фазового сегнетоэлектрического перехода в перовскитах

Н.Л. Мацко, Е.Г. Максимов.

Физический институт имени П.Н.Лебедева Российской академии наук (ФИАН).

С помощью молекулярно-динамического (MD) моделирования были вычислены статические и динамические корреляционные функции кристалла BaTiO_3 . На основе зависящих от времени парных корреляционных функций были рассчитаны фоновые спектры BaTiO_3 и изучен центральный пик неупругого рассеяния. Показано, что фоновые частоты, вычисленные методом MD, достаточно хорошо совпадают с полученными нами ранее в квазигармоническом приближении. Продемонстрировано, что центральный пик неупругого рассеяния связан, в основном, с мягкой оптической модой и обладает той же симметрией. Совпадение симметрий позволяет объяснить, как наличие особенностей в рассеянии рентгеновских лучей, так и особенностей EXAFS спектроскопии.

Расчет тройных корреляционных функций показывает, что особенности взаимных распределений ионов кислорода и титана - следствие движения этих ионов в составе анизотропной квазиодномерной мягкой моды. Как показано в работе с помощью MD-моделирования, центральный атом титана совершает колебания вокруг центра кубической ячейки. Это свидетельствует о реализации фазового перехода типа смещения, а не перехода порядок-беспорядок. Подчеркнем, что наша MD-модель хорошо объясняет наличие центрального пика неупругого рассеяния и его свойства, а также особенности в диффузном рассеянии рентгеновских лучей.

1. Е.Г. Максимов, Н.Л. Мацко. ЖЭТФ, **135**(3), 1(2009).
2. E.G. Maksimov, N.L. Matsko, S.V. Ebert et al. Ferroelectrics **354**, 19(2007).

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МЕХАНИЗМ РЕЛАКСАЦИИ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ ТВЕРДЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ (ГОРНЫХ ПОРОД)

Х.Ф. Махмудов, А. Г. Кадомцев, В.С. Куксенко

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург*

Исследовали механо-электрические эффекты при слабой электрической поляризации и упругой деформации образцов из мрамора. Регистрация индуцированного электрического потенциала производилась бесконтактным способом при помощи изготовленного в лаборатории электрометра (ЭМ) с большим входным сопротивлением с последующими записями сбора и обработки входных токов в систему А-Line 32D. Показано, что релаксация потенциала при поляризации и механическом нагружении идентична по природе и контролируется термическими флуктуациями. Получена температурная зависимость среднего времени релаксации. Определена энергия активации этого процесса.

Ключевые слова: диэлектрик, деформирование, мрамор, электрометр, поляризация, релаксация заряда, индуцированное электрическое поле, энергия активации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-05-00639) и ФЦП, госконтракт № 02.740.11.0315.

1. Журков С.Н., Куксенко В.С., Махмудов Х.Ф., Панамарев А.В. // ДАН. 1997. т.35. в.4. С. 470-472.

Эволюция диэлектрических спектров механоактивированных релаксорных материалов

А.И. Миллер¹, А.А. Гусев², Л.А. Шилкина¹, Л.А. Резниченко¹

¹Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета

²Новосибирск, Россия, Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Рассмотрена роль механоактивации в формировании диэлектрических спектров релаксорного материала состава $(\text{Pb}_{0,95}\text{Ba}_{0,05})[(\text{Nb}_{2/3}\text{Zn}_{1/3})_x(\text{Nb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3})_z(\text{Nb}_{2/3}\text{Ni}_{1/3})_m\text{Ti}_y]\text{O}_3$.

Смесь исходных реагентов, в том числе, предварительно синтезированных ниобатов магния, никеля, цинка механически обрабатывали в шаровой планетарной мельнице АГО-2 [1, 2] в течение (τ) (5÷25) мин., далее синтезировали при 950°С 4 час., с последующим выбором оптимальной температуры спекания ($T_{\text{сп.}}$) на серии проб с вариацией $T_{\text{сп.}}$ от 1100°С до 1200°С. Фазовый состав оценивали рентгенографически на дифрактометре «ДРОН-7». Плотность определяли методом гидростатического взвешивания в октоне.

Как видно из рисунка а), наиболее целесообразными условиями получения являются: механоактивация шихт в течение 10 минут с последующим спеканием синтезированных материалов при 1160°С, 2 час. При этих условиях в сформированной перовскитовой структуре отсутствуют пироклорная и другие примеси. Плотность образцов при этом достигает значений $\sim 7,9 \text{ г/см}^3$, что составляет 97% от теоретической и на 4% выше, чем реализуется в неактивированных средах при этой температуре.

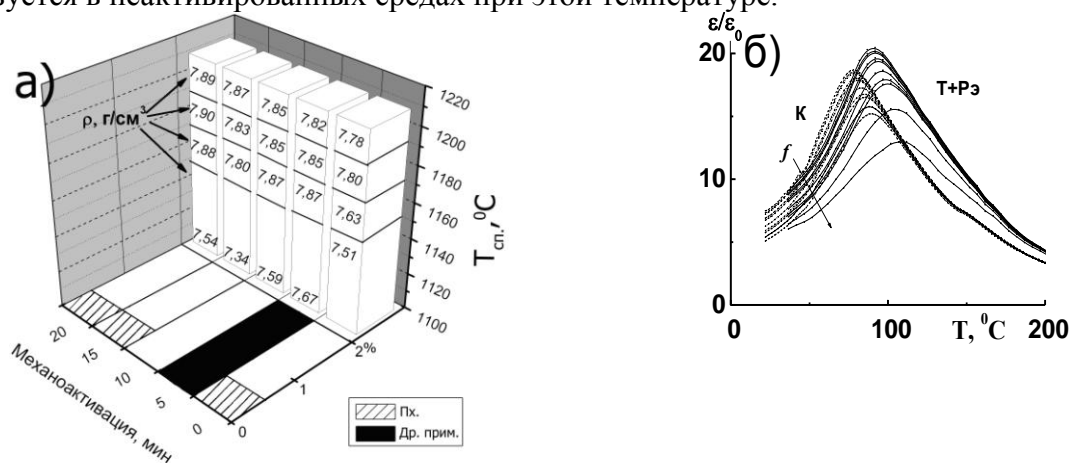


Рис. а) – значения плотностей материала при разных температурах спекания, количество примесей различного состава (пироклора, - пх., и непироклорных примесей, - др. прим.) в зависимости от времени механоактивации шихты. б) – термочастотные зависимости относительной диэлектрической проницаемости (ϵ/ϵ_0) механоактивированных (пунктирные линии) и немеханоактивированных (сплошные линии) составов.

При механоактивации, кроме увеличения плотности материала, наблюдается изменение его фазового состава (тетрагональная+ромбоэдрическая фаза, Т+Рэ, «переходит» в кубическую фазу, К) (рисунок б)), уменьшение глубины дисперсии, рассчитанной в точке фазового перехода вдвое (с 7278 до 3494) и смещение максимумов ϵ/ϵ_0 в область более низких температур на 14 градусов.

Наблюдаемое может быть связано с изменением дефектной ситуации в исследуемом материале, а также с инициированным механоактивацией фазовым переходом.

1. Patent RF. No.1584203A1, В О2 С17/08. *Planetary mill.*/ Avvakumov E.G., Potkin A.M., Bertznyak V.M. Publ. 18.06.87.)

2. Avvakumov, E.G, *Mechanical methods activation of chemical processes*; Nauka, Siberian Branch: Novosibirsk.1986. pp.1-304.

Моделирование процесса управления формированием сложных вихревых структур в ВТСП

С. Н. Мохненко¹, А. П. Преображенский¹

¹ *Воронежский Институт Высоких Технологий*

Особое место в исследовании высокотемпературной сверхпроводимости занимает компьютерное моделирование динамики вихрей Абрикосова в присутствии точек пиннинга [1], в силу необходимости учёта большого числа факторов.

При рассмотрении вихревой решётки Абрикосова часто проводят аналогию с кристаллической решёткой твёрдого тела. Особенно интересным моментом в данной аналогии является процесс "плавления" вихревой решётки с образованием так называемой "вихревой жидкости". Экспериментально было доказано что данный фазовый переход является переходом первого рода [2]. При понижении температуры возможен и обратный процесс - замерзания вихревой жидкости в вихревое стекло, который в отличие от плавления является фазовым переходом второго рода [3-4]. Вихревое стекло в отличие от вихревой решётки состоит разупорядоченном расположении вихрей.

Принципиальное отличие смешанного состояния в ВТСП от обычных низкотемпературных сверхпроводников кроется в наличии у первых сильных термических флуктуаций. Вместе с флуктуациями другого рода всё это при повышении температуры приводит к переходу вихревой структуры в вихревую жидкость намного раньше чем фазовый переход их сверхпроводника в нормальное состояние. Это означает что какое-то время в сверхпроводнике существует динамическая вихревая структура.

Основная идея данной работы заключается в моделировании попыток сформировать вихревые структуры заданной формы за счёт управления динамикой вихревой жидкости путём динамического пиннинга и динамическом нагреве определённых точек в сверхпроводнике. Используя фазовый переход в вихревое стекло мы можем зафиксировать необходимое нам положение вихрей.

В рамках теории Гинзбурга-Ландау было проведено имитационное моделирование поведения вихревой жидкости. Суть модели заключалась в следующем - функционал Гинзбурга-Ландау выражался в виде гамильтониана системы, который представляет собой сумму энергий взаимодействия различных типов вихрей между собой и с точками пиннинга. Моделирование проводилось на дискретном числе точек на поверхности сверхпроводника. На каждом шаге моделирования, последовательно для каждого вихря вычислялся гамильтониан системы, после этого вихрь поочередно перемещается в каждую из восьми точек окружающих изначальное положение вихря. Для каждого нового положения заново рассчитывается гамильтониан системы. Далее определяется точка с минимальным гамильтонианом. В это место перемещается текущий вихрь окончательно для этого шага. После этого цикл переходит к следующему вихрю системы.

Моделирование позволит выявить наиболее оптимальные пути формирования вихревых структур различных геометрических форм. Полученные результаты могут быть полезны для разработки запоминающих устройств и метода удержания Бозе-эйнштейновского конденсата в сверхпроводниках [5].

1. W.V. Pogosov, V.R. Misko, H.J. Zhao, and F.M. Peeters, Phys. Rev. B 79, 014504 (2009).
2. E. Brezin, D.R. Nelson, and A. Thiavill, Phys. Rev. B31, 7124 (1985).
3. M.P.A. Fisher, Phys. Rev. Lett. 62, 1415 (1989).
4. D.S. Fisher, M.P.A. Fisher, and D.A. Huse, Phys.Rev. B43, 130 (1991).
5. Fujio Shimizu, Christoph Hufnagel, Tetsuya Mukai, Phys. Rev. Lett. 103, 253002 (2009).

Диэлектрический отклик керамики $\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3$ в термочастотном диапазоне (120÷420) К и (10^{-1} ÷ 10^6) Гц.

А.В. Павленко, А.А. Павелко, Л.А.Резниченко.

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета.

Ферровольфрамат свинца, $\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3$ (PFW), сочетая в себе сегнетоэлектрические (СЭ) (температура Кюри, T_C , ~ (160-200)К) и антиферромагнитные (температура Нееля, T_N , ~ (350-380)К) свойства, принадлежит к классу мультиферроидных материалов [1, 2]. Целью настоящей работы стало установление закономерностей формирования диэлектрических свойств керамики PWF в температурном диапазоне (120÷420) К, охватывающем T_C и T_N , и частотном интервале (10^{-1} ÷ 10^6) Гц.

Синтез образцов PWF осуществляли по твердофазной методике, спекание - по обычной керамической технологии; в качестве исходных оксидов использовались PbO , WO_3 , Fe_2O_3 высокой степени чистоты. Измерения комплексной диэлектрической проницаемости ($\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$, где ϵ' и ϵ'' – действительная и мнимая части, соответственно) в указанных диапазонах внешних воздействий проводили с помощью универсального измерительного моста Novocontrol ALPHA High-Resolution Dielectric Analyzer.

На рисунке представлены зависимости ϵ' и ϵ'' PFW от температуры на частотах (f) (0.1, 1, 10, 60, 130, $1.1 \cdot 10^3$, 10^4 , $5.6 \cdot 10^4$, $1.3 \cdot 10^5$, $5 \cdot 10^5$, 10^6) Гц.

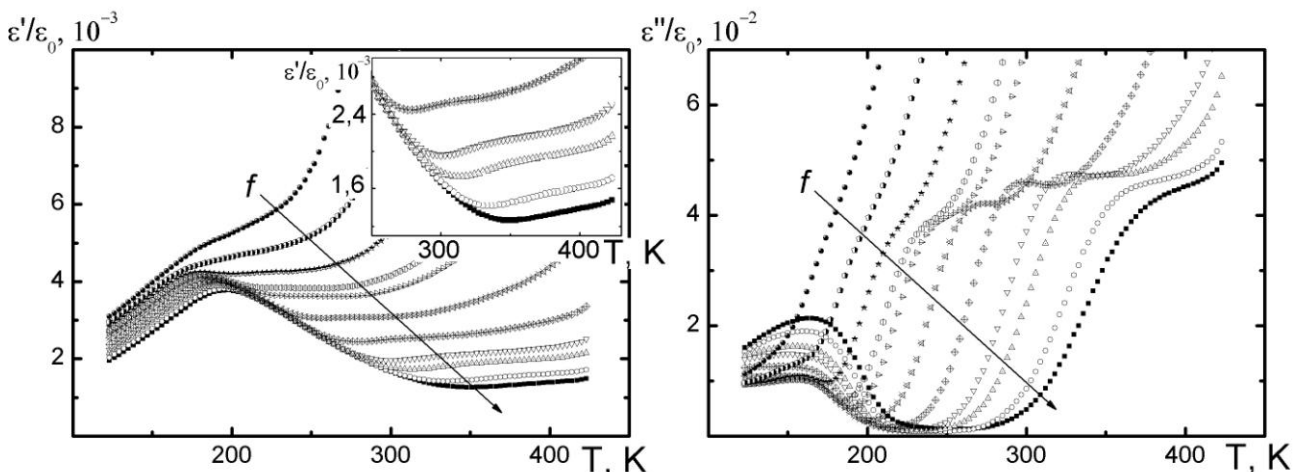


Рис. 1. Зависимости $\epsilon'(T)$ и $\epsilon''(T)$ керамики PWF от температуры на частотах (0.1, 1, 10, 60, 130, $1.1 \cdot 10^3$, 10^4 , $5.6 \cdot 10^4$, $1.3 \cdot 10^5$, $5 \cdot 10^5$, 10^6) Гц. Стрелкой показано направление роста f .

Видно, что при $T = (160 \div 210)$ К на зависимостях $\epsilon'(T)$ и $\epsilon''(T)$ формируются ярко выраженные релаксирующие максимумы (при $f < 10$ Гц – наблюдаются только точки перегиба), связанные, по-видимому, с переходом PWF в СЭ состояние [1, 2]. При $T > 210$ К на обеих зависимостях появляются дополнительные (слабо заметные на $\epsilon'(T)$ (вставка на рисунке)), сильно размытые и практически исчезающие при $f < 10$ Гц и $f > 10^6$ Гц максимумы (что хорошо видно на графиках $\epsilon''(T)$). Природа второй аномалии в температурном поведении ϵ' и ϵ'' нам пока не ясна. Скорее всего, она является откликом изменения реальной (дефектной) структуры керамики PWF (связанной с переменной валентностью Fe), а не следствием магнитного фазового перехода.

1. Ю.Н. Веневцев, В.В. Гагулин, В.Н. Любимов, Сегнетомагнетики, Наука, Москва (1982).
2. S.A. Ivanov, S.-G. Eriksson et al, Materials Research Bulletin 39, 2317 (2004)

Магнитные свойства микропровода из сплава Гейслера Ni-Mn-Ga в стеклянной оболочке

В. Родионова^{1,2}, Л. Фетисов¹, С. Грановский¹, А. Гойхман², Н. Шушарина², М. Ильин³,
А. Жуков³, Н. Перов¹, А. Грановский¹

¹ Кафедра магнетизма физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва;

² Лаборатория ионно-плазменных технологий инновационного парка институт Российский
Государственный Университет имени Иммануила Канта, Калининград;

³ Department of Materials Physics, Chemistry Faculty, University of Pais Vasco UPV/EHU, 20018 Plaseo Manuel de Lardizabal, San Sebastián, Spain.

Традиционно методом Улитовского-Тейлора получают аморфные ферромагнитные микропровода в стеклянной оболочке, которые используются при разработке элементов микроэлектроники, магнитных датчиков, систем кодирования, и в других областях [1,2]. Однако, недавно было показано, что, используя в качестве металлического сплава, который помещается в стеклянную колбу для вытягивания микропровода, сплав Гейслера, можно получить материал с магнитокалорическим эффектом [3]. При этом свойства полученного материала будут отличаться от свойств массивного образца и напряжения, которые возникают при закалке микропровода при его изготовлении из-за разницы коэффициентов температурного расширения стекла и металла, могут приводить к смещению температуры аустенит-мартенситного перехода.

В данной работе были исследованы магнитные свойства микропроводов, изготовленных из нестехиометрического сплава $\text{Ni}_{49.5}\text{Mn}_{25.4}\text{Ga}_{25.1}$, с диаметром металлической жилы 13 мкм и полным диаметром 32 мкм. Используя металлы нестехиометрического состава и варьируя степень нестехиометричности, можно сблизить температуры Кюри и фазового перехода.

Магнитные свойства микропроводов были исследованы в температурном диапазоне 80-350 К в полях до 16 кЭ с помощью вибрационного магнитометра. Для контроля состава металлической жилы по толщине, диаметров металлической жилы и полного диаметра использовались методы Оже-спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии, соответственно. После отжига образцов при температуре 770 К в течении 30 минут, данные рентгеноструктурного анализа при комнатной температуре подтверждают наличие низкотемпературной мартенситной фазы. По данным магнитных измерений температура фазового перехода мартенсит-аустенит составила 300°К, а температура Кюри – 320°К.

1. V. Larin, A. Torcunov, A. Zhukov, J. Gonzalez, M. Vazquez, L. Panina, J. Magn. Magn. Mater, 249 (2002), 39.
2. V. Rodionova, M. Ilyn, M. Ipatov, V. Zhukova, N. Perov, J. Gonzalez, A. Zhukov, J. Appl. Phys. 108 (1) (2010) 016103.
3. M. Ilyn, V. Zhukova, J. D. Santos, M. L. Sánchez, V. M. Prida, B. Hernando, V. Larin, J. González, A. M. Tishin, A. Zhukov, Phys. Stat. Solidi A 205 (2008), 1378.

Результаты экспериментов по изучению влияния охлаждения (до -196°C) на фазово-структурное состояние образцов стали 12X18H10T, облученных ионами криптона ($4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$)

А. В. Русакова¹, О. П. Максимкин², М.Н. Гусев²

¹ Астанинский филиал Института Ядерной физики НЯЦ РК, Астана, Казахстан

² Институт Ядерной физики НЯЦ РК, Алматы, Казахстан

Изучение $\gamma \rightarrow \alpha$ перехода в облученных метастабильных сталях, используемых при строительстве атомных реакторов является актуальной задачей радиационного материаловедения.

Облучение высокоэнергетическими ионами приводит формированию тонкого приповерхностного слоя, содержащего радиационные дефекты. Обычно глубина проникновения ионов составляет несколько сотен нанометров, что недостаточно для использования рентгеноструктурного анализа либо ПЭМ. В то же время эффективным может быть метод «дифракционного анализа отраженных электронов» (EBSD), сочетающий в себе достоинства микроскопии и структурного анализа, который был развит в 90-е годы 20-го века.

Исследовали образцы аустенитной нержавеющей стали 12X18H10T (отжиг 1050°C , 30 минут), облученные высокоэнергетическими ионами ^{84}Kr на ускорителе ДЦ-60 ($E=1.56 \text{ МэВ/нуклон}$, $\Phi=4 \cdot 10^{15} \text{ ион/см}^2$). Часть образцов были подвергнуты дополнительной обработке, выдержке при температуре жидкого азота (-196°C) в течении часа.

Применение метода EBSD позволило выявить различие в необлученных и облученных образцах стали 12X18H10T, заключающееся в том, что в приповерхностном слое облученного образца формируются α - , и ϵ - фазы. Их особенностью является чрезвычайная мелкодисперсность (менее 0,1 микрона). Отличительной особенностью является то, что α -мартенсит появляется в отдельных зернах и тяготеет к границам зерен. Можно полагать, что ориентация зерна является фактором, определяющим вид дефектной структуры. Количество мартенсита, в образце стали, облученной флюенсом $4 \cdot 10^{15} \text{ ион/см}^2$, около 9% (ϵ -мартенсита – 2%).

Измерения намагниченности образца с помощью прибора FERITOSCOPE показали наличие ферромагнитной фазы в количестве 0,1% (ферритное число). В то же время, исследования на дифрактометре BRUKER не обнаружили магнитной фазы в образце. Учитывая тот факт, что чувствительность дифрактометра не позволяет выявить столь малое количество феррофазы, можно предположить, что в результате охлаждения облученного образца до -196°C , 1 час, количество образовавшейся α -фазы меньше, чем 1-1,5%.

Следует отметить тот факт, что с помощью феррозонда не обнаружено наличие ферромагнитной фазы в облученных, но не охлажденных образцах, а также в необлученных стальных образцах.

EBSA анализ облученных и охлажденных образцов показал увеличение количества как α - так и ϵ - мартенсита (более 10% и 3% соответственно). При этом значительно уменьшилось количество мелкодисперсного мартенсита, и появились отдельные достаточно крупные кристаллы. Также можно отметить появление относительно крупных кристаллов ϵ -фазы, часто вблизи пластин α -мартенсита.

Таким образом, ионное облучение ведет к формированию α - и ϵ - фаз в приповерхностном облученном слое образцов метастабильной стали 12X18H10T. Дополнительное охлаждение облученного материала, в отличие от необлученного, приводит к дополнительному изменению структуры.

Исследование магнитных и магнитооптических свойств ферромагнитного полупроводника GaN:Cr

*А.С. Семисалова¹, Н.С. Перов¹, Е.А. Ганьшина¹, А.Д. Рубачева¹, А.Ф. Орлов², А.В. Марков²,
И.В. Кулеманов³, Ю.А. Агафонов⁴, В.И. Зиненко⁴, В.В. Сарайкин⁵*

¹ *Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова (МГУ), Москва*

² *Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности (ГИРЕДМЕТ), Москва*

³ *Московский институт стали и сплавов (МИСИС), Москва*

⁴ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов (ИПТМ РАН), Черноголовка*

⁵ *Государственный научно-исследовательский институт физических проблем им. Ф.В. Лукина (НИИФП), Зеленоград, Москва*

Работа посвящена исследованиям ферромагнитного полупроводника на основе нитрида галлия, имплантированного хромом, - кандидата в материалы для реализации функциональных устройств спинтроники.

Проведенные исследования показали, что полученный материал обладает ферромагнитным упорядочением с температурой Кюри выше 400 К, намагниченность насыщения при комнатной температуре достигает величины 40 Гс, что превышает большинство из полученных на данный момент значений для нитрида галлия, допированного различными металлами. Магнитооптические исследования выявляют изменение электронной структуры GaN и позволяют делать вывод о возникновении новых спин-поляризованных состояний в запрещенной зоне нитрида галлия при допировании хромом.

В работе обсуждаются результаты температурных исследований магнитных и магнитооптических свойств GaN:Cr, а также исследуется влияние отжига на свойства.

Полученные результаты позволяют рассматривать исследованный материал GaN:Cr в качестве потенциального кандидата для создания полупроводниковых ферромагнитных гетероструктур с высокой степенью поляризации носителей зарядов [1].

1. J.E. Medvedeva, A.J. Freeman, X.Y. Cui, C. Stampfl and N. Newman, Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 146602.

Структурные и оптические свойства эпитаксиальных гетероструктур с наноразмерными неоднородностями на основе полупроводников A_3B_5

*П. В. Середин¹, А. В. Глотов¹, В.Е. Терновая¹, Э.П. Домашевская¹, И.Н. Арсентьев²,
Д.А. Винокуров², И.С. Тарасов²*

¹ Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, Воронеж, Россия, 394006

² ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Политехническая 26, Санкт - Петербург, Россия

Спонтанное возникновение периодически упорядоченных структур на поверхности и в эпитаксиальных пленках полупроводников охватывает широкий круг явлений в физике твердого тела и в полупроводниковой технологии, поскольку принадлежит к более широкому классу фундаментальных явлений самоорганизации в конденсированных средах. Взрыв интереса к данной области связан с необходимостью получения полупроводниковых наноструктур с характерными размерами 1-100 нм, а спонтанное упорядочение наноструктур позволяет получать включения узкозонных полупроводников в широкозонной матрице и тем самым создавать локализирующий потенциал для носителей тока. Периодические структуры таких включений могут образовывать сверхрешетки, состоящие из квантовых ям, проволок, или точек. Явления спонтанного возникновения наноструктур создают основу для новой технологии получения упорядоченных массивов квантовых проволок и квантовых точек — базу для опто- и микроэлектроники нового поколения [1-2].

Обзор современной литературы дает большое количество разрозненных сообщений о наблюдении спонтанного упорядочения и образования наноразмерных неоднородностей в твердых растворах на основе III-V. Однако, хорошо развитые теоретические представления в этих работах зачастую не подкреплены экспериментально и потому явление возникновения наноструктур и упорядочение в системах твердых растворов для достаточно хорошо согласованных по параметрам решетки твердых растворов таких как $Al_xGa_{1-x}As$, $Ga_xIn_{1-x}P$, $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$, а также возможный ряд явлений в метаморфных материалах $In_xGa_{1-x}As$ и многослойных структурах до сих пор остается открытым вопросом

Поэтому, целью нашей работы было установление основных закономерностей образования микро – и нано неоднородностей, возникающих в низкоразмерных полупроводниковых системах: однослойных и многослойных гетероструктурах на основе тройных и четверных твердых растворов полупроводников A_3B_5 структурными и спектроскопическими методами

Результаты экспериментальных исследований явления упорядочения и распада в твердых растворах на основе A_3B_5 с возникновением неоднородностей, в том числе наноразмерных, подтверждают теоретические данные других авторов, исследовавших аналогичные проблемы.

Данные о структурных свойствах, полученные методами рентгеновской дифракции, спектроскопии колебательных состояний подтверждаются прямыми экспериментами (включая результаты электронной микроскопии, полученные как в рамках диссертационного исследования, так и другими авторами) и согласуются с существующими теоретическими представлениями.

1. Alex Zunger. Spontaneous Atomic Ordering in Semiconductor Alloys: Causes, Carriers, and Consequences / Alex Zunger // MRS-IRS bulletin. July 1997.

2. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур / Ж.И. Алферов // Физика и техника полупроводников. - 1998. - Т.32. - №1. - С.3-18.

Магнетизм как главная причина возникновения ближнего порядка в ОЦК-сплавах системы Fe-Cr

А.Л. Удовский, Е.В. Соколова

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

Сплавы системы Fe-Cr являются базовыми для разработки ферритных сталей перспективных для применения в качестве оболочек ТВЭЛов для реакторов на быстрых нейтронах.

Ряд экспериментальных фактов, в частности, наличие ближнего порядка (БП) находятся в противоречии с термодинамическими свойствами и фазовыми равновесиями, что требует проведения теоретических исследований для глубокого осмысления. Для решения этой проблемы мы представляем трехподрешеточную модель (ЗПМ) для твердого раствора сплавов на основе ОЦК - Fe (сплавы Fe-Cr). В ЗПМ учитывается магнетизм в виде наличия различных значений локальных магнитных моментов (ММ) атомов Fe на разных координационных сферах, а также его влияние на разные конфигурационные степени свободы (с учетом статических смещений) атомов различного сорта. Это позволяет понять физическую причину возникновения БП.

Основные положения модели:

1. Ввиду значительной сложности поставленной проблемы на первом этапе мы ограничимся рассмотрением атомов обоих компонентов в закрытой системе, предполагая, что первый компонент (Fe) ферромагнитный (ФМ), а второй компонент (Cr) парамагнитный (ПМ) (хотя в действительности Cr находится в антиферромагнитном состоянии).

2. Поскольку величина ММ является функцией межатомного расстояния, то парциальные ММ атомов Fe должны иметь различные значения в зависимости от того, на какой координационной сфере (КС) они находятся относительно рассматриваемого центра. Это позволяет нам рассматривать три сорта атомов Fe $\Phi : (Fe1, Fe2, Fe3)$ в расширенной решетке, изоморфной структуре DO_3 имеющей три подрешетки $\Pi : (\alpha, \beta, \gamma)$, которая построена из 8 ОЦК-ячеек. Описываем взаимодействие атомов в расширенной решетке в приближении трех КС.

3. При образовании раствора в системе А-В, замещение атома компонента А, расположенного в подрешетке β относительно атома А, расположенного в α - подрешетке, атомом компонента В, который имеет значение параметра кристаллической решетки отличного от решетки компонента А. Вследствие чего происходит смещение атомов компонента В относительно узлов кристаллической решетки на малую (относительно параметра решетки) величину $\delta \bar{\rho}_{AB}^{\alpha\beta} = \bar{\rho}_{AB}^{\alpha\beta} - \bar{\rho}_{AB,0}^{\alpha\beta}$, где $\bar{\rho}_{AB,0}^{\alpha\beta}$ - соответствует векторам, проходящим через узлы идеальной (средней) кристаллической решетки, обладающей фиксированной системой координат.

4. Для упрощения задачи не будем учитывать нулевые колебания атомов при описании основного состояния (Т=0К).

Внутренняя энергия закрытой ФМ бинарной системы примет вид

$$E = \sum_{k \in \Phi} \sum_{J \in \Pi} n_k^J E_k^J(\rho), \quad E_k^J(\rho) = E_k^J(0) + \sum_{\substack{l \in \Phi \\ l \neq k}} \sum_{I \in \Pi} N_l^{JI} \delta E_{kl}^{JI}(\rho_{kl}^{JI})$$

Разложение энергий взаимодействия $\delta E_{kl}^{JI}(\rho_{kl}^{JI})$ в ряды Тейлора по степеням смещений позволяет согласованно описать конфигурационную для "средней" решетки и упругую составляющие внутренней энергии смещения. Полагаем, что модель позволит описать БП и термодинамику ОЦК-сплавов, как для ФМ, так и для ПМ состояний.

Работа поддержана грантами РФФИ 09-03-00983-а, НШ-7075.2010.3.

Структурные перестройки и эффект Драугарда – Янга в сегнетоэлектриках – релаксорах в сильных полях

М. В. Таланов

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону

В классических сегнетоэлектриках (КС) типа BaTiO_3 наблюдается эффект Драугарда-Янга [1], заключающийся в образовании локальных минимумов (рисунок а) на зависимостях диэлектрической проницаемости (ϵ/ϵ_0) от напряжённости (E) постоянного электрического поля, обусловленный механическим зажатием 180° -ных доменов. В последнее время повысился интерес к релаксорным материалам, определяемый их научной и практической значимостью. Ввиду отсутствия в таких объектах доменной структуры можно было предположить, что данное явление в них не реализуется. Однако, нами в [2] сообщено о существовании платообразных участков на кривых $\epsilon/\epsilon_0(E)$ сегнетоэлектриков-релаксоров (СЭР). Более детальное исследование этого вопроса предпринято в настоящей работе.

Объектами исследования явились керамики многокомпонентной системы на основе общеизвестных СЭР: магно-, никель- и цинкониобатов свинца.

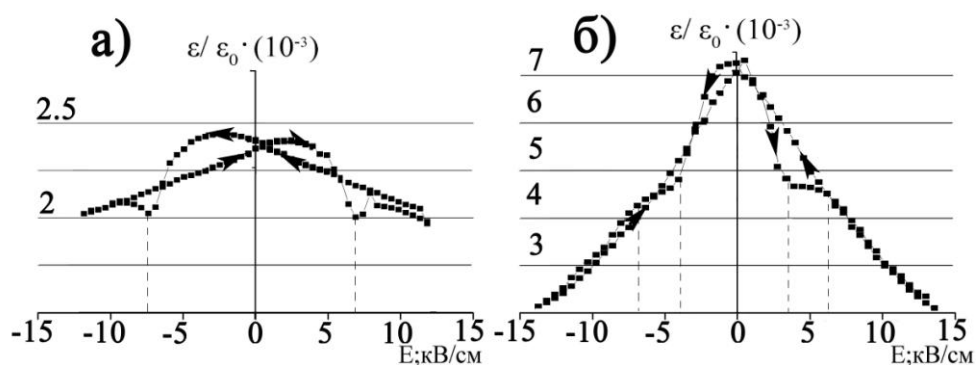


Рисунок. Зависимости $\epsilon/\epsilon_0(E)$ КС (а) и исследуемого СЭР (б). Штриховыми линиями обозначены значения E , соответствующие локальным минимумам (а) и платообразным участкам (б) зависимостей $\epsilon/\epsilon_0(E)$.

На рисунке б) представлена зависимость $\epsilon/\epsilon_0(E)$ исследуемого СЭР. Видно, что при подаче E (как положительного, так и отрицательного знака) образуется платообразный участок $\epsilon/\epsilon_0(E)$, который не формируется при понижении E . Описанная аномалия сохраняется при длительном реверсировании, что делает невозможным связать её проявление с эффектами усталости керамик.

На наш взгляд, причиной образования описанного платообразного участка является возрастание количества и размеров полярных кластеров, обладающих тетрагональной (Т) симметрией, внутри слабополярной матрицы псевдокубической (Пск) фазы (фазы, симметрию которой в силу слабости и размытия рентгенографических максимумов не представляется возможным идентифицировать), а также их упорядочения, приводящего к постепенному формированию доменной структуры. Результатом последнего и, как следствие, эффектов зажатия доменов является тот вид кривой $\epsilon/\epsilon_0(E)$, который мы и наблюдаем в эксперименте. Таким образом, мы считаем, что в СЭР при определённых E могут протекать одновременно три основных процесса: 1) структурные перестройки, связанные с расширением области устойчивости Т-фазы; 2) формирование доменной структуры; 3) механическое зажатие образовавшихся доменов.

1. M.E. Drougard, D.R. Young, Phys. Rev. **94**, (1954).

2. М.В. Таланов, И.А.Вербенко и др. Электронный журнал "Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы". 11, (2011).

http://www.ptosnm.ru/_files/Moduls/catalog/items/T_catalog?items_F_download_I_487_v1.pdf

Кинетика изменения кристаллической структуры титана и палладия при гидратации и дегидратации

Н.А.Тимченко¹⁾, Т. Баумбах, С. Дойль, Т. Слободский, О.В. Крысина²⁾, Р.М.Галимов¹⁾, А.М. Лидер¹⁾, И.П. Чернов¹⁾, А.Н.Шмаков³⁾

Institut für Synchrotron Strahlung (ISS), Karlsruhe Institute of Technology, Germany

¹⁾ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет (НИ ТПУ), Томск,*

²⁾ *Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск,*

³⁾ *Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения, Новосибирск,*

В предлагаемой работе приводятся результаты исследования кинетики изменения кристаллической структуры палладия и титана при электролитическом насыщении водородом, а также в процессах его радиационно- и термостимулированного выхода, выполненные на станциях порошковой дифрактометрии накопителя ВЭПП-3 Института ядерной физики СО РАН и PDIFF Beamline специализированного источника синхротронного излучения ANKA ISS Karlsruhe Institute of Technology [1]. Сведения о параметрах используемого оборудования доступны в Internet [2,3]. Образцы для исследований представляли собой полоски 10x25 мм стандартного прокатанного листа титана толщиной 0,8мм. Палладий был представлен в виде фольги толщиной 300мкм.

Насыщение образцов водородом проводилось в специальной электролитической ячейке. Катодом служил исследуемый образец, анодом спираль из платиновой проволоки диаметром 0,4 мм. Катод и анод фиксировались в фторопластовом держателе, который помещался в стеклянный стакан с 1-молярным раствором H₂SO₄. Процесс электролиза раствора проводили при плотности тока 0,01 А/м² непосредственно перед измерениями. Из полученных данных следует:

Насыщение водородом образцов титана в 1 молярном растворе H₂SO₄ при плотности тока 0,01 А/м² в течении четырех часов приводит к проявлению на дифрактограммах рефлексов свидетельствующих об образовании в титане водородной подрешетки и возникновении гидридных фаз.

Гидридная фаза в палладии начинает образовываться одновременно с началом процесса электролитического насыщения. В процессе насыщения в образце существуют две фазы, причем количество металлической фазы начинает уменьшаться и через 1,5 часа после начала процесса насыщения металлическая фаза в исследуемом образце перестает идентифицироваться. При дальнейшем увеличении количества водорода, в объеме образца начинается наблюдаться трансформация формы дифракционных пиков, которую можно связать с возрастающими значениями внутренних напряжений, наличие которых проявляется визуально на поверхности образца в виде бородавчатой структуры. Наблюдаемые изменения не стабильны.

Исследования динамики выхода водорода из палладия показали его экспоненциальный характер в зависимости от времени при малых дозах радиационного воздействия рентгеновского излучения с энергией 10,5 кэВ. При удалении водорода из образцов путем отжига дифракционные рефлекссы возвращаются в положения, занимаемые до насыщения скачком. При неравновесном, радиационностимулированном, выходе водорода из палладиевых образцов при экспозиционных дозах рентгеновского излучения в несколько сотен Дж/см² также наблюдается возвращение дифракционных рефлекссов в положения, занимаемые до насыщения.

1. ANKA - Instrumentation Book, ISS Institute for Synchrotron Radiation, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, member of the Helmholtz Association, 2008. - P.52-54.

2. Сибирский Центр Синхротронного Излучения [Электронный ресурс] / Институт Ядерной Физики им. Будкера, СО РАН. – Режим доступа: <http://ssrc.inp.nsk.su>, свободный. – Загл. с экрана.

3. ANKA [Электронный ресурс] / Karlsruhe Institute of Technology. – Режим доступа: <http://ankaweb.fzk.de>, свободный. – Загл. с экрана.

Кристаллическая структура и магнитные свойства анион-стехиометрического манганита $\text{Pr}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$ при высоких давлениях

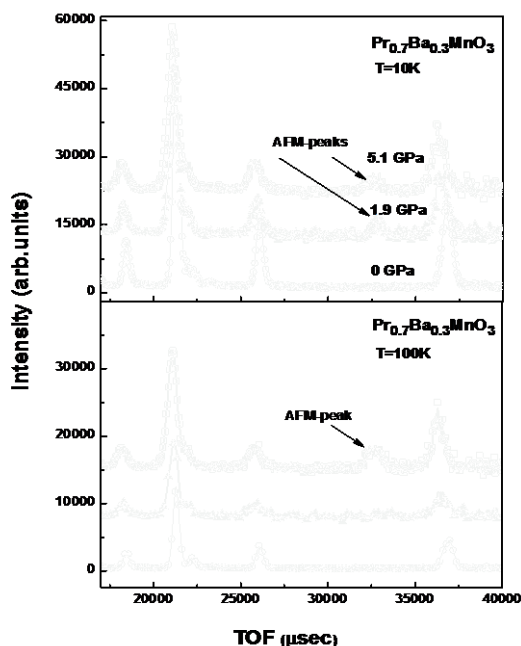
Труханов А.В.¹, Труханов С.В.¹, Д.П. Козленко², С.Е. Кичанов²

¹ ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению» (Минск, Белоруссия)

² Объединенный институт ядерных исследований (Дубна, Россия)

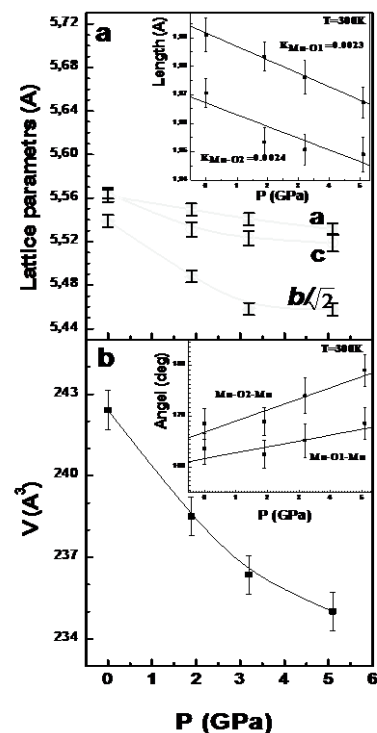
Физические свойства манганитов совокупностью факторов: стехиометрия (как катионная, так и анионная) и кристаллоструктурные параметры (средние значения длины связи {Mn-O} и значения углов {Mn-O-Mn}, которые определяют степень перекрытия электронных оболочек и как следствие величину обменного взаимодействия)

В результате анализа спектров нейтронной дифракции установлено, что синтезированные образцы $\text{Pr}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$ является однофазным составом. Образцы можно охарактеризовать типом пространственной группы - *Imma*. Нейтронографические дифракционные спектры анион-стехиометрического образца $\text{Pr}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{MnO}_3$, полученные при различных давлениях и температурах, представлены на рис.1. Расчеты данных нейтронографии свидетельствуют об относительном изменении параметров элементарной ячейки (рис.2). Параметры элементарной ячейки монотонно уменьшаются с ростом гидростатического давления (рис.2а). При



300К в интервале давлений 0-5 ГПа - *a* уменьшается от 5,56А до 5,53А; *c* уменьшается от 5,56 А до 5,51А; параметр $b/\sqrt{2}$ (параметр *b* для удобства расчета и соотношения на графиках выражен как $b/\sqrt{2}$) уменьшается от 5,54А до 5,47А (наиболее интенсивно уменьшается параметр *b*). Таким образом, можно сделать вывод, что имеет место анизотропное сжатие элементарной ячейки преимущественно вдоль оси *b* кристаллической структуры. Объем элементарной ячейки уменьшается с 242,8 А³ до 235,7 А³ (рис.2б). Было зафиксировано монотонное уменьшение длин связей (при T=300К) от 1,9911А и 1,9706А до 1,9673 и 1,949 для Mn-O₁ и Mn-O₂ соответственно (рис.2а – на вставке). Зафиксировано anomalous поведение среднего магнитного момента марганца. С увеличением давления (уменьшением длин связей Mn-O₁ и Mn-O₂ и стремлении углов Mn-O₁-Mn Mn-O₂-Mn) значение среднего магнитного момента на ион марганца при 10 К снижается с 3,35 до 3,03_{МВ} в интервале давлений до 5ГПа.

Вероятнее всего это связано с изменением конфигурации электронных оболочек ионов, участвующих в процессе косвенного обмена. Динамика изменения среднего значения магнитного момента марганца при изменении температуры увеличении температуры



подтверждает ранее известные факты о влиянии температуры в разупорядочение обменных взаимодействий. Так в интервале от 10 до 170 К зафиксировано уменьшение среднего магнитного момента ионов марганца от 3,35 до 2,61 μ_B (без давления), от 3,12 до 1,97 μ_B (при $P=2$ ГПа), от 2,98 до 1,45 μ_B (при 5ГПа).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (программа «мобильность молодых ученых»)

Магнитная восприимчивость самария и соединения SmAl_2 в широком интервале температур

Н. С. Упорова, С. А. Упоров, В.Е. Сидоров

Уральский государственный педагогический университет, г. Екатеринбург

Системы, содержащие редкоземельные металлы (РЗМ), давно привлекают внимание исследователей, благодаря их уникальным физическим свойствам. При низких температурах эти объекты демонстрируют различные виды магнитного упорядочения, эффект Кондо, промежуточную валентность, спин-флоп переход, а также являются модельными объектами для изучения свойств тяжелых фермионов. Из всего ряда 4f-элементов самарий, его сплавы и соединения представляют особый интерес, поскольку демонстрируют зависимости свойств, нетипичные для лантаноидов. Электрические и магнитные свойства чистого самария (электросопротивление, магнитная восприимчивость, намагниченность, термоЭДС, ЭПР, ЯМР) достаточно хорошо исследованы в широком интервале температур. Однако имеются некоторые трудности в теоретической интерпретации температурных зависимостей вышеуказанных свойств, например магнитной восприимчивости.

В настоящей работе экспериментально исследована магнитная восприимчивость (методом Фарадея) интерметаллического соединения SmAl_2 и чистого самария в интервалах температур ($T = 290 - 1600$ К для SmAl_2 , $T = 290 - 1300$ К для Sm) и магнитных полей ($B = 0.3 - 1.3$ Тл). Все опыты проводились в тиглях из оксида бериллия в инертной атмосфере высокочистого гелия марки А (99,995 об.%) при давлении $1.1 \cdot 10^5$ Па. Соединение для исследований было получено из высокочистого алюминия (99,999 %) и самария чистотой не хуже 99,85 вес. %, путем тройного электродугового переплава в атмосфере аргона. Согласно проведенным фазовому и химическому анализам интерметаллид был однофазным и имел стехиометрический состав RZMAl_2 .

Температурные зависимости магнитной восприимчивости самария и интерметаллида SmAl_2 имеют растущую зависимость во всём температурном интервале. При плавлении интерметаллического соединения наблюдается аномальное поведение магнитной восприимчивости, заключающееся в резком росте $\chi(T)$. Известно, что самарий и его соединения обладают промежуточной валентностью при нормальных условиях, т.е. имеется статистическая смесь трехвалентных и двухвалентных ионов Sm^{3+} и Sm^{2+} . Для Sm и SmAl_2 простая теория Ван Флека не позволяет удовлетворительно описать экспериментальные зависимости $\chi(T)$. В данной работе, политермы магнитной восприимчивости самария и соединения SmAl_2 обработаны с помощью парамагнетизма Ван Флека (случай средних мультиплетов, когда $\Delta E_j \approx k_B T$) с учётом изменения валентности с температурой и учета вклада паулиевской восприимчивости электронов проводимости.

Из полученных теоретических зависимостей $\chi(T)$ для чистого самария и соединения SmAl_2 следует, что концентрации двухвалентных ионов при различных температурах в них

примерно близки. Используя полученные в работе результаты, получается изменение эффективной валентности 2,9-2,8 в кристаллическом состоянии Sm и SmAl₂. Схожий характер наблюдается и для плотности состояний на уровне ферми N(E_F) для обоих изученных объектов.

Работа поддержана Федеральной целевой программой НК16П/1

Уравнение гетерогенных состояний многокомпонентных растворов в квазирешеточной модели

А. Ю. Захаров¹, А. А. Шнайдер¹

¹ *Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия*

Представлены результаты разработки квазирешеточной модели многокомпонентных систем (КРМ), основанной на предложенной и разработанной в [1,2] обобщенной решеточной модели. В КРМ учитываются вакансии, различия в атомных размерах компонентов, а также зависимость размеров компонентов от окружения.

Представленные ранее в [3] результаты были модернизированы. Уточнен формализм введения взаимного влияния компонентов. Во-первых, зависимость влияния окружения на собственные объемы компонентов выбирается таким образом, чтобы отсутствовало влияние на объем атома соседство с атомами этого же компонента. Во-вторых, рассмотрение полученного в [3] уравнения состояния для инертных газов (Ar, Kr, Ne, Xe) с целью прямого определения параметров модели из эксперимента выявило необходимость учета тройных взаимодействий, особенно важных в рассмотрении конденсированной фазы. Фитирование обновленной с учетом тройных взаимодействий изотермической зависимости давления от объема к экспериментальным данным позволило получить оценки для величины собственного атомного объема аргона и других параметров модели.

1. А.Ю. Захаров, С.В. Терехов. Обобщенная решеточная модель фазовых равновесий в многокомпонентных системах.// Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск: Наука, 1985.
2. А.Ю. Захаров, А.Л. Удовский. Обобщенная решеточная модель и ее применение к прогнозированию термодинамических свойств многокомпонентных растворов.// Физика и химия обработки материалов. 2005. № 1. С. 5-17.
3. A.Yu. Zakharov, A.A. Schneider, A.L. Udovsky. Variable-lattice model of multi-component systems. 1. General consideration.// E-Print Arxiv: cond-mat.stat-mech/1003.2731, 2010. 10 pp.

Влияние внешнего магнитного поля на электрическую поляризацию мультиферроиков LiVCuO_4 и LiCu_2O_2 в рамках примесной модели магнитоэлектрических эффектов

Ю.Д. Панов¹, Н.С. Федорова¹

¹ Уральский государственный университет им. А.М. Горького, Екатеринбург

Квазиодномерные купраты LiVCuO_4 и LiCu_2O_2 представляют собой особый класс мультиферроиков, в которых сегнетоэлектрическое упорядочение появляется как результат Cu-Li нестехиометрии на фоне основного спин-спирального упорядочения [1,2].

В кристаллах LiVCuO_4 и LiCu_2O_2 ионы Cu^{2+} , обладающие магнитным моментом ($S=1/2$), формируют одномерные цепочки CuO_2 , которые отделены друг от друга немагнитными ионами Li^+ и Cu^+ , соответственно. В обоих соединениях ниже температуры Нееля наблюдается несоизмеримый спиральный магнитный порядок с магнитными моментами, лежащими в плоскости ab . В силу близости ионных радиусов Li^+ и Cu^{2+} в этих материалах наблюдается значительная Cu-Li нестехиометрия.

В данной работе исследовалось влияние внешнего магнитного поля на электрическую поляризацию в рамках примесной модели [1,2], предполагающей, что эта поляризация возникает в результате обменного взаимодействия на Cu^{2+} центрах, замещающих ионы Li^+ в LiVCuO_4 или ионы Cu^{1+} в LiCu_2O_2 . Изначально предполагалось, что внешнее магнитное поле не изменяет структуру спиновой спирали, а лишь поляризует спин Cu^{2+} -заместителей [1,2].

На основе этой модели была создана программа, с помощью которой были получены зависимости средней поляризации, возникающей в кристаллах LiVCuO_4 и LiCu_2O_2 , от внешнего магнитного поля, приложенного вдоль различных кристаллографических осей. Для этого были взяты 1000 Cu^{2+} -заместителей и распределены случайным образом вдоль цепочек CuO_2 , на каждом заместителе была рассчитана локальная поляризация и проведено усреднение по всем заместителям.

Для более точного описания поведения электрической поляризации в кристалле LiVCuO_4 , в примесную модель были включены поправки, учитывающие изменение структуры спиновой спирали во внешнем магнитном поле. При включении внешнего магнитного поля магнитные моменты спирали начинают разворачиваться в направлении поля, причем угол поворота для разных спинов Cu^{2+} будет разным. Расчеты средней поляризации проводились по описанному выше алгоритму с учетом введенных поправок.

Полученные результаты сравнивались с экспериментальными данными [3,4] и предсказаниями других модельных подходов [5,6].

1. Moskvin A.S., Drechsler S.-L., Europhys. Lett., **81**, 57004 (2008).
2. Moskvin A.S., Panov Yu.D., Drechsler S.-L., Phys. Rev. B **79**, 104112 (2009).
3. S. Park, Y.J. Choi, C.L. Zhang, and S.-W. Cheong, Phys. Rev. Lett. **98**, 057601 (2007).
4. Schrettle F., Krohns S. et al. Phys. Rev. B **77**, 144101 (2008)
5. Katsura H., Nagaosa N., Balatsky A.V., Phys. Rev. Lett., PRL **95**, 057205 (2005).
6. Mostovoy M., Phys. Rev. Lett., PRL **96**, 067601 (2006).

Список участников школы

Gukasov Arsen	LLB	arsen.goukassob@cea.fr
Matiks Yulia	Max-Planck Institute for Solid State Research	Y.Matiks@fkf.mpg.de
Petrinin Anatoly Alekseevich	PNPI	petrunin@pnpi.spb.ru
Petukhov Andrei	Utrecht University	A.V.Petukhov@uu.nl
Popov Alexander Nikolaevich	ESRF	apopov@esrf.fr
Rogalev Andrei	ESRF	rogalev@esrf.fr
Smekhova Alevtina	Moscow State University	smeal@physics.msu.ru
Zhernenkov Kirill	Ruhr University Bochum	zmnzkn@mail.ru
Абасзаде Рашад Габил	НАНА	Abaszade@rambler.ru
Авакян Леон Александрович	Южный федеральный университет	lavakyan@rambler.ru
Аксенов Сергей Николаевич	Институт Ядерных Исследований РАН	serg.asd@rambler.ru
Ангел Лилия Васильевна	ОИЯИ	liliaanghel@hotmail.com
Андреев Всеволод Владимирович	Чувашский государственный университет	andreev_vsevolod@mail.ru
Андрюшина Инна Николаевна	Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета	futur6@mail.ru
Антипов Артем Игоревич	СПбГУ	artemis198@mail.ru
Аристов Дмитрий Николаевич	ПИЯФ	dmitri.aristov@gmail.com
Арифуллин Марсель Равшанович	Оренбургский государственный университет	lanmars@rambler.ru
Бабанов Юрий Александрович	Институт физики металлов	babanov@imp.uran.ru
Баймуратов Анвар Саматович	Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики	baimuratov.anvar@gmail.com
Баранов Дмитрий Алексеевич	ФТИ им А.Ф. Иоффе РАН	dbaranov@mail.ioffe.ru
Баранчиков Александр Евреньевич	ИОНХ РАН	a.baranchikov@yandex.ru
Баталов Лев Алексеевич	Физический факультет СПбГУ	zlokor88@gmail.com
Бахтеева Наталия Дмитриевна	ИМЕТ РАН	nbach@imet.ac.ru

Белобров Петр Иванович	Сибирский федеральный университет, Институт биофизики СО РАН	peter.belobrov@gmail.com
Бельтюков Ярослав Михайлович	СПбГПУ	ybeltukov@gmail.com
Бессараб Павел Федорович	Санкт-Петербургский Государственный Университет	van_der_paul@yahoo.co.uk
Боднарчук Ядвига Викторовна	ТвГУ	deuten@mail.ru
Боднарчук Виктория Викторовна	ТвГУ	deuten_wink@mail.ru
Бондарев Алексей Владимирович	Воронежский государственный технический университет	bondarev_a_v@mail.ru
Борисов Сергей Аркадьевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	sborisov@pnpi.spb.ru
Босак Алексей Алексеевич	ESRF	bossak@esrf.fr
Бочаров Дмитрий	Латвийский университет	bocharov@latnet.lv
Булавин Максим Викторович	ОИЯИ	bulavin85@inbox.ru
Бурковский Роман Георгиевич	Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет	roman.burkovsky@gmail.com
Буряков Тимофей Игоревич	Институт Неорганической Химии СО РАН	factorial@ngs.ru
Бутусова Елена Николаевна	ННГУ им. Н.И.Лобачевского	Anelka13@yandex.ru
Быстрова Анна Владимировна	МГУ им.М.В.Ломоносова	aniria2003@mail.ru
Вальковский Глеб Андреевич	Учреждение Российской академии наук Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН	xray@mail.ioffe.ru
Васильева Людмила Анатольевна	Чувашский государственный университет	ask_lyuda@mail.ru
Величко Евгений Владимирович	Уральский Государственный Университет им. А. М. Горького	vasia171@yandex.ru
Вербенко Илья Александрович	НИИ физики ЮФУ	ilich001@yandex.ru
Витошнев Виталий Валерьевич	ПИЯФ	Vitoshnev@bk.ru
Воробьев Алексей Александрович	ESRF	vorobiev@esrf.fr

Воронина Ксения Владимировна	СПбГУ	kseniavvv@mail.ru
Гаврилов Сергей Викторович	ПИЯФ РАН	gavrilov@pnpi.spb.ru
Галкина Таисия Андреевна	Новгородский Государственный Университет имени Ярослава Мудрого	taisiya_galkina@mail.ru
Гамидов Садиг Вагиф оглы	Институт Физики НАН РА	s.hamidov@rambler.ru
Герашенко Олег Васильевич	ПИЯФ	gerashch@pnpi.spb.ru
Гинзбург Саул Лейбович	ПИЯФ	ginzbsl@mail.ru
Голосовский Игорь Викторович	ПИЯФ	golosov@mail.pnpi.spb.ru
Горкунов Максим Валерьевич	ИК РАН	gorkunov@ns.crys.ras.ru
Григорьев Сергей Валентинович	ПИЯФ	grigor@pnpi.spb.ru
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru
Григорькин Алексей Александрович	пияф	ale-grig@yandex.ru
Губанова Надежда Николаевна	ПИЯФ РАН	gubnn@lns.pnpi.spb.ru
Гуров Юрий Владимирович	ЮФУ	bghati@yandex.ru
Гусейнов Гусейн Джалил	Институт Физики НАН РА	huseyn-1978@mail.ru
Данилюк Максим Александрович	БГУИР	maxim_danilyk@mail.ru
Даницэ Зинаида Николаевна	Института прикладной физики Академии Наук Молдовы	danitaz@mail.ru
Джабаров Сакин Гамид оглы	Объединенный институт ядерных исследований	sakin@jinr.ru
Дмитриев Владимир Петрович	ESRF	dmitriev@esrf.fr
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	Институт кристаллографии РАН	dmitrien@crys.ras.ru
Дубицкий Илья Семенович	СПбГУ	32167i@mail.ru
Дунаевский Сергей Михайлович	ПИЯФ	dunaevsk@mail.pnpi.spb.ru
Дьячковская Туйара Кимовна	Северо-Восточный федеральный университет	tuyara-kim@yandex.ru
Дядькин Вадим Александрович	ПИЯФ	dyadkin@lns.pnpi.spb.ru
Дядькина Екатерина Анатольевна	Петербургский институт ядерной физики	katy@lns.pnpi.spb.ru

Евстигнеева Надежда Викторовна	Новгу им.Ярослава Мудрого	Nadya1203.89@mail.ru
Елисеев Андрей	ФНМ МГУ им. М.В.Ломоносова	eliseev@inorg.chem.msu.ru
Елькин Фёдор Сергеевич	ИФВД РАН	feodor@hppi.troitsk.ru
Ермакова Анна Витальевна	Белорусский Государственный Университет	AnnErmakova@gmail.com
Ермакова Ольга Николаевна	Институт Химии Твердого Тела	ermakova_ihim@mail.ru
Ерхан Рауль Виктор	ОИЯИ	erhan@nf.jinr.ru
Залуцкий Александр Альбертович	ЯГТУ	zalutskii@mail.ru
Зобкало Игорь Александрович	ПИЯФ РАН	zobkalo@pnpi.spb.ru
Иванов Владимир Константинович	ИОНХ РАН	van@igic.ras.ru
Иванов Александр	Institut Laue-Langevin	aivanov@ill.fr
иванова натаалья анатольевна	НИЯУ (МИФИ)	uran-o2@yandex.ru
Иванская Наталья Николаевна	УлГТУ	naivanskaya@yandex.ru
Иваньков Александр Игоревич	ОИЯИ	ivankov@jinr.ru
Ивашевская Светлана Николаевна	Учреждение РАН Институт геологии Карельского научного центра РАН	ivashevskaja@yahoo.com
Ильин Дмитрий Сергеевич	ПИЯФ	digatchi@list.ru
Иносов Дмитрий Сергеевич	ин-т Макса Планка	d.inosov@fkf.mpg.de
Казимиров Вячеслав Юрьевич	ОИЯИ	vkazimir@yahoo.com
Каманцев Александр Павлович	Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН	kama@cplire.ru
Канюкаева Рамиля Рафаильевна	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	ramilush@mail.ru
Кассан-Оглы Феликс Александрович	ИФМ УрО РАН	felix.kassan-ogly@imp.uran.ru
Кибалин Юрий Андреевича	ПИЯФ	kibalin@mail.ru
Киселёв Игорь Анатольевич	ПИЯФ Ран	kisselev@omrb.pnpi.spb.ru
Климов Александр Васильевич	Оренбургский Государственный Университет	A-Klimov1986@yandex.ru

Кобылянская Екатерина Геннадьевна	ПИЯФ РАН	cathie@lns.pnpi.spb.ru
Коваленко Екатерина Сергеевна	РНЦ "Курчатовский институт"	kovalenko_es@mail.ru
Козинкин Юрий Александрович	НИИ Физики ЮФУ	Kozinkin_U@mail.ru
Колеватов Илья Леонидович	СПбГУ	ilya.kolevatov@gmail.com
Колотушкин Дмитрий Сергеевич	ПИЯФ	mr.dimitriy@mail.ru
Комов Михаил Николаевич	МУПОЧ "Дубна"	mnkomov@gmail.ru
Конжур Евгения Андреевна	МУПОЧ "Дубна"	konea@yandex.ru
Коньков Анатолий Сергеевич	НИТПУ	Ekwinus@sibmail.com
Копица Геннадий Петрович	ПИЯФ	kopitsa@pnpi.spb.ru
Кораблев-Дайсон Максим Александрович	Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет	maxdyson@gmail.com
Костюченко Зинаида Алексеевна	СПбГПУ	k_zinaida@mail.ru
Кошкидько Юрий Сергеевич	ТвГУ	yurec@mail.ru
Краснорусский Владимир Николаевич	ИФВД РАН	krsvn@hppi.troitsk.ru
Криштоп Виктор Владимирович	Дальневосточный государственный университет путей сообщения	krishtop@list.ru
Крутикова Екатерина	Уральский государственный университет им.А.М.Горького	Ekaterina.Krutikova@usu.ru
Кручинин Константин Олегович	НИТПУ	kruchinin@interact.phtd.tpu.ru
Крючкова Дина Михайловна	МУПОЧ "Дубна"	din-din-86@mail.ru
Кудряшев Валерий Алексеевич	ПИЯФ им.Б.П.Константинова	vkudryashov@pnpi.spb.ru
Леонов Михаил Юрьевич	Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики	m.yu.leonov@gmail.com

Леонтьев Игорь Николаевич	Южный Федеральный Университет	i.leontiev@rambler.ru
Лепешкин Сергей Владимирович	ФИАН	lepeshkin@lpi.ru
Литвин Василий Сергеевич	Институт ядерных исследований РАН	vlitvin@inr.ru
Лунёв Артём Владимирович	НИЯУ МИФИ	alounev@list.ru
Луцев Леонид Владимирович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	l_lutsev@mail.ru
Лысова Ирина Владимировна	Чувашский госпедуниверситет	arinia@mail.ru
Малеев Сергей Владимирович	ПИЯФ РАН	maleyevsv@mail.ru
Маношин Сергей Александрович	Объединенный институт ядерных исследований	manoshin@nf.jinr.ru
Матасов Максим Дмитриевич	СГУ	matasovmd@info.sgu.ru
Матвеев Василий Александрович	ПИЯФ РАН	matveev@lns.pnpi.spb.ru
Махмудов Хайрулло Файзуллаевич	ФТИ	h.machmoudov@mail.ioffe.ru
Мацко Никита Леонидович	ФИАН	matsko@lpi.ru
Маширов Алексей Викторович	Институт радиотехники и электроники им. В.А.Котельникова РАН	a.v.mashirov@mail.ru
Метелев Сергей Вадимович	ПИЯФ	metelev@pnpi.spb.ru
Миллер Александр Иванович	Южный федеральный университет	miller@sfedu.ru
Михейкин Алексей Сергеевич	Южный Федеральный университет	aleksey.mikheykin@gmail.com
Морозов Максим Сергеевич	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	maxymor@mail.ru
Москвин Александр	Уральский государственный университет	alexandr.moskvin@usu.ru
Москвин Евгений	ПИЯФ	mosqueen@pnpi.spb.ru
Мохненко Сергей Николаевич	АНОО ВПО Воронежский Институт Высоких Технологий	mohnenko@yandex.ru
Мухин Константин Александрович	Объединенный Институт Ядерных Исследований (ОИЯИ)	kostik001@mail.ru
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

Накин Андрей Валерьевич	ПИЯФ	andrey.nakin@gmail.com
Напольский Кирилл Сергеевич	Факультет наук о материалах МГУ им. М.В. Ломоносова	knapolsky@gmail.com
Несвижевский Валерий Викторович	Институт Лауэ-Ланжэвена	nesvizhevsky@ill.eu
Нетреба Анна Васильевна	УрГУ	anya.netreba@gmail.com
Никитин Артем Максимович	МГУ им. Ломоносова	am.nikitin@physics.msu.ru
Ожерельев Виктор Вадимович	Воронежский государственный технический университет	ozher@mail.ru
Окороков Алексей Иванович	ПИЯФ	okorokov@pnpi.spb.ru
Орешко Алексей Павлович	МГУ, физический факультет	oreshko@mail.ru
Осинская Юлия Владимировна	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	ojv@ssu.samara.ru
Павленко Анатолий Владимирович	Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета	dipoleglass@gmail.com
Павлов Никита Сергеевич	Институт электрофизики УрО РАН	pavlovns@gmail.com
Панова Анна Александровна	ГОУ ВПО Уральский государственный университет им. А.М.Горького	gapease@mail.ru
Парамонова Екатерина Владимировна	ИМПБ РАН	ekatp@yandex.ru
Парфененко Ксения Олеговна	Charles University, Prague	senya@email.cz
Пермикин Дмитрий Владимирович	Уральский государственный университет	permikindv@mail.ru
Петров Сергей Степанович	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	serpet1@yandex.ru
Пивоварова Юлия Владимировна	ФТИ им. Иоффе РАН	juliapivovarova_@mail.ru
Пиядов Василий	ПИЯФ РАН	piyadov@lns.pnpi.spb.ru
Плешанов Николай Константинович	ПИЯФ	pnk@pnpi.spb.ru
Покоев Александр Владимирович	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	pokoev@ssu.samara.ru

Положенцев Олег	Южный федеральный университет	olegpolozhentsev@mail.ru
Пономарева Алина Александровна	Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический университет "ЛЭТИ"	ap_k@inbox.ru
Попережай Сергей Николаевич	Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина	Sergey.Poperedjay1986@gmail.com
Попова Светлана Владимировна	ГОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический университет	svetpv2007@ya.ru
Попова Елена Алексеевна	Физико-технический институт им. Иоффе	elena.popova566@gmail.com
Поречная Надежда Ивановна	СПбГПУ	nadezhdaporechnaya@gmail.com
Потапова Надежда Михайловна	ПИЯФ	potapova@lns.pnpi.spb.ru
Пузанов Максим Викторович	МУПОЧ "Дубна"	puzanovmaxim@gmail.com
Радиевский Александр Викторович	ИЗМИРАН	avradievsky@mail.ru
Разумная Анна Григорьевна	Южный федеральный университет	razumnaya2@yandex.ru
Резниченко Лариса Андреевна	НИИ физики ЮФУ	ilich001@yandex.ru
Роговой Дмитрий Фёдорович	Воронежский государственный технический университет	rogovoi_df@mail.ru
Родионова Валерия Викторовна	МГУ имени М.В.Ломоносова	rodionova@magn.ru
Рудская Анжела Григорьевна	Южный федеральный университет	arudskaya@mail.ru
Рунов Владимир Владимирович	ПИЯФ	runov@pnpi.spb.ru
Рунова Маина Константиновна	ПИЯФ	runova@pnpi.spb.ru
Русакова Алена	ИЯФ НЯЦ РК	arussakova@gmail.com
Русских Галина Андреевна	МУПОЧ "Дубна"	galusik@inbox.ru
Рыжов Вячеслав Анатольевич	ПИЯФ	ryzhov@omrb.pnpi.spb.ru
Саблина Инга Владимировна	СПбГУ	sablinainga@gmail.com
Савицкая Наталья Евгеньевна	ПИЯФ	savitska@inbox.ru
Саламатов Юрий Александрович	Институт физики металлов УрО РАН	salamatov@imp.uran.ru

Северюхин Юрий Сергеевич	Объединенный Институт Ядерных Исследований	yucucmber@mail.ru
Семисалова Анна Сергеевна	МГУ	semisalova@magn.ru
Середин Павел Владимирович	Воронежский государственный университет	paul@phys.vsu.ru
Сибилев Августин Иванович	ПИЯФ	gerashch@pnpi.spb.ru
Сизанов Алексей Владимирович	ПИЯФ	alexey.sizanov@gmail.com
Сиколенко Вадим Витальевич	ОИЯИ	vadim.sikolenko@jinr.ru
Ситник Михаил Игоревич	ОИЯИ	michas2003@mail.ru
Соколов Александр Иванович	Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ"	ais2002@mail.ru
Соколова Елена Владимировна	Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН	lenux999@yandex.ru
Соловьев Дмитрий Владимирович	Объединенный институт ядерных исследований	DimkaupmL@gmail.com
Сорокин Александр Олегович	ПИЯФ	aosorokin@gmail.com
Сухарина Галина Борисовна	Южный федеральный университет	sukharina@mail.ru
Сыромятников Владислав Генрихович	ПИЯФ	svg@pnpi.spb.ru
Сыромятников Арсений Владиславович	ПИЯФ	asyromyatnikov@yandex.ru
Таланов Михаил Валерьевич	Южный федеральный университет	tmikle-man@mail.ru
Тарасов Борис Александрович	НИЯУ МИФИ	ulens.up@gmail.com
Тарнавич Владислав Валерьевич	Воронежский государственный технический университет	tarnavich@mail.ru
Таровик Эрнест Григорьевич	ПИЯФ	yurka@fns.pnpi.spb.ru
Тимофеева Екатерина Евгеньевна	ОСП "Сибирский физико-технический институт Томского государственного университета"	katie@sibmail.com
Тимченко Николай Алексеевич	ТПУ	timchenko@tpu.ru
Ткачев Евгений Николаевич	Институт Неорганической Химии СО РАН	etkachev@niic.nsc.ru
Топерверг Борис	PNPI	boristop@thd.pnpi.spb.ru

Павлович		
Торопов Никита Александрович	Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики	nt7@danet.in
Труханов Алексей Валентинович	ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению"	truhanov86@mail.ru
Турков Вадим Константинович	Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики	vadim.turkov@gmail.com
Тюлюсов Антон Николаевич	ГНЦ РФ ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru
Тюняев Андрей Александрович	Вычислительный центр им. А.А. Дородницына	dazzle@ropnet.ru
Уклеев Виктор Алексеевич	Санкт-Петербургский академический университет — научно-образовательный центр нанотехнологий РАН	ukleev@lns.pnpi.spb.ru
Ульянов Владимир Александрович	ПИЯФ	ulyanov@pnpi.spb.ru
Упоров Сергей Александрович	Уральский государственный педагогический университет	segga@bk.ru
Упорова Наталья Сергеевна	Уральский государственный педагогический университет	fominans@rambler.ru
Федоров Александр Владимирович	Учреждение Российской академии наук Институт физики высоких давлений РАН им. Л.Ф. Верещагина РАН	fav3@mail.ru
Федорова Наталья Сергеевна	Уральский государственный университет им. А.М. Горького	boardilka@mail.ru
Федотов Андрей Александрович	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	andrew.f.box@mail.ru
Фирсин Антон Александрович	УрГУ им. А.М. Горького	firsin_anton@bk.ru
Халилова Хураман	Институт Физики НАН РА	x.khalilova@rambler.ru

Нусрат кызы		
Хамова Тамара Владимировна	Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН	LTPP@rambler.ru
Харченко Андрей Андреевич	Белорусский государственный университет	Xaatm@mail.ru
Храмков Алексей Сергеевич	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	clapmonks@gmail.com
Чайковский Дмитрий Александрович	МУПОЧ "Дубна"	mitichya@yandex.ru
Черненко Юрий Петрович	ПИЯФ	yucher@pnpi.spb.ru
Чернышева Екатерина Ильинична	СПбГПУ	kate.chernysheva@gmail.com
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr
Черняк Кирилл	СПбГУ	studphys@yandex.ru
Четвериков Юрий Олегович	пияф	Yurii.Chetverikov@pnpi.spb.ru
Чумаков Андрей Петрович	ПИЯФ РАН	chumakov@lns.pnpi.spb.ru
Чумакова Александра	ПИЯФ	vasilieva@lns.pnpi.spb.ru
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	mischar@mail.ioffe.ru
Шаяхметов Виталий Русланович	ГОУ ВПО «Самарский государственный университет»	vshayakhmetov@mail.ru
Шнайдер Анна Александровна	НовГУ	schneider@mail.natm.ru
Эльмуротова Дилноза Бахтиеровна	ИЯФ АНРУз	elmurotova_d@mail.ru
Юрченко Никита Константинович	ПИЯФ	yurchenko.nikita@gmail.com
Яковенко Екатерина Владимировна	РНЦ КИ	eyakovenko@list.ru