

Федеральное государственное бюджетное учреждение
«ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Б.П. КОНСТАНТИНОВА»

**XLVI Школа ФГБУ «ПИЯФ»
по физике
конденсированного состояния**

ФКС – 2012
12 – 17 марта 2012 г., С.-Петербург

**Сборник тезисов
и список участников**

Гатчина – 2012

УДК 529.171.018

В данном выпуске представлены аннотации докладов и состав участников XLVI Школы ФГБУ «ПИАФ» по физике конденсированного состояния (ФКС-2012), 12 – 17 марта 2012 г., С.-Петербург.

This edition presents abstracts of the reports and the contact information of the participants of the XLVI PNPI School on condensed state physics (CSP - 2012). (12 – 17 of March, 2012, St. Petersburg).

Проведению Школы оказали поддержку:

**Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт
ядерной физики им. Б.П. Константинова»
Российский фонд фундаментальных исследований
Фонд некоммерческих программ "ДИНАСТИЯ"**

Сборник подготовили А.И.Окороков и К.В. Воронина

Примечание: Тезисы напечатаны без какой-либо редакции издательством. Орфография и пунктуация авторов сохранены.

© ФГБУ «ПИАФ», ГАТЧИНА, 2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

Лекции	4
Стендовые доклады	27
Секция «Квантовые и магнитные явления»	27
Секция «Фазовые переходы»	39
Секция «Методика»	64
Секция «Наноструктуры»	82
Секция «Разное»	134
Список участников школы	155

Лекции

Физика графена

Л.А. Фальковский

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия

Графитовые материалы – сам графит, фуллерены, нанотрубки уже давно, несколько десятилетий, были предметом широкого изучения, но особое внимание привлек графен (монослой с симметрией пчелиных сот) после статьи Гейма и Новоселова в 2005 г., в которой сообщалось о двух важных наблюдениях. Во-первых, это существование универсального (т.е. независящего от качества образца) минимального как функции числа носителей сопротивления ρ , во-вторых, наблюдение квантового эффекта Холла. Затем последовали сообщения об универсальном характере динамической (на переменном токе) проводимости графена. Теперь уже речь шла о независимости проводимости от каких-либо материальных параметров, например, от параметров электронного спектра. Эти явления привлекли внимание большого числа теоретиков.

Выяснилось, в частности, что коэффициент прохождения света сквозь графеновый монослой отличается от единицы на $\pi\alpha$, где α – постоянная квантовой электродинамики. Последовали заявления о возможности проверки квантовой электродинамики в лабораторных условиях, а не на супердорогих коллайдерах. «Дираковские фермионы» - расхожий термин, дающий, по-видимому, право на публикацию не только в глянцевах научных журналах. К счастью, эта шумиха не могла исключить появления серьезных работ. Здесь следует остановиться на исследовании симметричных проблем в электронных и фононных графитовых системах, на решении задач, связанных с электронным взаимодействием, а также на способах создания запрещенной щели в электронном спектре, что особенно важно для практических применений в электронике.

В последнее пятилетие повышенный интерес со стороны экспериментаторов привлекает магнитооптика графена, графита и графенового бислоя в квантующем магнитном поле. Интерпретация таких наблюдений осложнена наличием, так называемого тригонального искажения (trigonal warping) электронного спектра, которое присутствует у графенового бислоя и графита и не позволяет найти точное решение многозонного уравнения Шредингера в магнитном поле. Эксперимент, выполненный швейцарской группой в прошедшем году, показывает, что эффекты Фарадея-Керра (поворот плоскости поляризации у прошедшей и отраженной волн) в графеновых слоях аномально велики - достигают нескольких градусов в полях порядка 10 Т.

Работа поддержана грантом РФФИ № 10-02-00193-а и программой SCOPES (грант IZ73Z0_128026 of Swiss NSF).

Ускоренное расширение Вселенной и темная энергия

А.В. Иванчик

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

Обзорная лекция посвящена истории вопроса об ускоренном расширении Вселенной – явлении, за открытие которого астрофизики Сол Перлмуттер, Брайан Шмидт и Адам Рисс получили Нобелевскую премию 2011 г.

Создание Общей теории относительности (Эйнштейн, 1916 г.), теоретическое предсказание Фридманом (1922 г.) расширения Вселенной и его экспериментальное подтверждение Хабблом (1929 г.) стало началом развития современной космологии. С момента подтверждения факта расширения Вселенной астрофизиков волновал вопрос и о «второй производной эволюции» – с какой скоростью расширение замедляется? Гравитационное взаимодействие из четырех известных на сегодня, являясь самым универсальным, имеет только один «знак» – все известные частицы взаимодействуют гравитационно и только притягиваются! Каково же было удивление – когда было обнаружено, что Вселенная расширяется с ускорением!!!

В докладе рассказывается, как это было обнаружено, как можно интерпретировать факт ускоренного расширения Вселенной, и какие вопросы перед современной физикой ставит это открытие.

Квазикристаллы и Нобелевская премия за 2011 год в области химии

В.Е. Дмитриенко, В.А. Чижиков

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

Присуждение в 2011 г. Нобелевской премии за открытие квазикристаллов показало, что истина и красота безразличны научному сообществу (химикам, по крайней мере). Квазикристаллами, строго говоря, называются **апериодические** структуры с дальним ориентационным и позиционным **порядком**, апериодичность которых вынуждается их **некристаллографической** симметрией [1]. Самый популярный и самый красивый пример некристаллографической симметрии – это известная с каменного века икосаэдрическая симметрия, включающая оси поворотов пятого порядка, строго запрещенные в периодических структурах. Именно наблюдение осей пятого порядка в картине дифракции электронов от быстро охлажденного сплава Al-Mn [2] потрясло основы кристаллографии и привело к присуждению Нобелевской премии. Позднее квазикристаллы, в том числе термодинамически стабильные, были получены в различных материалах. Наблюдались также одноосные квазикристаллы с осями симметрии пятого, восьмого, десятого и двенадцатого порядков.

Дальний позиционный порядок означает, что, несмотря на отсутствие периодичности, дифракционная картина квазикристаллов состоит из бесконечно узких брэгговских пиков, а ориентационные порядок означает просто, что оси симметрии одинаково ориентированы на сколь угодно больших расстояниях. Но само понятие симметрии изменяется кардинально: квазикристалл **не может** быть совмещен сам с собой никакой трансляцией и никаким поворотом. Однако сколь угодно большая часть квазикристалла может быть точно совмещена с помощью некоторой трансляции с другой такой же частью, а сколь угодно большая часть повернутого осью симметрии квазикристалла может быть точно совмещена с такой же частью исходного квазикристалла.

Математически упомянутые выше странные свойства квазикристаллических структур довольно естественно описываются свойствами почти периодических функций, а сами структуры могут быть получены **иррациональными** сечениями или проекциями **периодических** структур **многомерного** пространства (например, в шестимерном пространстве есть **периодические** структуры с **икосаэдрической** симметрией).

Главный физический вопрос – где же располагаются атомы в квазикристаллах? И как атомы решают, где им находиться? Ведь каждый атом в квазикристалле находится в уникальном положении: изучая локальные окружения двух любых атомов даже идеального квазикристалла, мы рано или поздно найдем отличия в их окружении (чего нет в идеальных кристаллах).

Ключом к решению этой проблемы являются кристаллические **аппроксиманты** квазикристаллов. Эти периодические структуры (ряды структур) с увеличением их периодов становятся все больше похожими на квазикристаллы и по расположению атомов, и по физическим свойствам. Формально они могут быть получены **рациональными** приближениями к упомянутому выше иррациональному сечению, дающему квазикристалл. Так как аппроксиманты периодичны, их атомная структура, тепловые колебания и дефекты могут быть исследованы стандартными методами с помощью рассеяния и дифракции рентгеновского излучения, нейтронов и электронов.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

1. C. Janot, Quasicrystals: A Primer. Clarendon Press, Oxford, 1994 (free in Internet).
2. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett., 53, 1951 (1984).

Изучение поверхностей с помощью рентгеновской рефлектометрии и дифракции в скользящей геометрии

О.В. Коновалов

Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

Результатом экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей в скользящей геометрии является информация о строении различных двумерных систем с характерными размерами внутренней структуры от нескольких ангстрем до микрона. Интерес к исследованию поверхностей в скользящей геометрии постоянно растет, что приводит к последовательному развитию как технического оснащения так и теории. Данная методика используется для всестороннего изучения структуры широкого класса конденсированного вещества и, в частности, для характеристики «мягкого конденсированного вещества» (Soft condensed matter), к которому относятся такие объекты как жидкости, полимеры, гели, самоорганизованные моно- и мульти- молекулярные слои органических молекул на водной поверхности (например, модели клеточных мембран), коллоидные системы, мицеллы, полимерные пленки, двумерные белковые кристаллы и множество других систем, структурированных на нано-, мезо- и микроскопическом масштабе.

В докладе представлены основы рентгеновских методов чувствительных к строению поверхности и дана классификация экспериментальных методов с описанием их особенностей. Рассмотрены такие методы как: рентгеновская рефлектометрия; широкоугольная дифракция в скользящей геометрии; диффузное рассеяние в скользящей геометрии; малоугловое рассеяние в скользящей геометрии; и флюоресценция в режиме полного внешнего отражения. Эти методы будут проиллюстрированы примерами научных работ выполненных на экспериментальной станции ID10B одной из лучших синхротронных станций для исследования жидких поверхностей, установленной в Европейском Центре Синхротронного Излучения (ESRF, Гренобль, Франция).

Спектроскопия рентгеновского поглощения – метод определения параметров наноразмерной атомной, электронной и магнитной структуры конденсированных материалов без дальнего порядка

А.В. Солдатов

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В докладе дается обзор использования спектроскопии рентгеновского поглощения с использованием источников синхротронного излучения для определения параметров наноразмерной атомной, электронной и магнитной структуры конденсированных материалов без дальнего порядка в расположении атомов. В частности, рассматриваются методики EXAFS, XANES, microXANES, XPEEM, XMCD и RIXS, а также рассматриваются применения этих методик с разрешением по времени.

Особое внимание уделено описанию нового метода определения параметров наноразмерной атомной структуры материалов на основе теоретического анализа спектров ближней области рентгеновского поглощения (XANES) с использованием методов многомерной интерполяции [1] (комплекс программного обеспечения FitIt) [2]. Уникальность метода заключается в том, что он позволяет не только с высокой точностью (до 0.002 нанометра) определять межатомные расстояния (функцию радиального распределения), но и угловое распределение атомов (углы химической связи).[3].

Представлен обзор результатов, полученных по данной методике для широкого класса объектов: таких как свободные и осажденные на поверхность GaAs и кремния нанокластеры меди, свободные кластеры титана и оксида титана, нанокластеров алмаза, массивы наногл разбавленных магнитных полупроводников, а также материалов нано-био-медицинских технологий (локальной структуры активного металлического центра в жизненно важных белках и активных комплексов золота, перспективных в качестве новых противораковых препаратов). Одним из важных приложений разработанного метода является возможность его применения для анализа зависящих от времени процессов в частности, исследование изменения наноразмерной атомной структуры конденсированных веществ в ходе химической реакции или в ходе процесса фотовозбуждения [4].

1. Grigory Smolentsev, Alexander V. Soldatov, *Journal of Synchrotron Radiation* 13 (2006) 19-29..
2. http://nano.sfedu.ru/fitit_r.html
3. А.В. Солдатов, Журнал структурной химии 49 (2008) s111-s115.
4. Lockard, Jenny; Kabehie, Sanaz; Zink, Jeffrey; Chen, Lin; Smolentsev, Grigory; Soldatov, Alexander., *The Journal of Physical Chemistry B* 114 (2010) 14521–14527.

Опыт работы Швейцарско-Норвежской станции SNBL на Европейском Источнике Синхротронного Излучения

В. П. Дмитриев

*Швейцарско-Норвежские Линии на Европейском Источнике Синхротронного Излучения
Swiss-Norwegian Beam Lines at the European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

Растущий интерес и необходимость проведения российскими учеными исследований с использованием синхротронного излучения ставит вопрос о выборе оптимальных моделей организации таких исследований. Строительством новых и модернизацией уже действующих национальных источников, как правило, удается удовлетворить лишь часть существующих потребностей. Именно поэтому многие европейские страны участвуют в таких крупных международных проектах как Европейский Синхротронный Центр в Гренобле, Франция (ESRF). Полного же совпадения специфического профиля национальной науки с набором предоставляемой исследователям синхротронной техники удастся достичь организацией на базе крупных международных источников синхротронного излучения независимых национальных лабораторий.

Швейцарско-Норвежские линии (SNBL) в ESRF являются би-национальным консорциумом, созданным в 1991 году с целью наиболее полного удовлетворения потребностей национальных исследовательских институтов и университетов стран-партнеров в работах с синхротронным излучением. Инструментальная часть SNBL включает в себя порошковый диффрактометр высокого разрешения, монокристалльный 6-крупный диффрактометр, универсальный диффрактометр с плоским двухкоординатным детектором, EXAFS-спектрометр, работающий в диапазоне энергий 4-70 кэВ.

В настоящее время SNBL демонстрирует экстраординарную эффективность, что делает его безусловным лидером среди лабораторий аналогичного профиля. Ежегодно две станции SNBL принимают более 300 пользователей из различных стран Европы, выполняющих до 90 исследовательских проектов, по результатам которых публикуется до 130 статей. Высокий импакт-фактор публикаций пользователей SNBL, достигший в 2011 году средней величины 4.93, свидетельствует о растущем качестве и высокой конкурентоспособности проводимых на линиях исследований. Для сравнения: Physical Review Letters – 6.944; Inorganic Chemistry – 4.737; Physical Review B – 3.172.

На примере конкретных научных проектов, выполненных в SNBL, мы проанализируем причины их высокой эффективности, а также оценим перспективы применения данной модели организации синхротронных исследований в России.

Проект дифрактометра PILATUSikz SNBL и новые возможности дифракционного эксперимента

Д.Ю. Чернышов

*Швейцарско-Норвежские Линии на Европейском Источнике Синхротронного Излучения
Swiss-Norwegian Beam Lines at the European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

В докладе будет представлен проект нового дифрактометра на базе пиксельного двумерного детектора нового поколения ПИЛАТУС2М; дифрактометр будет установлен на линии ВМ1А Европейского источника СИ. В отличие от большинства приборов с большим двумерным детектором, новый дифрактометр предусматривает прецизионное перемещение большого детектора во время эксперимента. Вместе с 3-х круглым каппа-гонометром образца, такая конструкция обеспечит быстрый, полный, статистически избыточный набор рентгеноструктурных данных. Ожидаемое время стандартного структурного эксперимента – несколько минут, детальное сканирование обратного пространства для типового эксперимента по диффузному рассеянию – 10-15 минут, съемка порошкограммы – доля секунды.

В докладе будут также обсуждаться новые дифракционные эксперименты, которые станут возможными на создаваемом дифрактометре, и текущее состояние проекта.

Структурная диагностика функциональных материалов на Курчатовском источнике СИ: статус, планы и перспективы развития

Я.В. Зубавичус, А.А. Велигжанин, В.Ю. Мурзин, А.А. Чернышов

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В докладе будет представлено текущее состояние и ближайшие планы развития исследовательских установок на Курчатовском источнике синхротронного излучения.

Основное внимание будет уделено конструкции, исследовательским возможностям, программе исследований и недавним результатам, полученным на станции «Структурное материаловедение». В рутинном режиме на оборудовании станции реализованы следующие методы: порошковая рентгеновская дифрактометрия, рентгеновское малоугловое рассеяние (в том числе их модификации, основанные на использовании эффекта аномального рассеяния), рентгеноабсорбционная спектроскопия EXAFS/XANES, а также их комбинации. Эти методы дают взаимодополняющую структурную информацию об исследуемом объекте в интервале характерных размеров от 1 Å (межатомные расстояния) до 100 нм (размеры областей неоднородности, частиц в матрице, пор). Основными объектами проводимых исследований являются частично упорядоченные, некристаллические и нанокристаллические материалы из разных прикладных разделов физики и химии. Высокая интенсивность синхротронного источника обеспечивает возможность «быстрых» измерений на маленьких по размеру образцах. Доступный диапазон энергий фотонов 5-30 кэВ. Образец в ходе исследования может находиться в особых условиях температура (6-850 К) + газовая среда (вакуум, инертные газы, кислород, водород и т.д.).

В частности, приводятся результаты синхротронного мониторинга формирования металлических наночастиц из молекулярных предшественников, анализ структурных особенностей наночастиц сложных оксидов в системах Gd-Hf и Dy-Hf, магнитных жидкостей и др.

Опыт работы малоугловой станции ДИКСИ на Курчатовском источнике СИ

Е.В. Яковенко

НИЦ «Курчатовский Институт», Москва, Россия

Станция ДИКСИ, изначально предназначенная для рентгеноструктурных исследований медико-биологических нанообъектов - клеточных и тканевых ансамблей макромолекул биополимеров, была создана учеными из Института теоретической и экспериментальной биологии РАН и Института биологии клетки РАН (г. Пущино, МО) в сотрудничестве с институтами СО РАН (Институт ядерной физики имени Г.И.Будкера, Институт неорганической химии, Институт катализа, Институт химии твердого тела и механохимии) [ссылка]. Природа исследуемых объектов определила выбор методики (дифрактометрия в области малых и средних углов) и светосильной оптической схемы на основе фокусирующих монохроматора и зеркал. Важной особенностью, давшей станции ее название (Дифракционное Кино на СИ), является возможность регистрации дифракционных картин с высоким временным разрешением при помощи разработанного в ИЯФ СО РАН высокочувствительного однокоординатного детектора.

Со времени выхода накопителя Сибирь-2 в режим работы на пользователей учеными из ИТЭБ РАН и ИБК РАН на станции ДИКСИ был получен ряд важных результатов; в частности, на основе анализа порядка 500 рентгенограмм тканей человека и животных был обнаружен «структурный наноинвариант» - упорядоченная протеогликановая структура с периодом 4.5 нм, отсутствующая в здоровых тканях, но появляющаяся при разного рода патологиях [1-2]. Биологическую тематику работ на ДИКСИ дополнили структурные исследования липидных мембран, проводимые учеными Лаборатории нейтронной физики им.Франка (ОИЯИ, Дубна) [3].

С появлением новых пользователей из МГУ, ЮФУ, ПИЯФ, ИОНХ и ИФТТ на станции ДИКСИ появилось новое направление исследований - диагностика твердотельных наноструктур и, вместе с тем, повысились требования к стабильности пучка СИ, точности измерения картин малоуглового рассеяния, диапазону переданных импульсов (в области малых Q) и угловому разрешению. Стало ясно, что для того, чтобы отвечать этим требованиям, необходима серьезная модернизация не только ДИКСИ, но и накопителя Сибирь-2.

В предлагаемом докладе подробно, с привлечением т.н. «phase space method», рассмотрена оптическая схема ДИКСИ (от источника СИ до детектора), обсуждаются проблемы, возникшие при проведении первых измерений на твердотельных нанообъектах, и возможности их решения в ближайшее время и в перспективе.

1. A.A. Vazina, N.F. Lanina, V.N. Korneev, A.M. Matyushin, A.V. Zabelin, O.V. Naida, E.I. Maevskii, E.P. Polyakova. *Nanostructure Ordering of Proteoglycans of Some Biological Objects*. - J. Glass Physics and Chemistry. 2007, v. 33, No 3, p. 294-301.
2. A.A. Vazina, N.F. Lanina, A.A. Vasilieva, V.N. Korneev, A.V. Zabelin, E.P. Polyakova. *X-ray diffraction study of structural stability of giant proteoglycan molecules of mucus*. - Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 2009, A 603 p. 90–94.
3. М.А. Киселев, Е.В. Ермакова, Н.Ю. Рябова, О.В. Найда, А.В. Забелин, Д.К. Погорелый, В.Н. Корнеев, А.М. Балагуров. *Структурные исследования липидных мембран на синхротронном источнике СИБИРЬ-2*. - Кристаллография, 2010, т. 55, № 3, с. 503-509.

Чему нас научил марганец-кремний

С.В.Малеев

ФГБУ «Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

Оптические свойства нецентросимметричных кристаллов изучены давно и подробно. Марганец-кремний и другие В20 кристаллы, по-видимому, являются первыми подробно исследованными нецентросимметричными магнетиками. Их экспериментальное и теоретическое изучение привело к ряду неожиданных результатов, которые надо иметь в виду при исследовании других нецентросимметричных систем, таких как мультиферроики и сверхтонкие магнитные пленки. Во всех этих системах необычные явления связаны с взаимодействием Дзялошинского-Мория. Ниже перечислены некоторые из этих результатов.

1. Необычное критическое рассеяние с сильно выраженной киральностью.
2. Сложное поведение в магнитном поле, включающему т.н. А-фазу: неожиданный поворот оси спиновой спирали перпендикулярно полю.
3. Смешивание спиновых волн с импульсами \mathbf{q} и $\mathbf{q} \pm n \mathbf{k}$, где \mathbf{k} – волновой вектор спирали.
4. Такие перебросы на вектор спирали приводят к сильному изменению спектра спиновых волн: наряду с мягкой модой появляется серия возбуждений с конечными энергиями при нулевом импульсе, а мягкая мода становится сильно анизотропной.
5. В результате спин-волновые флуктуации демонстрируют инфракрасные расходимости, позволяющие объяснить существование А-фазы. Следует подчеркнуть, что перебросы должны определять низкоэнергетический спектр и других нецентро-симметричных магнетиков.

Особенности одномерного магнетизма

Д.Н. Аристов^{1,2}

¹ ФГБУ «Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

В этой учебной лекции я расскажу о приемах теоретического описания одномерных магнетиков и покажу, как теоретические предсказания наблюдаются в ряде экспериментов.

В ряде веществ магнитная подсистема состоит из одномерных цепочек спинов, почти невзаимодействующих между собой. При достаточно низких температурах такие магнетики весьма непохожи на трехмерные магнитные структуры. Главное отличие - это то, что в одном пространственном измерении дальнего магнитного порядка нет даже при нуле температур.

При наличии дальнего порядка, рассматривая флуктуации спинов относительно направления намагниченности, мы определяем элементарные возбуждения магнетика - спиновые волны (магноны). В одномерном случае флуктуации разрушают дальний порядок, и такой способ описания невозможен.

Обычный теоретический подход к цепочкам спинов $S=1/2$ включает в себя спин-фермионное преобразование, описывающее спины как фермионный газ со взаимодействием. Затем для полуколичественного анализа спектра и определения вида динамических восприимчивостей переходят к описанию цепочки в терминах непрерывной среды. После этого можно сделать еще один теоретический трюк, и представить возбуждения в фермионном газе как бозоны. Эти бозоны оказываются элементарными возбуждениями магнетика, т.е. искомым аналогом спиновых волн в отсутствие намагниченности. Такое описание верно "асимптотически", т.е. при малых энергиях возбуждений и для описания корреляций спинов на больших расстояниях.

Этот же анализ применим и для спиновых "лестниц" (цепочек спинов $S=1/2$, взаимодействующих между собой). Магнитная динамика двух цепочек спинов $S=1/2$ похожа на динамику цепочки спинов $S=1$. В последнем случае даже для изотропного обмена спектр возбуждений характеризуется конечной минимальной энергией - т.н. щелью Халдейна. Такая щель соответствует необычному "скрытому" упорядочению спиновых степеней свободы в цепочке.

Теоретические подходы к описанию кинетики образования и роста кластеров в растворах

Т.В. Тропин¹, В.Л. Аксенов^{2, 1}

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

В современной физике конденсированного состояния большой интерес проявляется к изучению неравновесных процессов. К таким процессам относятся явления образования и роста кластеров. Составными элементами кластеров могут быть частицы в широком диапазоне размеров – от атомов, размером в несколько ангстрем, до макромолекул или коллоидов размерами в сотни нанометров. Скорость образования агрегатов, их структура и свойства часто зависят от широкого набора параметров, включая температуру, концентрации агрегирующих частиц и различных компонент, условия приготовления системы и др. С точки зрения практических применений, крайне актуальной становится задача управления и контроля над процессами образования и роста кластеров. Целью может быть как полное предотвращение их образования, так и получение кластерного состояния с заданными свойствами (например, распределение кластеров по размерам или плотность кластеров). В этой связи, важно развитие теоретических подходов для описания кинетики образования и роста кластеров.

В настоящей лекции рассматривается набор методов, позволяющий описывать исследуемые растворы от микро- до макро уровней. Это методы теории функционала плотности, молекулярной динамики, моделирование методом Монте-Карло, уравнения динамики популяций и неравновесная термодинамика. Последовательно представлены описания основ этих методов в свете применения их к изучаемым системам. В каждом разделе рассмотрены примеры их применения к описанию процессов нуклеации и агрегации частиц. Рассмотрены примеры теоретических работ, результаты которых сочетаются с экспериментами по нейтронному и синхротронному рассеянию. Обсуждаются общие результаты и перспективы методов, а также возможность их эффективного сочетания для описания образования кластеров и их последующего роста. На фоне значительного роста качества результатов в компьютерном моделировании систем на микроскопическом уровне, перспективным представляется развитие подходов, позволяющих определять параметры для кинетических уравнений роста кластеров по результатам вычислений методом молекулярной динамики и теории функционала плотности.

1. M. Elimelech, J. Gregory, X. Jia, R. Williams, Butterworth-Heinemann Ltd., Oxford, 1995.
2. D. Ramkrishna, Academic Press, San Diego, 2000.
3. P. Taboada-Serrano, C.-J. Chin, et. al., *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, **10**, 123, 2005.
4. М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов, Т.В. Тропин, *ЖФХ*, **84** (8), 1405, 2010.
5. E. Pyanzina, S. Kantorovich, et. al., *J. Magn. Magn. Mater.*, **323**, 1263, 2011.
6. V. Talanquer, D.W. Oxtoby, *J. Chem. Phys.*, **113** (16), 7013, 2000.
7. S. Kim, K.S. Lee, et. al., *J. Colloid Interface Sci.*, **344**, 353, 2010.
8. D.B. Warren, D.K. Chalmers, et. al., *Colloids Surf., A*, **280**, 182, 2006.

Молекулярные моторы вращения

С.А. Пикин

Институт кристаллографии им. Шубникова РАН, Москва, Россия

Показано, что необходимыми условиями функционирования молекулярных моторов вращения, к которым могут быть отнесены ферменты F_0F_1 -АТФ синтаза [1], энзимы рестрикции-модификации типа RM I [2] и хеликазы [3], являются хиральность, наличие у сравнительно больших атомных групп оси симметрии C_2 и поляризационных свойств. Энергия, высвобождаемая в ходе каталитических реакций (гидролиза «топливных» молекул АТФ, конформаций субъединиц), используется для вращения роторов энзимов, изгибания и закручивания цепи ДНК, её углового и линейного движения. Эти ферменты имеют общие физические свойства и могут характеризоваться динамическим поведением директора, подобным тому, как это происходит в хиральных полярных смектических C^* жидких кристаллах. Ряд экспериментальных данных может быть объяснен, в том числе количественно, на основе взаимно связанных кинетических процессов, включая биохимические каталитические реакции в определенных субъединицах фермента. Для описания молекулярных моторов вращения предложены системы кинетических уравнений [4-6], содержащих необходимые динамические переменные. Многие наблюдаемые эффекты имеют прямые аналоги с явлениями в физике жидких кристаллов. Приведены примеры таких явлений и проведены оценки материальных параметров энзимов, которые осуществляют транспорт ионов через клеточные мембраны и транслокацию ДНК благодаря движущимся хиральным кинкам.

1. *Boyer P.D.* //Biochimica et Biophysica Acta. 1993. Vol. 1140. P. 215-250.
2. *Seidel R., Van Noort J., Van der Scheer C. et al.* //Nature, Structural & Molecular Biology. 2004. Vol. 11. P. 838.
3. *Enemark E.J., Joshua-Tor L.* //Nature. 2006. Vol. 442. P. 270.
4. *Pikin S., Haase W.* // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 2001. Vol. 119. P. 199.
5. *Пикин С.А.* //Кристаллография. 2008. Т. 53. С. 908.
6. *Пикин С.А.* //Кристаллография. 2009, том 54, № 6, с. 1124–1131.

Джозефсоновские среды: terra (in)cognita

Н.Е. Савицкая

ФГБУ «Петербургский Институт Ядерной Физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

Ровно полвека назад, в 1962 году двадцатидвухлетний аспирант Кембриджского университета Дэвид Брайан Джозефсон теоретически предсказал явление прохождения электронов через тонкий слой диэлектрика, помещенный между двумя сверхпроводниками, а также предположил, что, если к такой системе приложить постоянное напряжение, то через нее будет течь переменный ток с частотой, зависящей только от величины приложенного напряжения. Буквально в течение двух лет после гениального предсказания были осуществлены эксперименты, в которых наблюдались оба этих уникальных явления, получившие название стационарного и нестационарного эффектов Джозефсона. Открытие Джозефсона во многом определило развитие современной физики сверхпроводников и сверхпроводящих промышленных технологий. Моя лекция – это занимательное путешествие в мир, открытый нам Д.Б.Джозефсоном. По дороге вы узнаете:

- что знал Джозефсон до того, как сделал свое предсказание
- в чем состоят и как обнаруживают себя эффекты Джозефсона
- какие объекты называются джозефсоновскими средами и почему они так интересуют ученых и инженеров
- как работает сверхчувствительный измерительный прибор СКВИД и где он применяется
- как и где создаются сверхпроводящие провода, способные нести токи высокой плотности
- какие заманчивые перспективы в применении открытий Джозефсона открываются нам сегодня.

Приглашаю вас последовать за мной в этом путешествии. Вам не будет скучно!

Дифракционные исследования льда

А. Босак

Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

Водяной лед является одной из наиболее подробно изучавшихся систем, но вовсе не является одной из наиболее изученных. На настоящий момент перенумеровано не менее 15 кристаллических фаз льда и выделяют по крайней мере четыре аморфные «фазы», что как бы намекает на сложность исследуемого объекта. Собственно говоря, даже в физике обыкновенного льда Ih имеются белые пятна – например, доподлинно не известна динамика решетки недегидрированного льда. Многие интересные аспекты связаны со «встроенным» протонным беспорядком в неупорядоченных фазах (и в Ih тоже) – как именно он устроен, насколько значимы сопутствующие смещения кислорода и т.д.

В докладе будет представлен обзор иерархии структур льда, рассмотрено влияние беспорядка. Будут обсуждаться динамика льда Ih и беспорядок в нем – и насколько информацию на сей счет можно достоверно экстрагировать из экспериментов по диффузному рентгеновскому рассеянию, диффузному рассеянию нейтронов, неупругому рассеянию и моделированию – *ab initio* и Монте-Карло.

Структура оксидов кремния: порядок и беспорядок

В. Е. Дмитриенко

Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

При нормальных условиях и с повышением давления и температуры оксид кремния SiO_2 демонстрирует такое огромное разнообразие кристаллических, частично упорядоченных и аморфных структур, которое невозможно охватить в небольшом докладе. Поэтому будут в основном представлены те структуры, которые имеют аналоги в структурах льда, H_2O , и/или в тетракоординированных структурах полупроводников, Si, Ge, и т.п. Будут также рассмотрены экзотические структуры, являющиеся кристаллическими аппроксимантами квазикристаллов. Ещё планируется обсудить фазовые переходы по температуре и давлению и возможные сценарии образования беспорядка.

Данная работа и участие в Школе поддержаны Программой фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

Look at the Earth Interiors with X-ray Through Diamond Window

L. Dubrovinsky, N. Dubrovinskaia

Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, Bayreuth, Germany

A major goal in the geosciences is to understand (and predict) how the Earth works, which requires a detailed knowledge of how the mineral phases which make up the Earth behave under high pressure and high temperature conditions. Diamond anvil cell (DAC) technique is the most successful method of pressure generation capable for working in the multimegabar pressure range. However, there are still a number of problems related to high-temperature experiments in DACs. Laser heating techniques cover a wide P-T field: $P > 200$ GPa, $T = 1300$ - 5000 K. A sample preparation for laser-heating experiments is relatively easy and there is practically no risk for the diamonds due to heating. However, so far all existing DAC laser-heating systems are stationary, they are linked either to certain equipment or a beam-line, and do not allow rotating a cell during heating with respect to the incident X-ray beam. Studies of crystal structures require mobility of the laser-heating system. We will discuss novel experimental set-ups for single crystal X-ray diffraction and nuclear inelastic scattering in laser-heated DACs at conditions corresponding to Earth lower mantle and core, and demonstrate applications of the methods on the examples of investigation of spin crossover in silicate perovskite and magnesium-iron oxide phases, as well as in iron carbides.

Синхротрон и нейтроны

А.В. Белушкин

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

В обзоре проведен сравнительный анализ современных возможностей методов рассеяния синхротронного излучения и нейтронов для исследования коллективных возбуждений, атомной и магнитной структуры конденсированных сред, характеристик нанообъектов и для получения изображений макроскопических объектов в синхротронном и нейтронном «свете». Анализируются возможности методов неупругого рассеяния, дифракции, малоуглового рассеяния, рефлектометрии и радиографии-томографии синхротронного излучения и нейтронов. Рассматриваются границы применимости и взаимодополняемость данных методов рассеяния синхротронного излучения и нейтронов в указанных областях исследований.

Современное состояние дифракции нейтронов – и чего нам ждать в скором будущем

А. Лукасов

Лаборатория Леона Бриллюэна, Сакле, Франция

В докладе будет представлен обзор современных методов нейтронной диффракции на монокристаллах. Они основаны в первую очередь на широком использовании позиционно-чувствительных детекторов разного типа; гелиевых, сцинтиляционных и имидж плейт и в применении диффракции на белом пучке, так называемой Лауэ диффракции. Наконец будут даны примеры использования поляризованных нейтронов, которые по прежнему остаются уникальным инструментом для исследования тонкой структуры магнетиков и их свойств в экстремальных условиях сильных магнитных полей и давлений.

Неупругое рассеяние нейтронов – настоящее и будущее

Е.С. Клементьев^{1,2,3}

¹ Институт ядерных исследований РАН, Москва, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, Россия

Неупругое рассеяние нейтронов (НРН) является незаменимой экспериментальной методикой для исследования динамических свойств материалов, важных как для фундаментальной физики, так и для практических приложений. В качестве объектов исследований методом НРН выбираются ключевые системы, для которых необходимо понять механизмы сложных явлений, природу основного состояния, аномалии физических свойств. Высокая эффективность нейтронной спектроскопии тесно связано с той ролью, которую играют квазичастицы в физике конденсированного состояния [1]. Кратко обсуждаются многие типы квазичастиц, которые доступны для исследований при помощи НРН: фононы, магноны, экситоны кристаллического электрического поля, спионы, солитоны, коллективные возбуждения в тяжелофермионных системах, топологические возбуждения и т.д.

Кратко рассмотрен формализм, в рамках которого анализируется когерентное и некогерентное НРН, ядерное и магнитное рассеяние. Обсуждаются фундаментальные физические принципы, понимание и использование которых важно в нейтронной спектроскопии: флуктуационно-диссипационная теорема, принцип детального равновесия, соотношение Камерса-Кронига, правило сумм.

НРН дает доступ к тем корреляционным функциям конденсированных сред, которые недоступны для дифракции. Рассмотрены пространственно-временная корреляционная функция (функция Ван-Хова) и пространственно-энергетическая корреляционная функция. Показаны примеры из практики последних лет, в которых НРН сыграло ключевую роль в решении проблем физики конденсированного состояния и в материаловедении.

В настоящее время в НРН произошла революция, связанная с внедрением техники time-event, требующей очень высокой светосилы и значительной вычислительной мощности. Накопление экспериментальных данных в 4х мерном пространстве ($Q-E$) осуществляется при непрерывном вращении образца в нейтронном пучке с переходом к терабайтным объемам информации. Революцию в TOF спектроскопии произвело также введение в эксплуатацию систем с позиционно-чувствительным детектором площадью до 50 м². Одним из новых подходов, способных существенно повысить эффективность НРН является метод множественных длин волн [2].

Обсуждается конкуренция НРН и бурно развивающихся в последние годы синхротронных методик с энергетическим анализом. Названы области, в которых НРН уступает свои позиции, а также те области, в которых нейтронная методика на многие десятилетия останется неоспоримым лидером.

1. Н.Б. Брандт, В.А. Кульбачинский, Квазичастицы в физике конденсированного состояния, Москва, Физматлит, 2005.

2. M. Russina and F. Mezei, J. Phys.: Conf. Ser. **251** 012079 (2010).

Рефлектометрия поляризованных нейтронов – настоящее и будущее

Б.П. Топерверг,

ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

В последние два десятилетия методы нейтронной рефлектометрии (NR) и, в частности, рефлектометрии поляризованных нейтронов (PNR) получили значительное развитие практически во всех нейтронных лабораториях. Это развитие вызвано резко возросшим интересом, как к фундаментальным проблемами контакта между различными материалами, в том числе биологическими, так и к свойствам разнообразных нано-материалов, перспективных для применения в электронике и вычислительной технике. В настоящее время наблюдается быстрый рост числа инструментов, позволяющих проводить исследования в упомянутых областях. Параллельно идет интенсивный поиск новых областей применения NR и PNR, дальнейшее совершенствование экспериментальной техники, разработка теоретических основ и методов описания данных. Так в результате повсеместного использования позиционно чувствительных детекторов стала доступной не только информация о распределении материалов и профиле намагниченности в направлении перпендикулярном поверхности многослойных структур, но и о деталях этих структур в латеральном направлении. В результате, теоретический анализ эволюции интенсивности зеркального отражения и незеркального рассеяния при изменении угла падения нейтронов обеспечивает доступ к двум измерениям. Все три пространственных измерения становятся доступными в экспериментах по, так называемому, малоугловому рассеянию при малых углах скольжения (GiSANS). Наконец как следующий этап развития метода и его применений к, в том числе, изучению кинетики и динамики нано-систем рассматривается внедрение временного анализа отраженного и рассеянного сигнала.

Перспективы такого рода исследований будут обсуждены после изложения принципов и основных результатов традиционной рефлектометрии, включая GISANS. В частности, планируется обсудить возможности использования Ларморовской псевдо-прецессии отраженного пучка для модуляции его поляризации и интенсивности. Такая модуляция во времени и пространстве может быть применена в спин-эхо спектрометрах неупругого рассеяния при малых углах скольжения.

Метод модифицированных базисных функций в малоугловом рассеянии с вариацией контраста на полидисперсных неоднородных наночастицах

М.В. Авдеев

*Лаборатория нейтронной физики им. И.М.Франка,
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Структурное описание современных высокодисперсных наносистем требует развития классических подходов при проведении экспериментов и интерпретации кривых малоуглового рассеяния тепловых нейтронов и рентгеновских лучей. В настоящей лекции рассматриваются возможности использования вариации контраста в экспериментах по малоугловому рассеянию на системах с полидисперсными неоднородными наночастицами, где до недавнего времени основной решаемой задачей являлось восстановление функции распределения по размерам частиц в однородном приближении.

В частности, автором предложено обобщение классического метода базисных функций [1] при вариации контраста за счет изменения плотности длины рассеяния растворителя на случай полидисперсных неоднородных, в том числе магнитных, наночастиц. Новый метод модифицированных базисных функций [2,3] использует понятие модифицированного контраста и позволяет аналогичным образом построить зависимости инвариантов рассеяния (параметры Гинье, интеграл Порода) от контраста, которые имеют принципиальные отличия от таковых в случае монодисперсных неоднородных частиц. Рассматриваются отдельно различные комбинации полидисперсности и неоднородности, в том числе упрощенные случаи двухкомпонентных частиц и структурной полидисперсности. Обсуждается понятие эффективной точки компенсации и вопросы ее экспериментального нахождения для различных типов кривых рассеяния. Как результат, наряду с корректным определением функции полидисперсности метод дает возможность анализа ряда дополнительных интегральных характеристик, позволяющих судить о внутренней структуре частиц. Применение метода демонстрируется для малоуглового рассеяния нейтронов на различных неоднородных коллоидных частицах, включая комплексные магнитные частицы и их агрегаты в феррожидкостях [3-6], мицеллы в смешанных системах [7], нанокристаллиты алмаза с диффузной поверхностью [8,9] и др.

Следует отметить, что в последние годы можно видеть формирование определенной тенденции к активному изучению сложных и смешанных систем, которые характеризуются большой полидисперсностью неоднородных наночастиц и где под полидисперсностью можно понимать не только различия по размерам или внутренней структуре частиц одного типа, но и, в более широком смысле, набор разных видов частиц. В этой связи подход, представляемый в лекции, позволяет ответить на более широкий вопрос, какого рода информацию можно извлечь в принципе из малоуглового эксперимента в общем случае сложной смешанной системы.

5. H. B. Stuhrmann, In 'Modern aspects of small-angle scattering', Ed. H. Brumberger, Dordrecht: Kluwer Acad. Publishers, 1995, p. 221.
6. M. V. Avdeev, J. Appl. Cryst. **40**, 56 (2007).
7. М. В. Авдеев, В. Л. Аксенов, УФН **180**, 1009 (2010).
8. M. V. Avdeev, E. Dubois, G. Mériguet, et al., J. Appl. Cryst. **42**, 1009 (2009).
9. M. V. Avdeev, B. Mucha, K. Lamszus, et al., Langmuir **26**, 8503 (2010).
10. M. V. Avdeev, A. V. Feoktystov, P. Kopcansky, et al., J. Appl. Cryst. **43**, 959 (2010).
11. V. I. Petrenko, M. V. Avdeev, V. M. Garamus, et al., Coll. Surf. A **369**, 160 (2010).
12. M. V. Avdeev, V. L. Aksenov, L. Rosta, Diamond Related Mater. **16**, 2050 (2007).
13. M. V. Avdeev, N. N. Rozhkova, V. L. Aksenov, et al., J. Phys. Chem. C **113**, 9473 (2009).

Динамическая дифракция нейтронов в совершенных кристаллах

В.В. Воронин

ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

В докладе будут изложены основы динамической дифракции нейтронов в совершенных кристаллах. Отдельное внимание будет уделено особенностям дифракции в кристаллах без центра симметрии, а также при углах Брэгга близких к 90^0 .

Будет рассказано о некоторых возможностях использования эффектов, возникающих при таких условиях, для исследования свойств нейтрона как элементарной частицы.

В частности, поиска электрического дипольного момента нейтрона с использованием дифракции в нецентросимметричном кристалле. А также, исследования гравитационного взаимодействия нейтрона с окружающей материей с использованием дифракции по Лауэ при углах Брэгга, близких к 90^0 .

Секция «Квантовые и магнитные явления»

Многоспиновая запутанность в фермионной системе

М. Р. Арифуллин, В.Л. Бердинский

Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия

Происхождение запутанности в реальных физических системах интересны как для квантовой информатики и вычислительной техники, так и для фундаментальной физики. Другой важной проблемой является иерархия запутывания подсистем сложных объектов. Есть два возможных источника запутанности в многоспиновых подсистемах фермионов. Первый - обменное взаимодействие между спинами электронов в магнитных упорядоченных материалах. Однако если фермионы находятся в той же области пространства и их волновые функции перекрываются, то спиновая запутанность, определяется принципом Паули. Спиновые состояния фермионов должны описываться только спиновой матрицей плотности. Свойства таких спиновых матриц плотности следуют из антисимметрии многоэлектронной волновой функции $|\Psi\rangle$. Для определения спиновой матрицы плотности ρ^S берется след матрицы плотности $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ по пространственным переменным. Например, для 4-фермионной системы спиновую матрицу плотности можно представить в виде суммы неортогональных проекторов

$$\rho = \frac{1}{3} \{ |S_{12}S_{34}\rangle\langle S_{12}S_{34}| + |S_{13}S_{24}\rangle\langle S_{13}S_{24}| + |S_{14}S_{23}\rangle\langle S_{14}S_{23}| \}$$

где $|S_{ij}\rangle = 2^{-1/2} |\alpha_i\beta_j - \beta_i\alpha_j\rangle$

В ортогональном базисе матрица плотности ρ пропорциональна единичной матрице размерности 2. В соответствии с критерием Переса-Городецкого [1] были рассчитаны собственные значения 4-спиновой матрицы после частичного транспонирования. Некоторые из них оказались отрицательными, и этот факт доказывает спиновую запутанность в 4-спиновой системе. Аналогичные расчеты показывают, что 3 - спиновая подсистема тоже запутана. Однако двухспиновая подсистема многоспиновой системы не запутана. Эта запутанность в многоспиновых системах определяется квантовой неразличимостью фермионов.

Исследованы запутанность и спиновые корреляции в 4-спиновой антиферромагнитной системе. Доказано, что принцип Паули и отрицательное обменное взаимодействие приводит к различным свойствам запутанности в 4-спиновой системе, а также в 3 - и 2-спиновых подсистемах. Показано, что критерий Переса-Городецкого эквивалентен нарушению неотрицательности для частично транспонированной матрицы ρ^T . Таким образом, критерий Сильвестра для матрицы ρ^T может быть использован как простой качественный тест на запутанность. Неотрицательность ρ^T означает, что частичное транспонирование не может быть реализовано как физический эксперимент.

Если многофермионная система характеризуется суммарным спином S , то можно использовать еще один тест. Если частичное транспонирование ρ сопровождается появлением новых состояний с $S_z > S$, то ρ^T будет иметь отрицательные собственные значения, следовательно, такое начальное квантовое состояние запутано.

1. Peres A. Separability Criterion for Density Matrices. // Phys. Rev. Lett. 77 — 1996, P. 3264

Компьютерное моделирование процессов намагничивания аморфных сплавов системы Re-Tb

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

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфных сплавов аморфных сплавов $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ ($x = 5, 10, 13, 15, 20, 29, 49, 59$ и 91 ат. %). Межатомное взаимодействие описывалось эмпирическим полиномиальным потенциалом. Модель каждого состава содержала по $100\ 000$ атомов. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга были исследованы магнитные свойства построенных моделей. 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. Константа анизотропии линейно увеличивается с ростом концентрации атомов Tb.

Во всех моделях при понижении температуры наблюдается переход из парамагнитного состояния в состояние спинового стекла, кроме сплавов с содержанием тербия $x = 5$ и 10 ат. %, которые при всех температурах вплоть до $T = 1$ К остаются в парамагнитной фазе.

Было исследовано поведение моделей при приложении внешнего магнитного поля при температуре $T = 1$ К. Намагниченность не достигает насыщения даже в очень больших полях (до 1000 кЭ), что является характерной чертой магнетиков с большой случайной анизотропией. Аналогичные зависимости были рассчитаны при температурах $T = 100$ и 300 К. С ростом температуры намагниченность монотонно уменьшается.

Также были рассчитаны петли гистерезиса при температуре $T = 1$ К. На основе полученных петель гистерезиса построены концентрационные зависимости коэрцитивного поля и остаточной намагниченности. При увеличении концентрации атомов Tb коэрцитивное поле линейно увеличивается. Остаточная намагниченность монотонно увеличивается с ростом концентрации атомов Tb.

Рассчитаны температурные зависимости намагниченности, полученные при нагревании моделей аморфных сплавов $\text{Re}_{100-x}\text{Tb}_x$ ($x = 20, 29, 49, 59, 91$ ат. %) в присутствии внешнего магнитного поля $H = 300$ Э после охлаждения в поле (FC) и без поля (ZFC). Имеет место необратимость намагниченности (расхождение кривых FC и ZFC), свидетельствующая о наличии в системе спин-стекловых свойств. Температуры, при которых расходятся кривые FC и ZFC, совпадают с температурами магнитного фазового перехода в состояние спинового стекла T_f , определяемыми по положению пиков на температурной зависимости восприимчивости $\chi(T)$.

Результаты, приведенные в данной работе, качественно совпадают с экспериментальными результатами, полученными для аморфных сплавов на основе редкоземельных металлов.

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

Спин-орбитальное взаимодействие в спиральной квантовой проволоке

А. А. Григорькин¹

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

Одной из важных задач современной физики наноструктур является разработка методов эффективного управления спином электронов. В практических приложениях управление спином при помощи локальных магнитных полей оказалось неэффективным из-за сложностей технического характера и по причине недостаточной скорости поворота спина. В связи с этим в последние годы большое внимание привлекают полупроводниковые структуры с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Спин-орбитальное взаимодействие смешивает спиновые и орбитальные степени свободы электрона. Это позволяет управлять спиновой поляризацией, действуя электрическим полем на орбитальную часть волновой функции. Особый интерес в этом плане представляют квазиодномерные полупроводниковые квантовые проволоки благодаря большим временам релаксации электронного спина в них [1].

В данной работе рассмотрена одномерная спиральная проволока, спин-орбитальное взаимодействие в которой взято в форме Рашбы. В эксперименте [2] показано, что на основе спиральных немагнитных структур возможно создание эффективных спиновых фильтров.

Спектр проволоки состоит из двух спиново-расщепленных подзон и обладает сильной зависимостью от величины периода спирали. Это открывает возможность изменять спиновую поляризацию тока, проходящего через проволоку, при помощи механического воздействия на спираль – например, изменяя ее период.

Собственные состояния гамильтониана такой системы соответствуют осциллирующему в пространстве спину. В отличие от прямой проволоки, электронная энергия в спирали зависит от знака константы спин-орбитального взаимодействия.

Произведен расчет туннелирования электрона через спираль конечной длины с присоединенными к ней одномерными проводниками. Найдены явные значения коэффициентов отражения и прохождения электрона через спираль с переворотом спина и без переворота. Эти коэффициенты осциллируют как функции энергии электрона и длины спирали и обладают сильной зависимостью от направления спина электрона и геометрических характеристик спиральной проволоки.

1. Y. Kunihashi, M. Kohda, J. Nitta. Phys. Rev. Lett. **102**, 226601 (2009).
2. B.Göhler et al., Science. **331**, 894 (2011)

Квантовый и классический расчет области пространственного заряда в полупроводниковых пленках

И. С. Дубицкий¹, А. М. Яфясов¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Работа посвящена расчету хода потенциала в тонких полупроводниковых пленках.

Для пленок, толщина которых превышает длину волны Де Бройля в данном материале, возможно применение феноменологической теории области пространственного заряда (ОПЗ). В рамках этой теории решается нелинейное уравнение Пуассона для нахождения хода потенциала в кристалле. Затем можно найти заряд ОПЗ и, например, построить вольт-фарадную характеристику образца. Сравнив ее с экспериментальными данными, можно сделать вывод о применимости той или иной модели ОПЗ к данному материалу.

Однако при уменьшении толщины пленки становятся заметны эффекты, связанные с размерным квантованием энергии носителей заряда. В этом случае необходимо решить уравнение Шредингера для нахождения спектра носителей заряда, а затем рассчитать потенциал в пленке с использованием данного спектра. Основная трудность здесь состоит в том, что решение уравнение Шредингера также зависит от вышеупомянутого потенциала. Таким образом, необходимо организовать самосогласованную процедуру совместного решения уравнений Шредингера и Пуассона.

Одна из возможных схем представлена в данной работе. Она применима для расчета ОПЗ полупроводников с параболическим законом дисперсии в двухзонном приближении. В качестве примера мы исследовали границы применимости классического приближения в тонких германиевых пленках путем сравнения результатов с результатами самосогласованного расчета. Также проведено сопоставление ВФХ образцов, полученных с помощью феноменологической теории и самосогласованного расчета.

Кроме того, был исследован процесс «просачивания» волновой функции под потенциальный барьер, важный для изучения и моделирования гетероструктур.

1. И. С. Дубицкий, А. М. Яфясов, Расчет вольт-фарадных характеристик тонких пленок полупроводников, Тринадцатая всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектроники, Санкт-Петербург, тезисы докладов, с.9

Интерференция одиночных УХ-нейтронов и (не)делимость (топологических) квантов

И. Л. Жогин

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

Может ли дискретность квантового описания быть связана с топологическими причинами – топологическими (квази-) зарядами? И если да, то как это можно проверить? Топологический заряд неделим. Если «половинки» кванта, следующие по двум плечам интерферометра, разделять *на лету* непроницаемым барьером, то заряд должен оказываться в одном из горбов пси-функции (другой гаснет в «нулевых колебаниях»). При этом интерференция *одиночных квантов* должна исчезать. (Волновая функция между горбами спадает довольно медленно, $\sim \lambda/l$, что недостаточно для полного разделения, см. ниже.)

Для эксперимента такого рода, позволяющего задать новый вопрос Природе, можно было бы использовать ИК-фотоны, но тогда требуются очень быстрые затворы (набор ячеек Поккельса?) и километровые оптоволоконные плечи. Использование ультрахолодных монохроматических нейтронов – благодаря небольшой скорости нейтронов, масштаба м/с, и большим успехам, достигнутым в этой области – может оказаться предпочтительным.

Примером теории с топологическими зарядами является теория абсолютного параллелизма (АП). В рамках АП, где объединяются симметрии ОТО и СТО, существует единственное уравнение (совместная общековариантная система уравнений второго порядка поля реперов h^a_μ), в решениях которого не возникают сингулярности [1] (совместность не распространяется на случаи вырождения (ко)репера). Размерность пространства-времени, $D=5$, также нельзя изменить (правда, «ошибка» невелика). Интересно заметить, что, например, среди нелинейных уравнений типа газовой динамики варианты, свободные от градиентной катастрофы, обнаружены только для размерности $D=1+1$.

Эта $5D$ -система нелагранжева, но можно указать «частичный лагранжиан» (в нем «активна» только *часть* поляризации – из 15-ти), квадратичный по уравнениям («тривиальный», но не сводящийся к поверхностным членам), и приводящий к уравнению 4-го порядка, типа тензор-Риччи-квадрат-гравитации с тензором энергии-импульса ЭМ-вида (но псевдо-тензор ЭИ – тривиален!). Среди разнообразия поляризационных степеней свободы самые удивительные это линейно-неустойчивые (и «невесомые», «эфмерные» – не дающие вклад в энергию-импульс) поляризации, растущие как в резонансе под действием «весомых» поляризации. Это означает, что рано или поздно в решениях (общего положения) этой теории должны возникать сильные нелинейные явления (хотя они могут выглядеть несколько эфмерно). Существует также («невесомая») продольная поляризация (связанная с тензором Риччи), а с ней и O_4 -симметричные решения типа одиночной продольной волны, бегущей по радиусу. Такое решение может служить как космологический волновод (анти-Милн космология) для ансамбля «весомых» волн, где особенно велики «растущие» волны и нелинейные эфффекты, а феноменология «топологических квантов» – конфигураций поля, несущих топологический заряд и/или квази-заряд (для симметричных конфигураций) – может иметь вид квантовой теории поля (КТП). Принцип суперпозиции наиболее загадочен из короткого списка принципов, определяющих, наряду с самим фактом существования неразличимых квантов, математику КТП. Здесь он может быть связан с большой протяженностью кванта по добавочному (радиальному) измерению, см. [1].

По-видимому, данная теория позволяет также качественно понять ряд необычных эфффектов, указывающих на возможную связь гравитации и электромагнетизма [2]. Впрочем,

предлагаемый здесь эксперимент с интерференцией одиночных ультрахолодных нейтронов интересен и сам по себе, безотносительно к той или иной теории.

1. L. Zhogin, Old and new research on the Absolute Parallelism theory. Lambert Academic Publishing: 2010, ISBN 978-3-8383-8876-2; arXiv:gr-qc/0412130v2 (see also arXiv:gr-qc/0610076, arXiv:1109.1679).
2. В. П. Десямуре, <http://n-t.ru/tp/ns/au.htm> (эффекты Брауна, Серла, Рощина-Година).

Динамическая намагниченность и ферромагнитный резонанс в хиральных молекулярных магнетиках

О.В. Коплак^{1,2}

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

²Научно-образовательный центр «Физико-химическое материаловедение» Киевского национального университета им.Т.Г.Шевченко и НАН Украины, Киев, Украина

В кристаллах без центра инверсии антисимметричное взаимодействие Дзялошинского –Мория является фактором, вызывающим хиральное распределение спиновой плотности (геликоидальный, спиральный, и другие сложные виды магнитного порядка). Статические свойства таких систем хорошо изучены методами нейтронографии[1], позволившими объяснить ряд фундаментальных закономерностей намагничивания хиральных магнетиков (преимущественно неорганических сплавов FeSiCo, FeMn и др.).

Наша работа отличается двумя обстоятельствами: 1) предметом исследования являются металлоорганические кристаллы – продукты химического синтеза и структурного дизайна, выращенные и структурно-аттестованные в лаборатории проф. K.Inoue (Japan)[2], 2) работа посвящена исследованию закономерностей динамического намагничивания кристаллов в низкочастотных (0.1-1000 Гц) и сверхвысокочастотных (10 ГГц) магнитных полях.

Обнаружены следующие физические процессы, отличающие магнито-хиральные кристаллы от рацемических (с чередующимися «левыми» и «правыми» элементами структуры):

- в сверхвысокочастотном поле имеется пороговое значение мощности, выше которого наблюдается нелинейный ферромагнитный резонанс [3] и солитонно-подобные возбуждения [4], предсказанные теоретически [5],
- в низкочастотных магнитных полях в хиральных кристаллах расширяется температурный диапазон существования режима движения доменных стенок (ползучести) [6].

Полученные экспериментальные результаты свидетельствуют о влиянии спин-орбитального взаимодействия на динамику генерации и движения нелинейных формирований (солитонов и доменных стенок). В частности о влиянии кристаллического рельефа (рельефа Пайерлса) на режимы движения нелинейных магнитных возбуждений. Эта особенность является фундаментальным свойством молекулярных магнетиков, отличающим их от традиционно исследуемых магнитных сплавов.

Автор признателен проф. K.Inoue (Japan), проф. M.Farle (Germany), а также своим соавторам (Мушенку Ф.Б. и Моргунову Р.Б.) за обсуждение полученных результатов и интерес к работе.

1. Ю.А.Изюмов, Успехи физических наук, **144**, 439(1984).
2. J. Kishine, K. Inoue, Y. Yoshida, Prog. Theor. Phys., 159, 82(2005).
3. R.B.Morgunov, F.V.Mushenok, O.L.Kazakova, Phys. Rev. B, **82**, p.134439 (2010).
4. R.Morgunov, M.V.Kirman, K.Inoue et al., Physical Review B, **77**, 184419(2008).
5. J. Kishine, A.S. Ovchinnikov, Phys. Rev. B, , **79**, 220405(2009).
6. F. Mushenok, O. Koplak and R. Morgunov, Eur. Phys. J. B, **84**, 219 (2011).

Влияние фрустраций на магнитокалорический эффект в 1D магнетиках

М.В. Медведев¹, Ф.А. Кассан-Оглы²

¹ *Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

Магнитокалорический эффект (МКЭ) был открыт Варбургом в 1881 году. Величина его пропорциональна температуре и производной от энтропии по полю, и обратно пропорциональна теплоемкости[1]: $\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S = -\frac{T}{C}\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T$. Изучение МКЭ, наблюдающегося

во всех магнитных материалах под действием магнитного поля, является актуальной задачей физики конденсированных сред. Во-первых, исследования магнитокалорических свойств материалов обычно происходит в комплексе с исследованиями других его свойств, что позволяет получить сведения о взаимосвязи магнитных упругих и тепловых характеристик. Во-вторых, наибольших значений величина магнитокалорического эффекта может достигать очень больших значений, что может быть использовано для достижения сверхнизких температур при адиабатическом размагничивании.

В данной работе мы исследовали МКЭ в разных моделях: Изинга, Гайзенберга и XY-модели в 1D парамагнетиках, ферромагнетиках и антиферромагнетиках на основе точных аналитических решений и анализа фрустраций в магнитном поле [2,3].

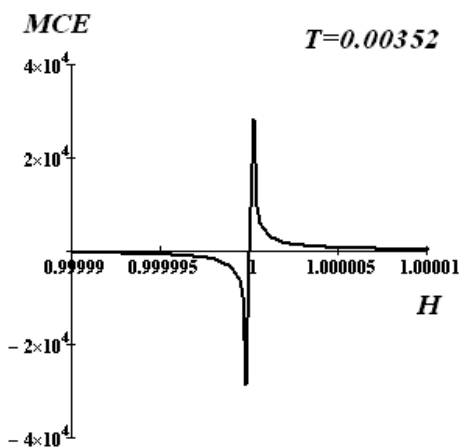


Рис.1. Гигантский МКЭ вблизи фрустрирующего поля. XY-модель.

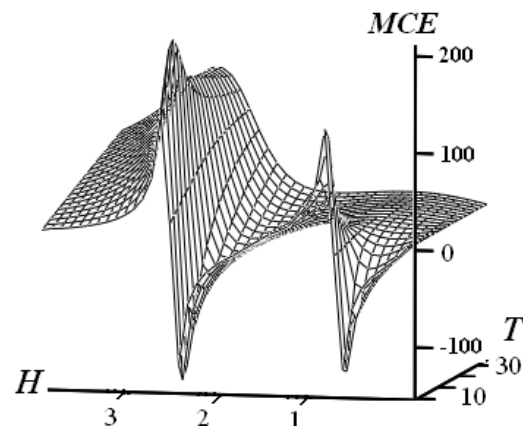


Рис.2. МКЭ в магнетике с двумя фрустрирующими полями. Модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями.

В парамагнетиках и ферромагнетиках МКЭ положителен, а в антиферромагнетиках МКЭ отрицателен в поле, меньшем фрустрирующего, а в поле, большем фрустрирующего, положителен. Максимального значения МКЭ может достигать при низких температурах в магнетиках с фрустрациями, причем величина его тем больше, чем ближе величина внешнего магнитного поле к фрустрирующему полю (Рис.1). В более сложных моделях с учетом, в частности, взаимодействия между вторыми соседями фрустрирующих полей может быть несколько, и тогда МКЭ испытывает гигантский рост вблизи каждого фрустрирующего поля (Рис.2).

Работа поддержана проектом УрО РАН, № 12-И-2-2020.

1. M. E. Zhitomirsky and A. Honecker, *Journal of Stat. Mech.: Theory and Experiment*, №7, p. P07011. (2004).
2. F.A. Kassan-Ogly, *Phase Transitions*, v.74, p. 353, (2001).
3. F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev, *ЖМММ*, (in print), (2012).

Одно из решений проблемы поправки на двойной учёт в LDA+DMFT

Н. С. Павлов¹, И. А. Некрасов¹, М. В. Садовский¹

¹ *Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

В сегодняшней физике твёрдого тела активно исследуются системы с сильными электрон-электронными корреляциями, благодаря которым в таких системах как высокотемпературные сверхпроводники, широкощелевые диэлектрики и т.д. наблюдаются интересные физические явления. Для описания свойств систем с сильными электронными корреляциями часто используют модель Хаббарда. Данная модель хорошо решается в рамках теории динамического среднего поля DMFT [1]. Для описания реальных соединений широко применяется объединение DMFT с зонными методами в приближении локальной электронной плотности LDA, получившее название LDA+DMFT [2]. Существенной особенностью LDA+DMFT подхода является внутренний параметр, возникающий из-за частичного учёта Хаббардовского взаимодействия в виде Хартри вклада, а так же наличия приближения обменно-корреляционной энергией однородного электронного газа в LDA и с другой стороны полного учёта данных вкладов в DMFT. Из-за чего возникает проблема двойного учёта некоторой части кулоновского взаимодействия при реализации DMFT с параметрами, полученными из LDA [3].

В данной работе предложен способ реализации LDA+DMFT, в котором в LDA расчёте исключается вклад обменно-корреляционной энергии для сильно-коррелированных состояний, а затем в LDA+DMFT поправка на двойной учёт берется в виде Хартри. Тем самым в зонной части для электронов с сильными корреляциями реализуется расчёт в приближении Хартри-Фока. Для проверки предложенного способа расчёта был выбран прототип Мотт-Хаббардовского диэлектрика NiO (щель 4 эВ). Величина Хаббардовского взаимодействия на 3d орбитали никеля составляет 8 эВ. Для данных состояний был исключён счёт обменно-корреляционной энергии в LDA расчёте.

Результаты модифицированного LDA расчёта для NiO показали, что энергетические дисперсии существенно не изменяются (интегралы перескока остаются прежними), при этом происходит сдвиг всех Ni(3d) состояний дальше от O(2p) состояниям. Данный сдвиг порядка одного электрон вольта, что является характерной величиной для обменно-корреляционной энергии в LDA расчётах. Были проведены LDA+DMFT расчёта для различных параметров из обычного LDA расчёта (рис.1 слева) и модифицированного LDA расчёта (рис.1 справа). Они выявили, что в первом случае необходимо подбирать поправку на двойной учёт, а во втором случае сразу получается верное фазовое состояние.

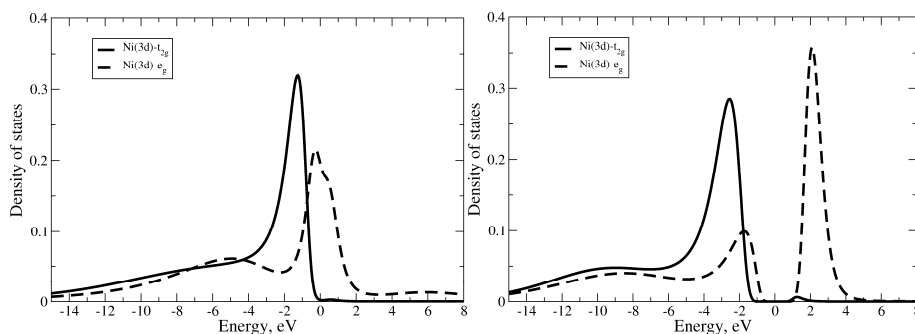


Рис.1. Сравнение плотности состояний обычного LDA+DMFT расчёта (слева) и модифицированного LDA+DMFT расчёта (справа).

1. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 1, 13 (1996).
2. K. Held, et al., Psi-k Newslatters **56**, 65 (2003).
3. M. Karolak, et al. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **181**, 1, 11 (2010).

Точное решение 1D стандартной 4-х вершинной модели Поттса с взаимодействием ближайших и вторых соседей в магнитном поле

А.И.Прошкин, Ф.А. Кассан-Оглы, А.В. Зарубин

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В последнее время в связи с прогрессом в развитии магнитной нейтронографии возрос интерес к мульти-к структурам в монокристаллах и монопниктидах актиноидов. Так, например, в работе Нормила и др. [1] было показано, что расшифровка нейтронограммы от кристалла USb в модели 3-к структуры (Рис.1.а) дает значительно лучший результат, чем в модели коллинеарной структуры (Рис.1.б). Расположение всех

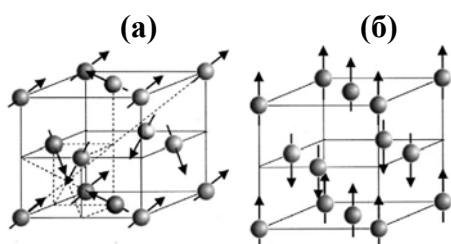


Рис.1. Расшифровка структуры USb в модели 3-к (а) и в модели коллинеарной структуры (б).

возможных направлений магнитных моментов в точности соответствует 4-х вершинной стандартной модели Поттса [2]. Поэтому для описания магнитных и других физических свойств кристалла USb следует применять именно эту модель. Данная работа продолжает исследование 4-х вершинной стандартной модели Поттса в магнитном поле, учитывая теперь помимо обменного взаимодействия между ближайшими соседями [3] еще и взаимодействие между вторыми соседями. Исследовано поведение намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости и магнетокалорического эффекта как

функций температуры и внешнего магнитного поля. В зависимости от знаков и величин обменных взаимодействий, а также величины и направления магнитного поля в таком

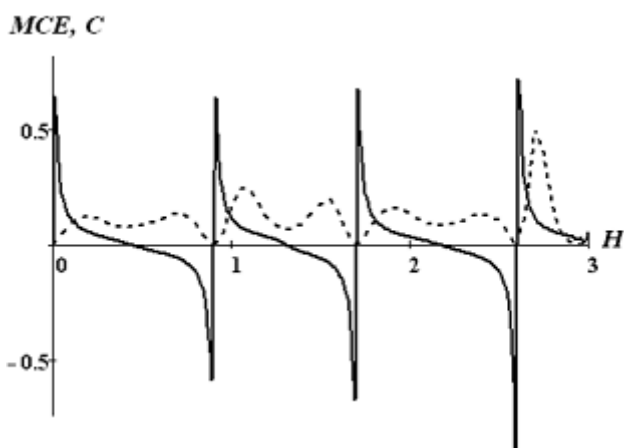


Рис.2. МКЭ и теплоемкость в 4-х вершинной модели Поттса. $J=-1, J'=-0.3$.

магнетике могут существовать от одного до трех фрустрирующих полей, в которых при $T \rightarrow 0$ энтропия стремится к ненулевым величинам, намагниченность испытывает скачки, магнитная восприимчивость имеет сужающиеся максимумы, а магнитная теплоемкость — сужающиеся минимумы.

Определены величины всех фрустрирующих полей и всех плато в намагниченности в зависимости от величин и знаков обменных взаимодействий, а также величины и направления магнитного поля. Магнетокалорический эффект может иметь от одной до трех особенностей, подобных только одной, соответствующей коллинеарной структуре в модели Изинга

или Гайзенберга. На Рис.2 изображена зависимость магнетокалорического эффекта и магнитной теплоемкости от магнитного поля при низкой температуре. Особенности магнетокалорического эффекта в точности соответствуют минимумам теплоемкости, то есть, фрустрирующим полям.

Работа поддержана Проектом Президиума РАН, № 12-П-2-1041.

1. P. S. Normile, W. G. Stirling et al., *Phys.Rev B*66, 014405 (2002).
2. R.B. Potts, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, v.48, p. 106, (1952).
3. F.A. Kassan-Ogly, *Phase Transitions*, v.72, p. 223, (2000).

Superconductivity and magnetism: a new superconductor EuRh_4B_4 with local magnetic moments inside

A. Smekhova^{1,3}, L.N. Fomicheva², A.V. Tsvyashchenko², V.A. Sidorov², A. Rogalev³

¹ *M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

² *L.F.Vereshchagin Institute for High Pressure Physics RAS, Troitsk, Russia*

³ *European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

The coexistence of ferromagnetism and superconductivity (SC) belongs to the one of the most exciting phenomena in solid state physics. For the first time the question of coexistence of SC and the ferromagnetic order was raised by V.L.Ginzburg in his pioneering work in 1957 [1] and continued later by Anderson and Suhl in 1959 [2]. Since that time significant efforts have been concentrated on synthesis of new materials that are being superconductors possess ferro- or ferrimagnetic order.

In the present work new ternary boride system EuRh_4B_4 was synthesized under uncommon high pressure – temperature conditions for the first time. The system reveals the ferromagnetic phase behavior below 83 K and the superconducting state below 5.8 K that have been confirmed by macroscopic ac-susceptibility and electrical-resistivity methods.

To check the possible valence states transition of Eu atoms that could be stimulated in the EuRh_4B_4 by high external pressure, the magnetic character of Eu ions and a possible induced magnetism of rhodium atoms, element-selective XANES and XMCD measurements have been performed at the ID12 beamline at the ESRF [3].

XANES and XMCD spectra recorded at the Eu $L_{2,3}$ absorption edges at low temperatures indicate the presence of two different types of Eu ions in the synthesized sample: the strongly magnetic Eu^{2+} ions with a paramagnetic behavior and the non-magnetic Eu^{3+} one (see Fig. 1). The strong XMCD signal clearly indicates the large local magnetic moment at Eu^{2+} ions in the sample. XMCD signal at the Rh L_2 absorption edge demonstrates a weak induced magnetism of rhodium atoms. Thus, the EuRh_4B_4 compound synthesized under high pressure and temperature exhibits a transition to the superconducting phase despite the presence of slightly polarized rhodium atoms and rather strong local magnetic moment of Eu^{2+} ions.

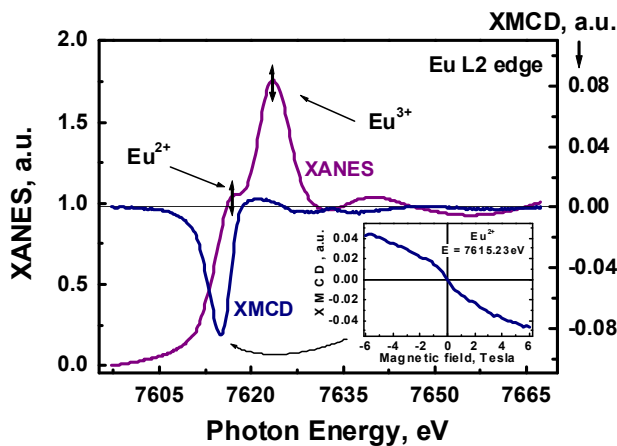


Fig. 1. Normalized XANES (left scale) and XMCD (right scale) spectra at the Eu L_2 absorption edge measured for EuRh_4B_4 at 12K and 6 Tesla. The inset: magnetization curve of the EuRh_4B_4 sample measured by XMCD at the Eu L_2 absorption edge for the energy corresponded to the Eu^{2+} state

This work was supported in part by the RFBR (grant 11-02-00029); measurements at the European Synchrotron Radiation Facility have been performed within the project HE-3019

1. V.L. Ginzburg, Sov. Phys. JETP **4**, 153 (1957).
2. P.W. Anderson, H. Suhl, Phys. Rev. **116**, 898 (1959).
3. J. Goulon, N.B. Brookes, C. Gauthier, *et al.*, Physica B **208&209**, 199 (1995);
4. J. Goulon, A. Rogalev, C. Gauthier, *et al.*, J. Synchrotron Rad. **5**, 232 (1998).

Спиновая киральность в геликоидальной структуре многослойной системы Ho/Y

В. В. Тарнавич¹, D. Lott², С.В. Григорьев¹

¹⁾ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

²⁾ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Феномен киральности привлекает к себе большое внимание в широкой области научных дисциплин. В физике подобное явление имеет место в геликоидальных спиновых структурах некоторых кристаллов. Право- и левосторонние геликоиды (спирали) энергетически эквивалентны в кристаллах, имеющих кристаллографические центры инверсии. Отсутствие центра симметрии создаёт дополнительное к гейзенберговскому взаимодействию между спинами, называемое антисимметричным взаимодействием Дзялошинского-Мория (Д-М) и, как результат, приводит к преобладанию одного типа спиралей над другим (к ненулевой киральности). Однако в материалах с наличием кристаллографического центра инверсии право и левосторонние спирали энергетически эквивалентны. Подобное киральное вырождение происходит в редкоземельных элементах Ho и Dy, которые являются планарными магнетиками со спиральной структурой. Подобное вырождение может быть снято приложением внешней силы, такой как электрическое поле, деформация кручения и т.д.

Целью настоящей работы явилось исследование магнитной спиральной структуры Ho/Y с помощью рассеяния поляризованных нейтронов. В данном случае Y можно рассматривать как немагнитный аналог Ho. Образец представляет собой последовательность слоёв $[\text{Ho}_{4.2 \text{ nm}}/\text{Y}_{3.0 \text{ nm}}]_{25}$, выращенных как монокристалл методом молекулярно-пучковой эпитаксии вдоль оси с [001] гексагональной структуры Ho и Y.

Эксперименты проводились с использованием рефлектометра поляризованных нейтронов MARIA (реактор FRM-2, JCMS). Для формирования магнитной спиральной структуры с неодинаковой заселенностью левых и правых спиральных доменов образец охлаждался в поле до температур T ниже T_N . Среднее значение киральности, пропорциональное разности числа левых и правых спиралей, измеряли как поляризационно-зависимую часть магнитного рассеяния нейтронов согласно формуле $\gamma = (I^+ - I^-) / (I^+ + I^-)$, где $I^{+/-}$ - интегральные интенсивности соответственно для поляризации нейтронов, направленной по или против ведущего магнитного поля. На рисунках 1 (a,b) представлены температурные и полевые зависимости параметра киральности: (a) зависимость γ от температуры при заданном значении поля (1 Т), приложенного при охлаждении, (b) зависимость γ от поля охлаждения при $T = 30 \text{ K}$.

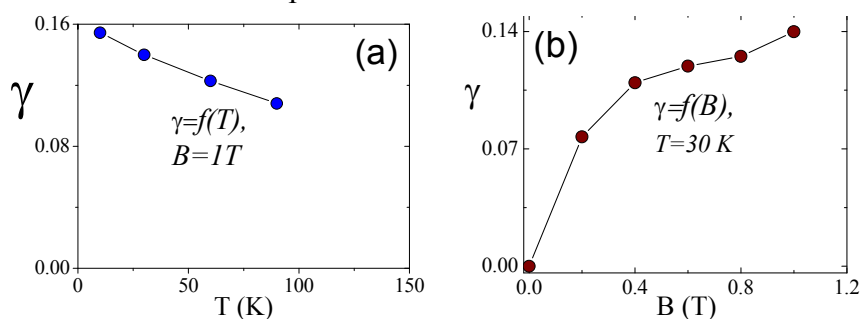


Рис.1 (a,b) Параметр киральности γ в многослойной системе $[\text{Ho}_{4.2 \text{ nm}}/\text{Y}_{3.0 \text{ nm}}]_{25}$

Результаты демонстрируют яркую зависимость параметра киральности от температурной и магнитно-полевой предыстории. Изменение средних значений спиновой киральности интерпретировали в рамках гипотезы взаимодействия Д-М, которое появляется на магнитно-немагнитных интерфейсах многослойных систем.

Фрустрированные спиновые структуры в геликоидальных магнитных кристаллах типа MnSi

В. А. Чижиков, В. Е. Дмитриенко

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

Спиральная магнитная структура в кубическом кристалле типа MnSi описана аналитически в рамках модели классического Гейзенберговского ферромагнетика со взаимодействием Дзялошинского-Мории (ДМ) между соседними атомами Mn. ДМ вектора \mathbf{D} для всех кратчайших связей Mn-Mn выражаются через \mathbf{D} -вектор произвольно выбранной связи в соответствии точечной группой 23 кристалла и направлениями связей. В результате минимизации магнитной энергии было показано, каким образом волновой вектор \mathbf{k} магнитных спиралей зависит от \mathbf{D} : для любого направления спирали $k=2(Dx-2Dy-Dz)/(3J)$, где J — константа обменного взаимодействия и k выражается в обратных параметрах ячейки. Волновое число k определяет знак и шаг глобальной закрутки, в то время как локально, внутри элементарной ячейки, спиральное упорядочение фрустрировано, так что углы поворотов спинов между последовательными магнитными плоскостями могут быть даже противоположных знаков. В рамках той же модели рассмотрены конические спирали в произвольно направленном внешнем магнитном поле и найдено значение критического поля полной «раскрутки» спирали. Показано, что даже в раскрученном состоянии сохраняются остаточные периодические скосы магнитных моментов с углами между спинами пропорциональными $(Dx + Dz)/J$. Эти скосы приводят к возникновению чисто магнитных рефлексов $00l$, $l=2n+1$ в нейтронном или рентгеновском магнитном рассеянии, и для произвольной ориентации поля были рассчитаны структурные факторы этих «запрещённых» отражений. Также найдено, каким образом обычно используемое в феноменологическом описании непрерывное поле магнитного момента связано с дискретным распределением спинов в микроскопической теории.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 10-02-00768, 12-02-00985) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

1. V. A. Chizhikov, V. E. Dmitrienko "Frustrated magnetic helices in MnSi-type crystals", Phys. Rev. B. **85**, 014421 (2012)
2. V. E. Dmitrienko, V. A. Chizhikov "Weak antiferromagnetic ordering and pure magnetic reflections induced by Dzyaloshinskii-Moriya interaction in MnSi-type crystals", <http://arxiv.org/abs/1110.4968>

Секция «Фазовые переходы»

Критическая динамика и диффузное рассеяние в антисегнетоэлектрике цирконате свинца

Д.А.Андроникова¹, Р.Г.Бурковский¹, А.В.Филимонов¹, А.П.Шаганов¹, Д.Ю.Чернышов³,
А.А. Босак³, А.К.Таганцев⁴, С.Б.Вахрушев⁵

¹ Санкт-Петербургский Государственный Политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия

² SBNL at The European Synchrotron Radiation Facility, Гренобль, Франция

³ Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

⁴ Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Лозанна, Швейцария

⁵ Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Цирконат свинца (ЦС) является компонентом одного из самых широко используемых сегнетоэлектрических материалов – цирконата-титаната свинца. Также он является одним из модельных антисегнетоэлектрических кристаллов. Несмотря на многолетнюю историю исследований этого кристалла вопрос о критической динамике решетки, сопровождающей антисегнетоэлектрический переход при $T=503$ К, остается практически неисследованным. В этом контексте имеет смысл отметить работу [1], в которой методом инфракрасной спектроскопии были исследованы оптические и центральная моды в керамиках ЦС.

Существенно более полно можно исследовать картину при помощи дифракции на монокристаллах. Нами был проведен комплекс экспериментов по изучению критической динамики решетки в ЦС методами диффузного и неупругого рассеяния синхротронного излучения. При помощи спектрометра неупругого рассеяния на линии BL35XU синхротронного источника SPING-8 была прослежена температурная эволюция низкоэнергетических фононов в основных высокосимметричных направлениях. Показано, что в высокотемпературной кубической фазе поперечный акустический фон, распространяющийся в направлениях $\{1\ 1\ 0\}$, обладает рекордно низкой энергией практически во всей зоне Бриллюэна. Характерная частота фонона в параэлектрической фазе уменьшается с 2 мэВ при 780 К до 1.2 мэВ вблизи перехода. Ниже перехода частота резко увеличивается до 3.5 мэВ (Рис. 1). В качестве комплементарной методики было использовано диффузное рассеяние СИ на оборудовании Швейцарско-Норвежского отделения ESRF. Это позволило изучить анизотропию дисперсии фононов во всей зоне Бриллюэна.

Уникальный для исследованных до сего дня в перовскитах характер дисперсии ТА фонона указывает на возможную связь его смягчения с приближением к переходу в несоизмерную фазу, характеризуемую нестабильностью с волновым вектором $q \sim 0.3$.

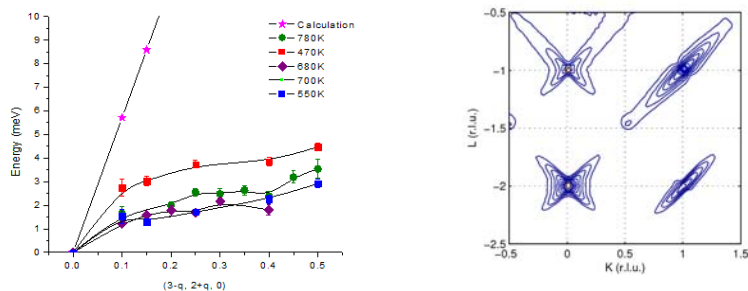


Рис. 1. (Слева) Дисперсионные кривые для ТА фонона при различных температурах и (справа) срез обратного пространства кристалла.

1. Т. Ostapchuk, J. Petzelt, V. Zelezny, et al., Condensed Matters 2677, 13 (2003).

Диэлектрические свойства ниобата натрия с варьируемым коэффициентом нестехиометрии и твердых растворов на его основе в области криогенных температур

К. П. Андрияшин¹, А. А. Павелко¹, Л. А. Резниченко¹, Х. А. Садыков¹

¹Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

В ниобате натрия (НН) общепринятым считается наличие шести фазовых переходов (ФП), обусловленных как смещениями атомов, так и поворотами кислородных октаэдров: $Pm\bar{3}m - O^1_h$ (U, кубическая, неСЭ) $\xrightarrow{910\text{ К}}$ $P4mbm - D^5_{4h}$ (T₂, тетрагональная, неСЭ) $\xrightarrow{850\text{ К}}$ $Ccm - D^{17}_{2h}$ (T₁, ромбическая, неСЭ) $\xrightarrow{790\text{ К}}$ $Pnmm - D^{13}_{2h}$ (S, ромбическая, неСЭ) $\xrightarrow{750\text{ К}}$ $Pnmm - D^{13}_{2h}$ (R, ромбическая, АСЭ) $\xrightarrow{640\text{ К}}$ $Pbma - D^{11}_{2h}$ (P, ромбическая, АСЭ) $\xrightarrow{170\text{ К}}$ $R3c - C^6_{3v}$ (N, ромбоэдрическая, СЭ). До недавнего времени описанная в [1, 2] фазовая картина НН оставалась неоспоримой. Появившиеся же в последние годы публикации [3 и ссылки в статье] свидетельствуют о довольно широкой, зависящей от условий роста монокристаллов, области низкотемпературного ФП.

В настоящей работе представлены результаты исследования диэлектрических свойств горячепрессованной высокоплотной керамики ($\rho > 0.98$) твердых растворов (ТР) бинарной системы $Na_{1-x}Li_xO_3$ ($x = 0.0 \div 0.135$) (1) и НН с нестехиометрией в А- подрешетке ($Na_{1-y}NbO_{3-y/2}$, $y = 0.0 \div 0.1$, $\Delta y = 0.02$) (2).

Ниже представлены диэлектрические спектры систем 1 (рис. а) и 2 (рис. в) на частоте 1 кГц (Novocontrol ALPHA High - Resolution Dielectric Analyzer), а также фазовая диаграмма системы 1 (рис. б). Видно, что в интервале температур (170÷300)К (в зависимости от x) наблюдается anomalous изменение действительной части относительной диэлектрической проницаемости (ϵ'/ϵ_0), эволюционирующее от «ступеньки» до размытого максимума и сдвигающееся в сторону высоких температур по мере увеличения x (рис. а). Весьма вероятно, что это линия ФП на диаграмме состояний системы (1), высокотемпературная часть которой нами была построена ранее [4]. Обращает на себя внимание факт независимости температуры описанного ФП от индекса (y) нестехиометрии НН (рис. в), что говорит в пользу высокой «химической» стабильности низкотемпературного СЭ состояния НН.

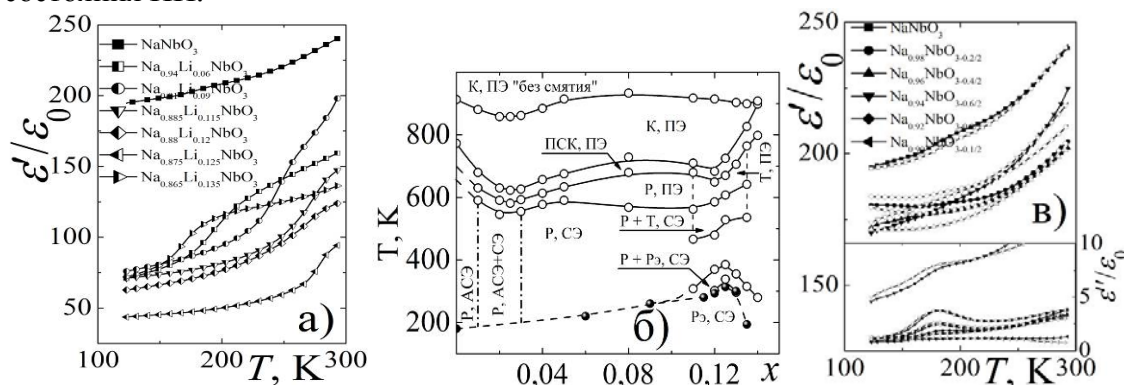


Рис. Диэлектрические спектры систем 1 (а), 2 (в) на частоте 1 кГц и фазовая диаграмма системы 1 (б).

1. H.D. Megaw, *Ferroelectrics*, **7**, №1/2/3/4, 87-89 (1974).
2. N. Kinomura, N. Kumata, F. Muto, *Mat. Res. Bull.*, **19**, №3, 299-304 (1984).
3. S.I. Raevskaya, i.P. Raevski, et al., *J.Phys: Condens. Matter*, **20**, 232202 (5pp) (2008).
4. Л.А. Шилкина, Л.А. Резниченко, и др., *ЖТФ*, **47**, №10, 2173-2178 (1977).

Применение теории случайных матриц к физике гранулярных сред

Я. М. Бельтюков

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

Такие системы, как гранулярные среды, коллоидные суспензии, эмульсии и пены при увеличении концентрации переходят из состояний отдельных частиц в состояние похожее на твердое тело. Только чуть более 10 лет назад была предложена достаточно адекватная модель для их описания [1]. Она заключается в рассмотрении частиц в виде упругих шаров в некотором объеме. При малой концентрации все частицы свободно движутся. Но стоит только преодолеть критический порог по концентрации, и все частицы приобретают положение устойчивого равновесия. В этом состоянии мы имеем твердую фазу. Такой фазовый переход получил в английской литературе название *jamming transition*, потому что он напоминает затор на дороге (*traffic jam*).

Несмотря на сравнительно простую постановку задачи, при приближении к точке фазового перехода многие результаты получаются только путем трудоемкого численного моделирования. Связано это с тем, что деформации в такой системе при подходе к точке перехода перестают быть аффинными [2]. Мы хотим здесь применить теорию случайных матриц для описания разных типов и спектров колебаний в ситуации близкой к точке перехода. Ранее нами было показано, что теория случайных матриц хорошо описывает колебательные свойства аморфных диэлектриков (стекло) [3,4], а гранулярные среды имеют много общего со стеклами [5].

Система в твердой фазе описывается динамической матрицей M . Она квадратная, симметричная и положительно определенная. Её размеры равны числу степеней свободы. Оказывается, что положительно определенную динамическую матрицу M всегда можно представить в виде $M = AA^T$, где A в общем случае – прямоугольная матрица. Каждой строчке матрицы A соответствует определенная степень свободы, а каждому столбцу – случайная связь между двумя частицами.

Матрица A имеет достаточно сложную структуру. Если мы предположим, что все элементы матрицы A – независимые случайные числа, мы получим плотность колебательных состояний, соответствующую распределению Марченко-Пастура [6].

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi\omega_0^2\omega} \sqrt{(\omega_+^2 - \omega^2)(\omega^2 - \omega_-^2)}, \quad \omega_{\pm} = \omega_0 \left| \sqrt{Q} \pm 1 \right|,$$

где ω_0 – характерная частота в системе, а Q – отношение числа связей между частицами и числа степеней свободы. Несмотря на такое, не очень реальное предположение, мы, тем не менее, получили хорошее согласие с плотностью колебательных состояний гранулярных сред вблизи фазового перехода. При этом фазовый переход возникает, когда число связей между частицами сравнивается с числом степеней свободы.

В описанном методе случайных матриц мы не учитывали конкретный тип беспорядка. Это свидетельствует как об универсальности подхода с помощью случайных матриц, так и об универсальности свойств рассматриваемых неупорядоченных систем.

1. A.J. Liu and S.R. Nagel, *Nature* **396**, 21 (1998).
2. W.G. Ellenbroek, M. van Hecke and W. van Saarloos. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 258001 (2006).
3. Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин, *ФТТ* **53**, 142 (2011).
4. Я.М. Бельтюков, Д.А. Паршин, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 661 (2011).
5. V. Vitelli, N. Xu, M. Wyart, A.J. Liu, S.R. Nagel. *Phys. Rev. E* **81**, 021301 (2010).
6. В.А. Марченко, Л.А. Пастур. *Мат. сб.* **72** (114), 507 (1967).

Калибровочная теория стеклования

М. Г. Васин¹

¹ *Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия*

Предложен новый теоретический подход к описанию стекольного перехода во фрустрированной конденсированной системе, основанный на калибровочной модели стекла [1-3], в котором геометрические фрустрации рассматриваются в качестве источников калибровочного поля, описывающего пространственную неоднородность системы. Исследована неравновесная динамика трёхмерной модели Гейзенберга со свободными случайными фрустрациями вблизи точки фазового перехода T_c . Показано, что при $T_g > T_c$, вследствие взаимодействия поля параметра порядка с калибровочным полем, происходит критическое замедление роста флуктуаций поля параметра порядка, приводящее к замораживанию структуры в макроскопически неупорядоченном состоянии. При этом кинетика релаксации фрустрированной модели Гейзенберга вблизи T_g , удовлетворяет закону Фогеля-Фулчера-Таммана, линейная восприимчивость остаётся конечной, а нелинейная восприимчивость расходится по степенному закону с показателем γ , величина которого, $2.5 < \gamma < 3$, согласуется с экспериментальными данными. Получен характерный для стекольных переходов аналитический вид зависимости корреляционной функции параметра порядка от температуры, на котором, в результате суперпозиции вклада от свободного поля параметра порядка и "кооперативного" вклада от взаимодействия поля параметра порядка с калибровочным полем, возникает плато. Показано, что уравнение теории связанных мод, в представлении Цванцига-Мори, описывающее динамику конденсированной системы вблизи стекольного перехода, может быть непосредственно получено из предложенной калибровочной теории стекольного перехода.

1. I. E. Dzyaloshinskii, G.E. Volovik J. Physique, **39**, 693-700 (1978);
2. J.A. Hertz Phys.Rev.B., **18**, 4875-4885 (1978);
3. N. Rivier, D.M. Duffy J. Physique, **43**, 295-306 (1982);

Влияние оксидов переходных 3d-металлов на формирование фазы со структурой перовскита с общей формулой « BiFeO_3 »

И.А. Вербенко¹, Х.А. Садыков¹, Л.А. Шилкина¹, А.Г. Абубакаров²

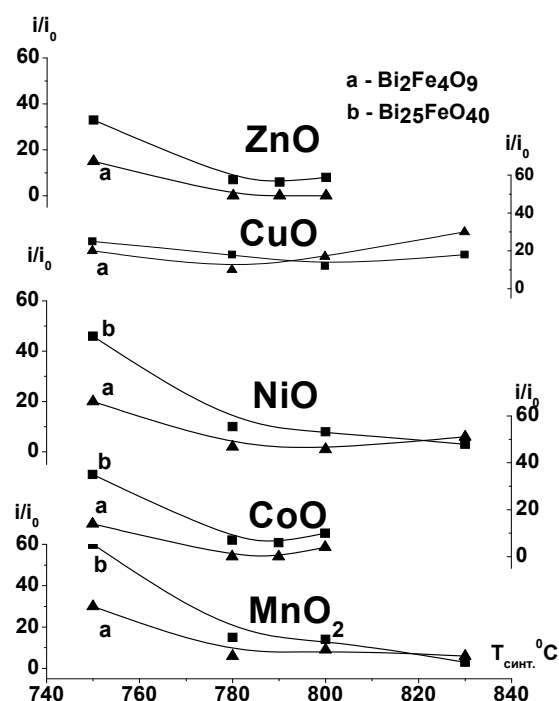
¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

² Чеченский государственный университет, Грозный, Россия

BiFeO_3 , благодаря высоким значениям температур сегнетоэлектрического (СЭ) ($T_c \sim 1083 \text{ K}$) и магнитного ($T_N \sim 643 \text{ K}$) упорядочений, считается удобным объектом для создания магнитоэлектрических материалов [1]. Однако, уровень магнитоэлектрических свойств в нём не столь высок, что обусловлено, с одной стороны, особенностями магнитной и кристаллической структур[2], а с другой, - большой разницей между температурами антиферромагнитного и СЭ фазовых переходов. Кроме того, установлено [3], что BiFeO_3 является термодинамически не устойчивым соединением при температурах необходимых для синтеза твердофазным методом. Несмотря на многочисленные попытки, синтезировать термически устойчивый порошок, пригодный для спекания плотной керамики, до настоящего времени не удаётся. Одним из путей, позволяющих стабилизировать BiFeO_3 и оптимизировать его свойства, является введение модификаторов. Настоящая работа посвящена исследованию влияния оксидов переходных 3d металлов на формирование феррита висмута.

Все образцы получены твердофазным методом из оксидов Bi_2O_3 , MnO_2 , CoO , NiO , CuO , ZnO квалификации не ниже «ч.д.а.». Температуру синтеза подбирали в интервале $T_{\text{синт.}} = (750 \div 830)^\circ\text{C}$, выдержка составляла 10 ч.

На рис. 1 представлены зависимости относительных интенсивностей рентгеновских максимумов, соответствующих содержанию примесных фаз. Из рис. видно, что содержание примесей резко снижается в интервале температур $(780 \div 800)^\circ\text{C}$, и вновь возрастает при увеличении $T \geq 800^\circ\text{C}$. При дальнейшем увеличении T ($T=830^\circ\text{C}$) введение ряда модификаторов (MnO_2 , CoO и NiO) вновь приводит к уменьшению содержания примесей, особенно стремительно при этом уменьшается содержание примеси, обогащённой висмутом. Наблюдаемое, вероятно, может свидетельствовать о внедрении при $T \geq 800^\circ\text{C}$ этих элементов в В-подрешётку структуры BiFeO_3 . Обращает на себя внимание тот факт, что при модифицировании CuO и ZnO общее содержание примесей существенно выше и при увеличении температуры до $T \geq 830^\circ\text{C}$ количество примесных фаз возрастает. Наблюдаемое, очевидно, говорит о невхождении этих катионов в структуру BiFeO_3 .



1. Смоленский Г.А., Чупис И.Е. УФН. **137**, 415 (1982)
2. Попов Ю.И., Звездин А.К., Воробьев Г.П., Письма в ЖЭТФ., **57**, 65 (1993)
3. Phapale S., Mishra R., Das D. Journal of Nuclear Materials, **373**, 137 (2008)

Структурные и магнитные фазовые переходы в манганите $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ при высоком давлении

Т.Н. Данг^{1,2}, Д.П.Козленко¹, С.Е.Кичанов¹, Е.В.Лукин, Б.Н.Савенко¹

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Тульский государственный университет, Тула, Россия

Перовскито-подобные манганиты $\text{A}_{1-x}\text{A}'_x\text{MnO}_3$ (А - редкоземельный, А' – щелочно-земельные элементы) проявляют большое разнообразие магнитных и электронных свойств в зависимости от типа А' – элемента, его содержания и от внешних условий. В данной работе представлен результат исследования влияния высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру манганита $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ с помощью нейтронной и рентгеновской дифракции и Рамановской спектроскопии.

Манганит $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ имеет орторомбическую кристаллическую структуру с пространственной группой $Pnma$. С повышением давления до $P \approx 7$ ГПа наблюдается структурный фазовый переход в более симметричную орторомбическую кристаллическую структуру с пространственной группой $Imma$.

При понижении температуры до $T \approx 272$ К происходит фазовый переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние. При давлении $P = 1.9$ ГПа с понижением температуры до $T \approx 138$ К возникает новая антиферромагнитная фаза А-типа, которая сосуществует с ферромагнитной фазой до 5 ГПа. Температуры перехода из парамагнитного в ФМ и в АФМ слабо зависят от давления.

Работа поддержана грантом МД-696.2010.2, гранта РФФИ №12-02-00974-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Структурные изменения в BiMnO_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, Дубна, Россия

² Институт Физики НАНА, Баку, Азербайджан

³ Helmholtz Centre Potsdam, Гамбург, Германия

Среди трехмерных оксидов - мультиферроиков BiMnO_3 [6] является одним из наиболее интенсивно изучаемых соединений. Ниже температуры $T=500^\circ\text{C}$, он обладает искаженной перовскитоподобной моноклинной структурой с пространственной группой $C2/c$, проявляющей сегнетоэлектрические свойства. При температуре Кюри $T_C = 173^\circ\text{C}$ в BiMnO_3 наблюдается появление ферромагнитного упорядочения. Недавние работы по измерению магнитной восприимчивости при высоких давлениях указывают на то, что ферромагнитная фаза в BiMnO_3 нестабильна, и полностью подавляется при давлениях $P > 1$ ГПа, с возникновением новой магнитной фазы с критической температурой $T_{C1} = 90$ К. Несмотря на большой интерес со стороны экспериментаторов и теоретиков, механизм появления электрической поляризации и формирования магнетоэлектрической связи в мультиферроиках до сих пор остается не ясным.

В работе исследовались структурные изменения в BiMnO_3 методом рентгеновской дифракции в диапазоне температур $30 - 600^\circ\text{C}$ при давлениях 3.5 ГПа. Эксперименты по рентгеновской дифракции проведены с использованием гидравлического пресса высокого давления МАХ80, 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 сегнетоэлектрической фазе кристаллическая структура BiMnO_3 описывается моноклинной симметрией с пространственной группой $C2/c$. При температуре $T_c=500^\circ\text{C}$ наблюдается фазовый переход сегнетоэлектрик – параэлектрик, сопровождающийся структурным фазовым переходом в орторомбическую структуру с пространственной группой $Pbnm$. Установлено, что высокое давление приводит к заметному уменьшению температуры перехода из моноклинной сегнетоэлектрической в орторомбическую параэлектрическую фазу. Рассчитаны модули всестороннего сжатия и коэффициенты теплового расширения для моноклинной и орторомбической фаз. Обсуждаются механизмы взаимосвязи магнитных и сегнетоэлектрических свойств.

Работа выполнена при поддержке гранта МД-696.2010.2, гранта РФФИ №12-02-00794-а и госконтрактов № 02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральных целевых программ «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Исследование фазовых переходов в смеси липидов ДПФХ/ПОФХ методами МУРН и МУРР

Д. В. Соловьев^{1,2}, О. И. Иванов^{1,2}, Ю. Е. Горшкова¹, А. Жигунов³, Л. А. Булавин²,
В. И. Горделий^{4,5,6}, А. И. Куклин^{1,4}

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

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

³ Institute of Macromolecular Chemistry of the Czech Republic Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

⁴ Центр биологических исследований, МФТИ, Долгопрудный, Россия

⁵ Institute Biological Structure, Grenoble, France

⁶ Institute of Complex System- 5, Juelich, Germany

В работе методом малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей исследованы мультислойные липидные мембраны ДПФХ (1,2-дипальмитоил-sn-глицеро-3-фосфатидилхолин) и смеси ДПФХ/ПОФХ (1-пальмитоил-2-олеилфосфатидилхолин) в избытке воды. Получены температурные зависимости периодов повторяемости липидных бислоев в диапазоне от 3 до 60°C. Было показано, что добавление ПОФХ в систему ДПФХ/H₂O в пределах экспериментальной ошибки не изменяет температуру главного фазового перехода для ДПФХ. Наблюдаемое фазовое разделение происходит и в системе ДПФХ/ПОФХ/H₂O до температуры предперехода (гель-рипл фаза) мультислойных мембран ДПФХ. Обнаружено, что гель-фаза для смеси ДПФХ/ПОФХ имеет меньший период повторяемости, чем для чистого ДПФХ. Данный эффект существенно выше для образцов, измеренных с помощью МУРР. Выявлена дополнительная фаза для системы, измеренной на установке малоуглового рентгеновского рассеяния. Обсуждаются возможные причины такого поведения смеси липидов.

1. D. V. Soloviov, Yu. E. Gorshkova, et al., Ripple Phase Behavior in Mixtures of DPPC/POPC lipids: SAXS and SANS Studies, J. Phys.: Conf. Ser. (2012) in print.

Динамический структурный фактор, фононные спектры и кривая плавления натрия. Первопринципное численное моделирование

С. В. Лепешкин^{1,2}

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

В настоящей работе кривая плавления Na рассчитана методом первопринципной молекулярной динамики Борна–Оппенгеймера (BOMD) [3] в широком диапазоне давлений (до 100 ГПа) и температур (от 300 К до 1000 К) в ОЦК и ГЦК фазах; часть результатов кратко опубликована в работе [4]. В данном методе твердая фаза нагревается до наступления плавления, причем температура плавления T_m определяется двумя способами: по началу неограниченного роста среднеквадратичного смещения атомов $u(t)$ от времени, что соответствует началу диффузии в жидкой фазе, и по характерному изменению вида парной корреляционной функции. В пределах точности используемые критерии дают одинаковые результаты для температуры плавления T_m . Данный подход позволяет адекватно описывать свойства материалов при конечных температурах с полным учетом всех ангармонических эффектов. Кривая $T_m(p)$, полученная методом BOMD, хорошо согласуется как с экспериментальными данными [2], так и с нашими предыдущими расчетами в квазигармоническом приближении [1]. Таким образом, ангармонизм не оказывает существенного влияния на термодинамические свойства Na вплоть до температур порядка T_m .

Также было проверено влияние ангармонического взаимодействия на фононные спектры Na. С этой целью для ОЦК и ГЦК фаз натрия был вычислен динамический структурный фактор $S(\mathbf{q}, \omega)$ на основе полученных при молекулярно-динамическом моделировании траекторий частиц. Из пиков функции $S(\mathbf{q}, \omega)$ были определены фононные частоты $\omega(\mathbf{q})$ для нескольких точек на (p, T) -фазовой диаграмме. Результаты для $\omega(\mathbf{q})$ и их сравнение с квазигармоническими расчетами [1] показывают, что учет ангармонизма слабо влияет на дисперсию фононных мод в Na.

1. С. В. Лепешкин, М. В. Магницкая, Е. Г. Максимов, Письма в ЖЭТФ **89**, 688 (2009).

2. E. Gregoryanz, O. Degtyareva, M. Somayazulu et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 185502 (2005).

3. <http://www.cpmc.org/v3.13> © IBM Corp (1990–2008) and MPI Stuttgart (1995–2001).

4. Е. Г. Максимов, С. В. Лепешкин, М. В. Магницкая, Кристаллография **56** 725–728 (2011).

Полиморфный фазовый переход в хлорпропамиде при высоком давлении

*Н.В. Лошак^{1),2)}, С.Е. Кичанов¹⁾, Д.П. Козленко¹⁾, Я.В. Вонсицки³⁾, Е.В. Лукин¹⁾, К. Лате⁴⁾,
Б.Н. Савенко¹⁾*

¹⁾ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²⁾ Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³⁾ Университет им. А. Мицкевича, Познань, Польша

⁴⁾ Helmholtz Centre Potsdam, Гамбург, Германия

Изучение влияния высокого давления на структуру и динамику фармакологических компонентов является одной из важнейших задач физики конденсированного состояния. Удобным объектом исследования является хлорпропамид $C_{10}H_{13}ClN_2O_3S$. В этом соединении наблюдается пять полиморфных форм в зависимости от условий синтеза или температуры. До сих пор полиморфных фазовых переходов в этом соединении при высоком давлении не наблюдалось.

В работе методом рентгеновской дифракции впервые обнаружен полиморфный фазовый переход в хлорпропамиде при высоких давлениях $P=1.2$ ГПа. Установлено, что фаза высокого давления является моноклинной полиморфной формой γ хлорпропамида с пространственной группой $P2_1$. Получены параметры элементарной ячейки полиморфных форм α и γ хлорпропамида и рассчитаны их барические коэффициенты.

Работа поддержана грантом РФФИ №11-02-00416-а, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Изучение температурных эффектов в сегнетоэлектрических перовскитах на основе расчетов из первых принципов

Н.Л. Мацко, Е.Г. Максимов, С.В. Лепешкин

Физический институт имени П.Н.Лебедева РАН, Москва, Россия

Расчеты из «первых принципов» на основе теории функционала электронной плотности (ТФП) позволяют с высокой точностью вычислять свойства основного состояния кристалла, практически не используя экспериментальные данные. Чтобы рассчитать температурные эффекты в системе, необходимо учесть тепловые колебания атомов. Прямой вклад электронов в температурную зависимость пропорционален $(k_B T/E_F)^2$, поэтому при умеренных температурах им можно пренебречь. Основной вклад в температурную зависимость свободной энергии кристалла дают фононы, однако расчет фононного вклада на основе ТФП на 2-3 порядка более трудоемок, чем расчет электронной структуры. Еще большие трудности представляет расчет ангармонических эффектов, так как для этого требуется расчет нелинейных функций отклика.

Нами рассматривается способ эффективного описания сегнетоэлектрического перехода в перовскитах. На основе первопринципных расчетов была построена квазигармоническая феноменологическая модель соединений BaTiO_3 , KNbO_3 и PbTiO_3 . В этой модели удастся смоделировать дисперсию фононов от нулевых температур до температуры фазового перехода, когда мягкая мода в соединении становится устойчивой. Такое поведение фононных спектров очень хорошо согласуется с экспериментальными данными. Расчеты в соединениях BaTiO_3 и KNbO_3 свидетельствуют о сильной анизотропии мягкой моды в этих кристаллах, тогда как в PbTiO_3 мягкая мода изотропна.

Феноменологическая модель BaTiO_3 была модернизирована с целью учета эффектов ангармонизма на основе молекулярно-динамического (MD) моделирования. Были проведены расчеты статических и динамических корреляционных функций в кристалле BaTiO_3 . С помощью статических корреляционных функций изучены особенности диффузного рассеяния в титанате бария, демонстрирующие наблюдаемые в эксперименте аномальные плоскости. На основе зависящих от времени парных корреляционных функций рассчитаны фононные спектры BaTiO_3 и изучен центральный пик неупругого рассеяния. Фононные частоты, вычисленные методом MD, хорошо согласуются с полученными нами ранее в квазигармоническом приближении. Показано, что центральный пик неупругого рассеяния связан, в основном, с мягкой оптической модой и обладает той же симметрией. Большая анизотропия смещений атомов в составе мягкой моды позволяет объяснить, как наличие особенностей в рассеянии рентгеновских лучей, так и особенностей EXAFS спектроскопии. Продемонстрировано, что характерный вид EXAFS спектров объясняется квазиодномерным характером движения ионов кислорода в кубической решетке BaTiO_3 . Расчет тройных корреляционных функций показывает, что в описанной модели атом титана совершает колебания относительно центра кубической ячейки.

Объяснение в развитой модели экспериментальных данных, вызывавших разногласия относительно природы фазового перехода в BaTiO_3 , дает основания трактовать фазовый переход в титанате бария как переход типа смещения.

Эволюция диэлектрических спектров мультиферроика – феррита висмута с различной термодинамической предысторией

А.И. Миллер, И.А. Вербенко

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Мультиферроики – обширная группа функциональных материалов, в которых сочетаются сегнетоэлектрическое, ферромагнитное и сегнетоэластическое поведение.

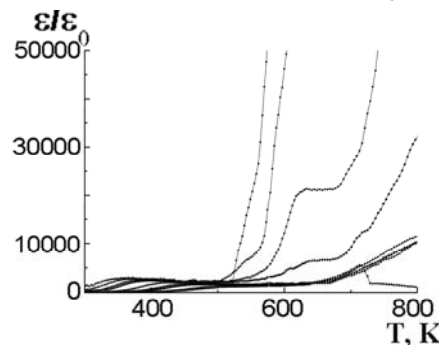
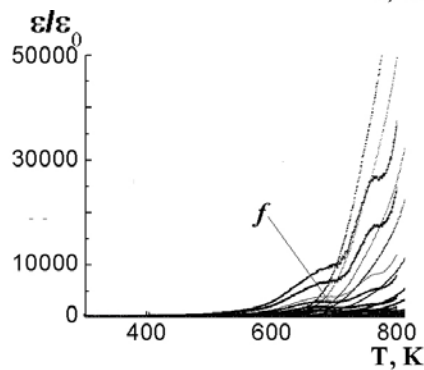
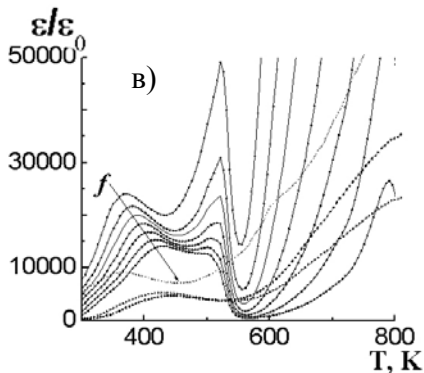


Рис. Температурные зависимости $\varepsilon/\varepsilon_0$ керамик BiFeO_3 , полученного по ОКТ (а), с использованием механоактивации (б) и комбинированного метода (в).

Одним из наиболее интенсивно изучаемых мультиферроиков является феррит висмута (BiFeO_3), обладающий антиферромагнитными ($T_N = 643\text{K}$) и сегнетоэлектрическими ($T_C = 1103\text{K}$) свойствами в широкой области температур. Но его практическому применению препятствуют структурная и термодинамическая неустойчивости, обусловленные пограничным положением в перовскитовом семействе, а также близостью температур спекания и инконгруэнтного плавления, что приводит к появлению трудноисключаемых примесей, и, как следствие, высокой электропроводности. Кроме того, для этого соединения характерна критическая нестабильность диэлектрических свойств при температурах, близких к комнатной.

Данная работа направлена на устранение вышеуказанных негативных факторов.

На рис. а) показаны температурные зависимости относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon/\varepsilon_0$ BiFeO_3 , полученного традиционным способом (по обычной керамической технологии, ОКТ). Используя метод механоактивации прекурсоров [1], нам удалось сдвинуть низкотемпературные пики в область более высоких температур (рис. б), однако, исключить свойственные BiFeO_3 [2] примеси не удалось.

Применение комбинированного метода: "заковки" (нагрев до 800°C и резкое охлаждение до комнатной температуры) и механоактивации; – позволило полностью исключить примесь с высоким содержанием железа ($\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$) и снизить содержание фазы, обогащенной висмутом ($\text{Bi}_{36}\text{Fe}_2\text{O}_{57}$). Но некоторая нестабильность свойств при $T < 500\text{K}$ сохранилась, что требует введения дополнительных технологических приемов.

Таким образом, установлено влияние термодинамической предыстории (условий получения

BiFeO_3) на его диэлектрические свойства.

1. А.И. Миллер, А.А. Гусев, И.А. Вербенко, Л.А. Шилкина, К.П. Андрушин, Л.А. Резниченко. Сб.-к. мат. Рос.-Укр. Междун. симп. С. 40-53 (2011.)
2. О.М. Жигалина, Д.Н. Хмеленин, К.А. Воротилов и др. ФТТ. **54**. 5. 937-938. (2012)

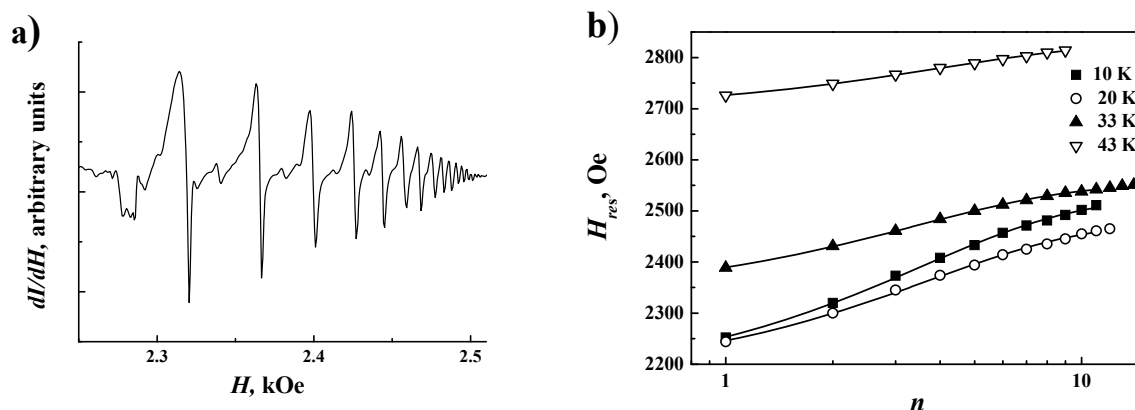
Определение периода несоизмерной магнитной структуры методом ФМР

Ф.Б. Мушенок

Институт Проблем Химической Физики РАН, Черноголовка, Россия

Несоизмерные магнитные структуры являются одним из актуальных объектов физики магнетизма. Фундаментальный интерес к подобным соединениям обусловлен возможностью наблюдения новых типов магнитного упорядочения, топологических структур и спиновых возбуждений. Практическая значимость несоизмерных магнитных структур связана с возможностью обнаружения магнитоэлектрического взаимодействия и создания новых типов мультиферроиков. Новое направление в разработке и исследовании материалов с несоизмерной магнитной структурой связано с синтезом хиральных молекулярных магнетиков. Источником несоизмерной магнитной структуры в таких соединениях является антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского-Мори. Неприменимость методов нейтронографии к исследованию молекулярных магнетиков вынуждает искать новые методы исследования несоизмерных магнитных структур. Одним из таких методов является ферромагнитный резонанс (ФМР). Целью данной работы было исследование несоизмерной магнитной структуры хирального молекулярного магнетика $[\text{Mn}\{\text{(R/S)-pn}\}]_2[\text{Mn}\{\text{(R/S)-pn}\}_2(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}(\text{CN})_6]_2$ методом ФМР.

Спектр ферромагнитного резонанса исследованного соединения содержит последовательность линий [1], которая хорошо описывается в рамках представлений о возбуждении спиновых солитонов в хиральных магнетиках [2].



a) Спектры ФМР кристаллов $[\text{Mn}\{\text{(R/S)-pn}\}]_2[\text{Mn}\{\text{(R/S)-pn}\}_2(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}(\text{CN})_6]_2$ при $H \parallel c$, $T = 30$ К. b) Зависимости резонансного поля H_{res} линий ФМР от номера резонансного пика n , $H \parallel c$. Сплошной линией показана аппроксимация [2].

На основе анализа спектров ФМР определён вектор модуляции магнитной структуры $k \sim 0.006$ и получено поле перехода в соразмерную магнитную структуру $H_{\text{пир}} \sim 2.6$ кЭ [3]. Обнаружено значительное расхождение между экспериментально определённой и теоретически предсказанной энергией спиновых солитонов. Такое расхождение может быть обусловлено магнитокристаллической анизотропией, которая не учитывалась в теоретических оценках.

1. R.B. Morgunov, M.V. Kirman et al., Phys. Rev. B **77**, 184419 (2008).
2. J. Kishine, A.S. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **79**, 220405 (2009).
3. Ф.Б. Мушенок, М.В. Кирман и др., ФТТ, принята к печати.

Концентрационная зависимость размера фазовых выделений в стареющих Cu-Be сплавах по данным МУРН

Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

В ранее выполненных работах [1, 2] получены систематические экспериментальные данные по кинетике старения Cu-Be сплавов с концентрацией бериллия 0.5, 1.0, 1.6, 2.7, 3.0 вес. % Be, состаренных при температуре 300 °С и времени старения от 0.17 до 2 ч. Установлено, что исходная концентрация бериллия в стареющих Cu-Be сплавах оказывает существенное влияние на их структуру и свойства: с ростом концентрации бериллия размер зерна уменьшается в 3 раза, микротвердость сплавов увеличивается до 3.5 раз, и изменяется химический и фазовый состав сплавов. Кроме этого, полученные экспериментальные факты убедительно показывают, что механизмы влияния процесса старения на структуру и свойства Cu-Be сплавов определяются элементарными процессами роста фазовых выделений и их взаимодействием с дислокациями.

Для исследования кинетики фазообразования в стареющих Cu-Be сплавах с различным содержанием бериллия в настоящей работе было выполнено экспериментальное исследование малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Эксперименты по МУРН в процессе искусственного старения Cu-Be сплавов выполнены на установке ВЕКТОР (ПИЯФ им. Б.П. Константинова, реактор ВВР-М, Гатчина) с длиной волны $\lambda=9.2 \text{ \AA}$. В данных экспериментах рассеяние нейтронов регистрировалось в диапазоне переданных импульсов $0.005 < q < 0.03 \text{ \AA}^{-1}$.

По полученным экспериментальным данным выполнен расчет размера рассеивающих центров в зависимости от концентрации бериллия в сплаве. Показано, что с увеличением исходной концентрации бериллия в сплавах растет размер фазовых выделений. Так для сплава с концентрацией бериллия 0.5 и 1.0 вес. % максимальный размер фазовых выделений составляет ~75 нм, в то время как для сплавов 1.6, 2.7 и 3.0 вес. % его величина достигает ~105 нм. Сопоставляя полученные результаты с данными по микротвердости [1] можно предположить, что наблюдаемое увеличение микротвердости сплавов 1.6, 2.7, 3.0 вес. % Be относительно сплавов с содержанием бериллия 0.5, 1.0 вес. % связано с увеличением размера фазовых выделений от 75 до 105 нм. Это свидетельствует о смене механизмов взаимодействия растущих фазовых выделений с движущимися дислокациями, что отражается на структуре и свойствах стареющих Cu-Be сплавов.

Полученные результаты демонстрируют взаимосвязь данных микротвердости и МУРН, а также существенную зависимость размеров фазовых выделений от концентрации бериллия в рассмотренных сплавах, что связано со сложной кинетикой роста новой фазы. Кроме этого, полученная информация позволит определить оптимальные концентрации элементов в сплавах и прогнозировать их физико-механические свойства, что на данный момент является актуальным и практически важным.

1. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев. Вестник ТГУ **15**, 1242 (2010)
2. Ю.В. Осинская, С.С. Петров, А.В. Покоев. Вестник СамГУ **78**, 145 (2010)

Особенности формирования сегнетоэлектрических свойств в твердых растворах многокомпонентной системы на основе PMN и PZT

А. А. Павелко, Л. А. Шилкина

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Твердые растворы (ТР), принадлежащие многоэлементным композициям, основанным на бинарных системах $(1-x)\text{PbZrO}_3-x\text{PbTiO}_3$ (PZT) (классические сегнетоэлектрики, СЭ) и $(1-x)\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$ (PMN-PT) (СЭ – релаксоры), обладают исключительными перспективами в области создания электрически активных материалов электронной техники. Варьирование элементного состава таких систем позволяет конструировать материалы, свойства которых соответствуют классическим сегнетоэлектрикам (КСЭ), сегнетоэлектрикам с размытым фазовым переходом (СЭ с РФП), сегнетоэлектрикам-релаксорам (СЭР), каждый из которых находит своё применение в различных отраслях пьезотехники и электроники. В связи с вышесказанным актуальным представляется подробное изучение СЭ свойств многокомпонентных твёрдых растворов, при их эволюции в рамках многокомпонентной системы.

Система ТР $0,98(x\text{PbTiO}_3 - y\text{PbZrO}_3 - z\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3) - 0,02\text{PbGeO}_3$ была изучена пятью сечениями, расположенными на фазовой диаграмме (ФД) вдоль осей, одна из которых отражала бинарную систему PZT, вторая – систему PMN-PT. Сечения соответствовали содержанию $\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3$, PbZrO_3 5 и 10 мол. %, соответственно, и постоянному отношению концентрации $\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3$ и PbZrO_3 .

В работе показано, что добавление даже малой концентрации PMN (5 мол.%) в систему приводит к увеличению значения действительной части диэлектрической проницаемости (ϵ') в максимумах и их размытию при фазовом переходе (ФП) из СЭ в параэлектрическое состояние (см. рис.). При увеличении концентрации PMN до 10 мол.%, ϵ' уменьшается, её размытие усиливается, ТР проявляют характер СЭ с РФП во всём исследованном диапазоне значений титаната свинца. Будучи смешанными в равных пропорциях, PbZrO_3 и $\text{PbNb}_{2/3}\text{Mg}_{1/3}\text{O}_3$ придают ТР свойства, наиболее близкие к свойствам керамик PZT. При дальнейшем увеличении концентрации PMN «поведение» ϵ' при изменении температуры и частоты при ФП становится релаксорным, процесс её релаксации отклоняется от дебаевского типа.

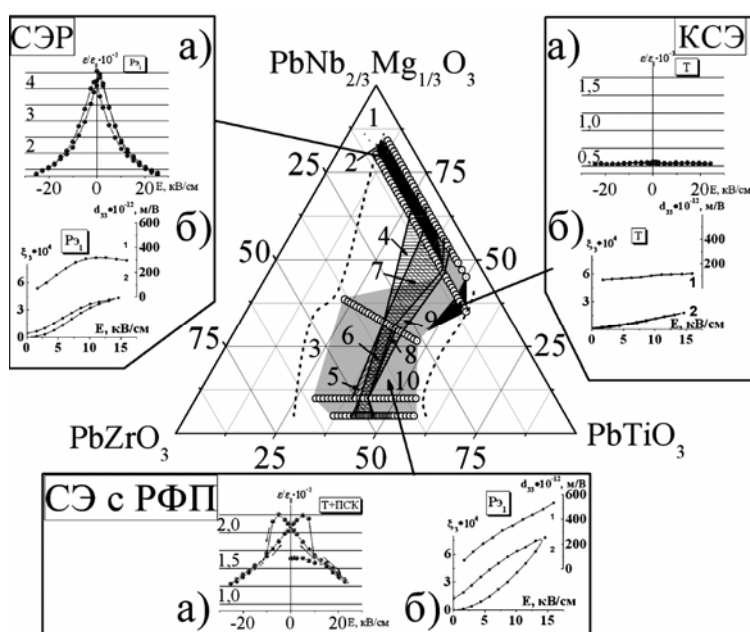


Рис. ФД системы с областями локализации ТР, проявляющих различные характеры свойств - КСЭ, СЭ с РФП и СЭР. На вставках показаны характерные зависимости (а) реверсивной нелинейности, (б) обратного пьезомодуля d_{33} (1) и полуциклов петель электромеханического гистерезиса (2) от амплитуды напряженности E постоянного электрического поля. Цифрами обозначены области сосуществования различных фаз: 1 – К; 2 - К + Рэ; 3 – Рэ; 4 - Рэ + ПСК; 5 - Рэ + М; 6 - Рэ + М + ПСК + Т; 7 - Рэ + ПСК + Т; 8 - М + ПСК + Т; 9 - ПСК + Т; 10 - Т

Получение, структурные и пьезодиэлектрические свойства керамик твердых растворов $(1-x)\text{BiFeO}_3$ - $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ ($x=0.1\div 0.5$)

А.В. Павленко, Л.А. Шилкина, И.А. Вербенко

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университет, Ростов-на-Дону, Россия.

Интенсивные поиски новых материалов, сочетающих сегнетоэлектрические и магнитные свойства, привели в последние годы к исследованиям различных систем твердых растворов (ТР) на основе высокотемпературных мультиферроиков BiFeO_3 [1] и $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ [2]. Целью настоящей работы стало установление закономерностей фазообразования и формирования диэлектрических свойств при $T=(30\div 700)^\circ\text{C}$ керамик бинарной системы, компонентами которой являются вышеуказанные соединения.

Образцы ТР составов $(1-x)\text{BiFeO}_3$ - $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ ($x=0.1\div 0.5$, $\Delta x=0.025\div 0.1$) получены по обычной керамической технологии (твердофазный синтез, спекание без приложения давления). В качестве исходных реагентов использовали оксиды Bi_2O_3 , PbO , Nb_2O_5 , Fe_2O_3 высокой степени чистоты (ч, чда). Рентгеноструктурные исследования образцов проводили на дифрактометре Дрон 3. Измерения комплексной диэлектрической проницаемости ($\epsilon^* = \epsilon' - i\epsilon''$, где ϵ' и ϵ'' – действительная и мнимая части) проводили с помощью LCR-метра Agilent 4980A. Измерения электрофизических параметров: $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$ – относительной диэлектрической проницаемости поляризованных образцов, $|d_{31}|$ и d_{33} – пьезомодулей, K_p – коэффициента электромеханической связи планарной моды колебаний, Q_m – механической добротности; – осуществляли в соответствии с ОСТ 11 0444-87.

Рентгенофазовый анализ подтвердил беспримесность образцов ТР с ромбоэдрической (при $x=0.1\div 0.4$) и псевдокубической (при $x=0.5$) структурами. На рис. представлены зависимости $\epsilon'/\epsilon_0(T)$ и $\epsilon''/\epsilon_0(T)$ (ϵ_0 – диэлектрическая постоянная) исследуемых керамик при $T=(30\div 700)^\circ\text{C}$ на частоте $f=10^6$ Гц.

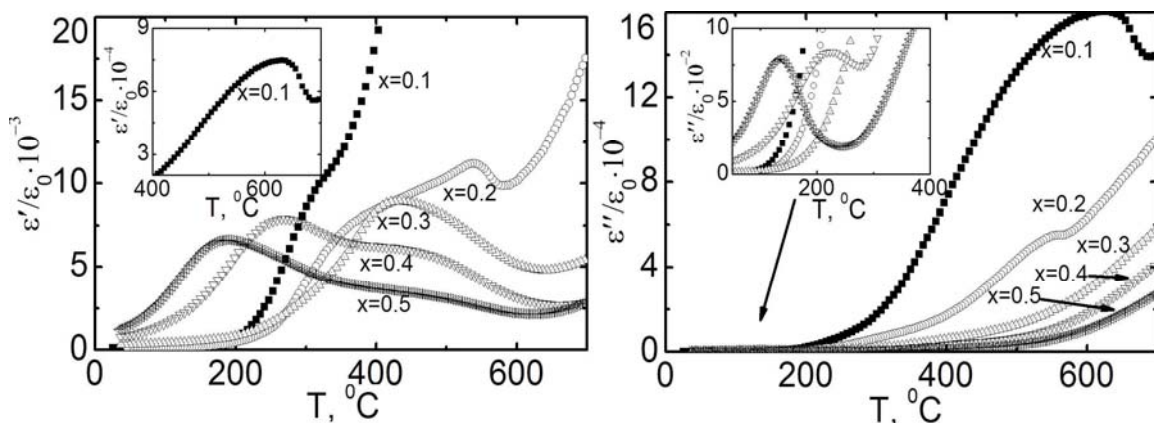


Рис. Зависимости $\epsilon'/\epsilon_0(T)$ и $\epsilon''/\epsilon_0(T)$ керамик $(1-x)\text{BiFeO}_3$ - $x\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ ($x=0.1\div 0.5$, $\Delta x=0.1$), $f = 10^6$ Гц.

Видно, что во всех объектах наблюдается сложная температурная зависимость диэлектрических параметров. С ростом концентрации $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ отмечается снижение температуры максимума $\epsilon'/\epsilon_0(T)$, T_C , с 631°C до 188°C и уменьшение значения $\epsilon'/\epsilon_0(T_C)$ с 74900 до 6620, соответственно. Аналогичное поведение имеет место и в случае $\epsilon''/\epsilon_0(T)$. В рамках работы осуществлена поляризация керамик, в результате которой отмечено появление пьезоэлектрических откликов при комнатной температуре в ТР с $x=0.3\div 0.5$, которые остаются стабильными в течение длительного времени только в ТР 0.70BiFeO_3 - $0.30\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ ($\epsilon_{33}^T/\epsilon_0=320$, $|d_{31}| = 10$ пКл/Н, $d_{33}= 20$ пКл/Н, $K_p=0.10$, $Q_m=380$).

1. К.П. Андрушин, А.А. Павелко, А.В. Павленко и др. ПЖТФ. Т. 37. В.13. С.54-61 (2011).
2. И.О. Троянчук, М.В. Бушинский, А.Н. Чобот и др. ЖЭТФ №134, С.291 (2008)

Влияние оксида марганца на электроупругие характеристики бесвинцовых сегнетопъезоматериалов на основе системы $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$ в силовых режимах

Х.А. Садыков¹, А.Г. Абубакаров², И.А. Вербенко¹

¹ Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

² Чеченский государственный университет, Грозный, Россия

Вследствие значительной токсичности соединений свинца в последние годы идёт интенсивный поиск альтернативных материалов. Предпосылками для подобных усилий послужило формирование новой законодательной базы [1]. В то же время, несмотря на достигнутые успехи в поиске новых бесвинцовых сегнетопъезоэлектрических материалов (СПКМ), их поведение в силовых режимах, знание которого необходимо для использования в высоковольтных пьезоэлектрических преобразователях, изучено явно недостаточно. Настоящая работа посвящена исследованию влияния добавок MnO_2 на поведение электроупругих характеристик керамик на основе $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$ в высоких электрических полях.

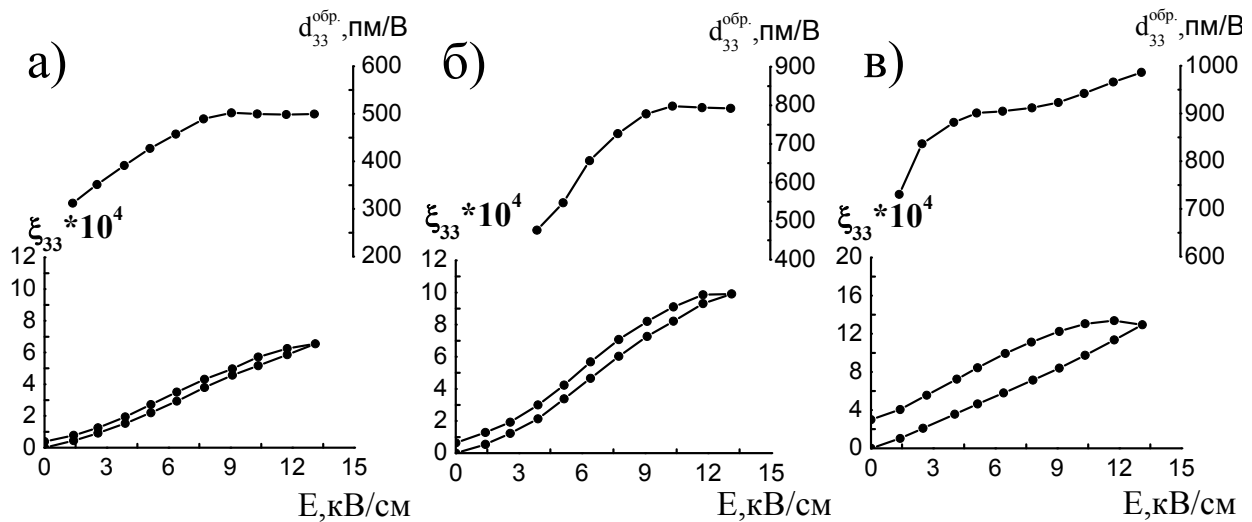


Рисунок. Зависимости обратного пьезомодуля d_{33}^{obr} и полуциклов петель электромеханического гистерезиса от амплитуды напряженности E постоянного электрического поля модифицированных MnO_2 керамик (а – 1% масс. MnO_2 ; б – 2% масс. MnO_2 ; в – 1% масс. MnO_2).

На рисунке изображены зависимости обратного пьезомодуля d_{33}^{obr} и полуциклов петель электромеханического гистерезиса от амплитуды напряженности E постоянного электрического поля, характерные для образцов с относительно низкой проводимостью и высокой электрической прочностью. Как видно из рисунка, зависимости $d_{33}^{obr}(E)$ оказались близкими по своему поведению и аналогичными наблюдаемым в сегнетожестких материалах, но, судя по тому, что $d_{33}^{obr}(E)$ смещается в область низких полей, можно говорить о снижении сегнетожесткости при увеличении концентрации MnO_2 .

Высокие значения $d_{33}^{obr}(E)$ изученных керамик делают их перспективными основами для разработки нового поколения экологически безопасных высоковольтных электромеханических преобразователей.

1. DIRECTIVE 2002/95/EC., Of. J. Euro. Union. **37**, 19 (2003).

Нейтроннографические исследования кристаллической и магнитной структуры $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{1-x}\text{Mn}(\text{Fe})_x\text{O}_3$

В.В.Сиколенко^{1,2}, И.О.Троянчук³, В.В.Ефимов², Д.В.Карпинский³

¹ Технологический Институт Карлсруэ, Германия

² Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Белоруссия

Структурные и магнитные свойства $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ были исследованы методом дифракции тепловых нейтронов. Было обнаружено, что при охлаждении от температур ниже комнатной происходит кристаллоструктурное превращение без изменения симметрии, для составов с $x > 0.5$ в рамках орторомбической пространственной группы Imma , для составов с $x < 0.5$ в рамках моноклинной группы I2/a . Фазовые превращения обусловлены активной ролью внутренних электронных оболочек празеодима в образовании химической связи. Представлена модель, описывающая поведение этих фаз.

Киральная спиновая жидкость в двумерном спиральном XY магнетике

А. О. Сорокин¹, А. В. Сыромятников¹

¹ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

Критическое поведение классического XY спирального магнетика описывается двумя параметрами порядка, магнитным и киральным, соответствующими нарушению $Z_2 \otimes SO(2)$ симметрии. Особенностью этой системы является одновременное вырождение основного состояния относительно и непрерывной $SO(2)$, и дискретной Z_2 групп симметрии, соответствующие переходам Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ) и Изинга. Основной вопрос заключается в том, происходят ли данные переходы при одной температуре или при разных, и в какой последовательности, а также не возникает ли критического поведения нового типа, отличного от критического поведения переходов БКТ и Изинга.

Мы провели анализ этой модели методом Монте-Карло [1]. Мы рассмотрели антиферромагнетик на квадратной решетке с ферромагнитным обменом спинов J с ближайшими соседями вдоль одного направления решетки и с двумя конкурирующими антиферромагнитными обменами J_1 и J_2 вдоль другого направления с $J_2/J_1 > 0.25$. Мы показали, что спиральный порядок основного состояния разрушается двумя последовательными переходами, первый из которых является переходом типа БКТ, а второй – изинговского типа. При этом в диапазоне температур между переходами возникает фаза киральной спиновой жидкости, в которой отсутствует (квази) дальний магнитный порядок, но киральный параметр порядка отличен от нуля.

Мы также исследовали более сложную модель, в которой ферромагнитный обмен J заменен двумя конкурирующими антиферромагнитными обменами J_1 и J_3 . При условии $J_3/J_1 > 0.25$ возникает еще один киральный параметр порядка. Однако в этой модели переходы по всем трем параметрам порядка происходят при одной температуре, причем этот переход первого рода.

1. A.O. Sorokin, A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B., в печати.

Исследования низкочастотной области колебательного спектра бычьего сывороточного альбумина и альфа-лактальбумина с помощью неупругого рассеяния нейтронов

С.В. Строков^{1,2}, А.В. Сванидзе¹, Jan Peter Embs³, S. Gvasaliya⁴, С.Г. Лушников¹

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

² Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland

⁴ Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETH), Zurich, Switzerland

Механизм функционирования белков является одной из ключевых проблем при изучении жизнедеятельности живых систем. Для его анализа принципиальным является возможность исследования динамики белков и ее изменения при воздействии внешних факторов. В последнее время интерес исследователей привлек низкочастотный диапазон собственных колебаний белков ($\nu < 1000$ ГГц). Это связано с тем, что динамика биополимеров в диапазоне частот от 1 до 1000 ГГц обычно отражает локальные конформационные изменения, т.е. прыжки атомов от одной конфигурации к другой, и коллективные возбуждения. Динамика биополимеров в этом диапазоне частот имеет много общего с динамикой стекол, переохлажденных жидкостей и других конденсированных сред. Например, в колебательном спектре белков обнаружены бозонный пик, быстрые ангармонические движения, подобные быстрой пикосекундной релаксации в стеклах, фрактон и др. Более того, делаются попытки определить температуру динамического (или стекольного) фазового перехода T_g в ряде биополимеров в низкотемпературной области [1]. Все это определяет широкое использование спектроскопических методов изучения низкочастотной динамики белков, и, в том числе, с использованием рассеяния нейтронов.

В данной работе исследования проводились с помощью времяпролетного спектрометра прямой геометрии FOCUS (Швейцария), а в качестве объектов исследования были выбраны бычий сывороточный альбумин (БСА) и альфа-лактальбумин. Измерения проводили в диапазоне температур от 100 до 300К. По результатам экспериментов была построена обобщенная функция плотности колебательных состояний для каждого из исследуемых белков при различных температурах. Основным интересом для нас представляли результаты экспериментов именно в низкочастотной области колебательного спектра белков. Анализ низкочастотной области $S(Q, \omega)$ подтвердил существование бозонного пика в изучаемых белках. Показано, что частота максимума бозонного пика меняется при изменении температуры. Анализируется поведение бозонного пика в окрестности динамического фазового перехода.

1. Iben I.E.T., Braunstein D., Doster W., et.al. Glassy behavior of a protein // Phys. Rev. Lett. – 1989. – V. 62. – № 16. – P. 1916-1919.

Аномальное поведение диэлектрической проницаемости гетерофазных сегнетоэлектриков-релаксоров в электрических полях: эксперимент и теория

М. В. Таланов

Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

Материалы на основе сегнетоэлектриков-релаксоров (СЭР) отличаются уникальными, с точки зрения, практических применений свойствами: гигантскими значениями относительной диэлектрической проницаемости ϵ/ϵ_0 и пьезоэлектрических откликов. Кроме того, одной из ярких особенностей этих высокоэффективных материалов является высокая степень нелинейности ϵ/ϵ_0 , характеризующаяся важным для целого ряда применений (фазовращатели, фильтры и т.д.) параметром – управляемостью. Ранее [1], при исследовании зависимостей $\epsilon/\epsilon_0(E)$ (E – величина напряженности постоянного электрического поля) многокомпонентных гетерофазных керамик на основе СЭР и титаната свинца нами были обнаружены платообразные участки на прямых ходах ϵ/ϵ_0 . Обнаруженные аномалии связались нами с индуцированным электрическим полем фазовым переходом в нормальное сегнетоэлектрическое состояние и сопровождающим его эффектом механического зажатия доменов [2]. Целью данной работы явилось построение теоретической модели обнаруженных ранее аномалий в изучаемых объектах и ее экспериментальная проверка.

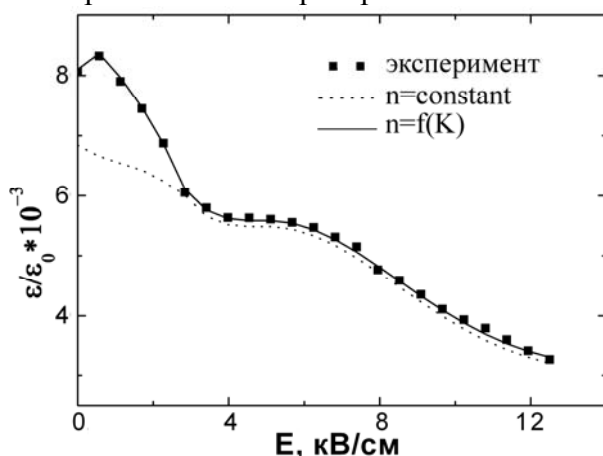


Рис. 1. Зависимости $\epsilon/\epsilon_0(E)$ изучаемого СЭР. Маркерами обозначены экспериментальные точки, пунктирной линией – расчетная зависимость с учетом постоянного n (сдвинута вниз на 100), сплошная линия – с учетом n , зависящего от K .

Для описания экспериментальных данных предложена модель, основанная на вкладе в величину ϵ/ϵ_0 двух процессов, протекающих в материале при увеличении E : переориентации полярных областей (ПО) и их роста. Для описания первого процесса была рассмотрена функция распределения ПО по коэрцитивным полям. Вклад второго процесса объяснялся относительным изменением содержания фаз (тетрагональной и псевдокубической) при увеличении E . При этом предполагалось, что ПО обладают тетрагональной симметрией, а матрица, в которой они расположены, – псевдокубической. Кроме того, был введен параметр n , характеризующий степень зажатия. На рисунке приведено сравнение экспериментальных данных с расчетными. При $n=\text{const}$, фактически описывается зависимость $\epsilon/\epsilon_0(E)$ механически зажатого образца. Однако, наилучшее согласие с экспериментом достигается при рассмотрении n , пропорционального коэффициенту электромеханической связи (K), рассчитанному для соответствующих значений E . Таким образом, предложенная модель, качественно согласующаяся с экспериментом, описывает аномалии на зависимостях $\epsilon/\epsilon_0(E)$ гетерофазных СЭР.

1. М.В. Таланов, Л.А. Шилкина, Л.А. Резниченко, ФТТ. **54**, 930 (2012).
2. M.E. Drougard, D.R. Young, Phys. Rev. **94**, 1561 (1954).

Магнитное состояние структурно-расслоенного $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{2.85}$

С.В. Труханов¹, А.В. Труханов¹, А.Н. Васильев², А.М. Балагуров³

¹Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, Минск, Белоруссия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет), Москва, Россия

³Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

Ранее нами было установлено, что увеличение концентрации вакансий кислорода в $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{3-x}$ приводит к его структурной перестройке [1]. Так, кристаллическая структура стехиометрического состава ($x = 0$) соответствует ромбоэдрической пространственной группе $R\bar{3}c$ с небольшой ($\sim 10\%$) примесью ромбической фазы $Rnma$. При увеличении x до 0.1 структура становится чисто ромбоэдрической, а при $x = 0.15$ дополнительно возникает фаза с тетрагональной (пр. гр. $I4/mcm$) структурой. Наконец, при $x = 0.2$ остается только тетрагональная модификация структуры. В работе [2] на основании данных нейтронографических исследований было установлено, что состав $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{2.85}$ состоит из двух (ромбоэдрической и тетрагональной) перовскитоподобных фаз, занимающих примерно равные объемные доли образца. Вакансии кислорода обнаруживаются в основном в тетрагональной фазе в позиции $O2$ с координатами близкими к $(1/4, 3/4, 0)$, т.е. в основном именно эта фаза является анион-дефицитной. Считается, что причиной такого типа фазового расслоения является кластеризация вакансий кислорода. При комнатной температуре объем элементарной ячейки ромбоэдрической фазы $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{2.85}$, приходящийся на одну формульную единицу, немного меньше (на 0.27%) объема ячейки тетрагональной фазы. Октаэдры MnO_6 , регулярные в ромбоэдрической фазе, искажаются в тетрагональной фазе (удлиняется апикальное расстояние $\text{Mn}-O1$ вдоль длинной оси), но отклонение от средней длины связи весьма невелико, примерно в 3 раза меньше, чем в LaMnO_3 . Таким образом, в тетрагональной фазе присутствует кооперативный статический эффект Яна-Теллера, хотя и сравнительно слабо выраженный. С уменьшением температуры структура обеих фаз практически не меняется. Единственным заметным фактом является небольшое удлинение c -оси тетрагональной фазы (и, соответственно, расстояния $\text{Mn}-O1$), т.е. некоторое усиление эффекта Яна-Теллера.

Результатами многочисленных экспериментальных исследований доказано, что в орбитально-разупорядоченном состоянии сверхобменное взаимодействие $\text{Mn}^{3+}(6)-O-\text{Mn}^{3+}(6)$ для октаэдрической координации катионов марганца является положительным, тогда как для пентаэдрической координации $\text{Mn}^{3+}(5)-O-\text{Mn}^{3+}(5)$ оно отрицательно (см., например, [3,4]), т.е. способствует параллельной или антипараллельной ориентации спинов, соответственно. Конкуренция этих взаимодействий приводит к фрустрации обменных связей и образованию нового магнитного состояния - спинового стекла. При кластеризации содержащихся в $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{2.85}$ вакансий кислорода происходит расслоение на две структурные фазы, с сильной конкуренцией ферро- и антиферромагнитных взаимодействий между магнитными моментами Mn . Как результат, возникает новое магнитное состояние - кластерное спиновое стекло, что отчетливо прослеживается в полевых зависимостях характерных температур: магнитного упорядочения, замерзания магнитных моментов и расходимости ZFC- и FC-кривых [2]. Используя магнитный критерий, предложенный Банерджи, при обработке полевых изотерм удельного магнитного момента [2], можно сделать вывод, что магнитный фазовый переход в парамагнитное состояние для $\text{La}_{0.70}\text{Sr}_{0.30}\text{MnO}_{2.85}$ является термодинамическим фазовым переходом II рода.

1. С.В. Труханов, И.О. Троянчук, А.В. Труханов и др., Письма в ЖЭТФ **84**, 310 (2006).
2. Труханов С.В., Труханов А.В., Васильев А.Н. и др., ЖЭТФ **140** (5), 942 (2011).
3. K.R. Poeppelmeier, M.E. Leonowicz, J.M. Longo, J. Solid State Chem. **44**, 89 (1982).
4. I.O. Troyanchuk, D.D. Khalyavin, S.V. Trukhanov et al., Письма в ЖЭТФ **70**, 583 (1999).

Магнитодиффузионный эффект при гетеродиффузии в железе в импульсном магнитном поле

А.В. Покоев, А.А. Федотов

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Эффект влияния внешних переменных и импульсных магнитных полей (МП) на процессы переноса атомов в кристаллической решетке, может успешно применяться в качестве инструмента контролируемого воздействия и управления как диффузионными процессами, так и структурными изменениями в металлах и сплавах. Ранее в работах [1,2] установлено, что наложение переменного МП приводит к существенному увеличению диффузионной зоны при взаимной диффузии в системе алюминий-железо и изменению коэффициента диффузии примеси при гетеродиффузии алюминия в железе. Полного однозначного объяснения физической природы наблюдаемых закономерностей не было найдено. Характер влияния МП на кинетику диффузионных процессов может определяться магнитными свойствами диффундирующих примесных атомов, а также, как показывают опыты, магнитными свойствами и структурным состоянием самой матрицы диффузии. В результате изучения магнитодиффузионного эффекта (МДЭ) при гетеродиффузии Al в Fe [2] и Be в Fe, выполненных рентгеновским методом, в измерена частотная зависимость коэффициента диффузии (КД) для пар Al-Fe и Be-Fe при температурах 730, 740 и 750 °С. Полученные результаты позволяют предположить о существовании нескольких механизмов изменения скорости диффузии атомов: 1. Механизм взаимодействия диффундирующих атомов с движущимися доменными стенками; 2. Механизм изменения частоты атомных перескоков по вакансиям; 3. Механизм переориентации парных точечных дефектов в решетке твердых растворов замещения под действием механических напряжений, известный как релаксация Зинера. По нашему мнению, в последнем случае импульсные механические напряжения возникают при магнитострикционных колебаниях решетки, вызванных импульсным МП. Однако сведения о температурной и концентрационной зависимости констант магнитострикции и магнитной анизотропии железа в литературе весьма ограничены.

Несмотря на узость температурного интервала измерений, полученные данные позволяют оценить значение параметров арениусовской зависимости и энергии активации для времени релаксации парных комплексов, коэффициентов пропорциональности между временем оседлой жизни атомов и временем релаксации, которые согласуются с общепринятыми представлениями о релаксационных процессах диффузионной природы в твердых растворах замещения.

1. В.В. Дубоделов, С.Н. Захаров, В.Ф. Мазанко и др. // *Материаловедение* **12**, 27 (2003).
2. A.V. Pokoev, M.A. Verjakovskaya. *Defect and Diffusion Forum* **289-292**, 323 (2009).

Скрытый фазовый $\gamma \rightarrow \alpha$ переход в церии

А.В. Николаев^{1,3}, А.В. Цвященко^{2,3}, А.И. Величков⁴, А.В. Саламатин⁴, Л.Н. Фомичева²,
Г.К. Рясный³, А.А. Сорокин³, О.И. Кочетов⁴, М. Будзинский⁵ и К.Г. Мишел⁶

¹Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН, Москва, Россия

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия

³НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, МГУ, Москва, Россия

⁴Объединенный Институт ядерных исследований, Дубна, Россия

⁵Institute of Physics, M. Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

⁶Department of Physics, University of Antwerp, Antwerpen, Belgium

Аллотропные формы одного и того же элемента обычно характеризуются разными группами пространственной симметрии. Однако, в церии обнаружены две термодинамически стабильные фазы – γ и α , которые обладают одной и той же гранецентрированной кубической (гцк) решеткой и отличаются только значением ее постоянной. Для объяснения существования этих двух фаз было выдвинуто много теоретических моделей, в которых выделялись различные факторы, ответственные за их формирование. Среди этих моделей¹ была выдвинута теория квадрупольного упорядочения,^{2,3} которая в отличие от остальных подходов утверждала, что этот переход является скрытым структурным переходом $Fm\bar{3}m(\gamma\text{-Ce}) \rightarrow Pa\bar{3}(\alpha\text{-Ce})$, и предлагала проверить этот вывод экспериментальным образом. В данной работе мы приводим краткий обзор теории квадрупольного упорядочения и экспериментальных данных Цвященко с соавторами,^{4,5} которые подтвердили эту теорию и обнаружили, что фазовый переход от $\gamma\text{-Ce}$ к $\alpha\text{-Ce}$ не является изоструктурным.

1. Elisashberg, G. and Capellmann, H., *JETP* **67**, 125 (1998).
2. Nikolaev, A.V. and Michel, K. H., *Eur. Phys. J. B* **9**, 619 (1999).
3. Nikolaev, A.V. and Michel, K. H., *Phys. Rev. B* **66**, 054103 (2002).
4. Tsvyashenko, A. V. *et al.*, *Phys. Rev. B* **82**, 092102 (2010).
5. Tsvyashenko, A. V. *et al.*, *JETP* **111** 627 (2010).

Определение составов сосуществующих фаз в бинарных системах методом сопровождающих парабол

А.Ю.Захаров¹, А. А. Шнайдер¹

¹Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Новгород, Россия

Определение составов сосуществующих фаз в бинарных системах является частью задачи о построении фазовых диаграмм многокомпонентных систем, и потому, имеет важное прикладное значение. Аналитического решения данной задачи не найдено, а различные численные методы, разработанные для решения этой проблемы [1] требуют выполнения большого числа итераций для получения необходимых экспериментаторам точностей составов. Мы хотим представить метод быстрого нахождения составов сосуществующих фаз в бинарных системах, который основан на точном нахождении общих касательных к последовательности пар парабол, аппроксимирующим свободную энергию на участках вогнутости, разделённых участком выпуклости.

Свободная энергия $\Phi(x)$ бинарной системы при постоянном объеме V или давлении P и температуре T является функцией только состава системы x . Равновесные фазовые составы в бинарной системе определяются, как точки касания общей касательной (коноды) с графиком кривой свободной энергии $\Phi(x)$. Таким образом, проблема нахождения составов сосуществующих фаз в бинарной системе сводится к чисто математической задаче поиска коноды к данной функции $\Phi(x)$.

Представляемый нами алгоритм решения задачи состоит в следующем [2]:

1. В каждом из участков вогнутости графиков функции $\Phi(x)$ в нулевом приближении выбирается по одной точке $x_1^{(0)}$, $x_2^{(0)}$.

2. Составляются уравнения парабол, аппроксимирующих кривую $\Phi(x)$ в точках $x_1^{(0)}$ и $x_2^{(0)}$, соответственно.

3. Точно аналитически решается задача обнаружения концов коноды аппроксимирующим параболам.

4. Абсциссы концов коноды $x_1^{(1)}$ и $x_2^{(1)}$, к аппроксимирующим параболам выбираются в качестве начальных в первом приближении.

Выполнение итераций прекращается по достижении заданной точности.

Для реализации алгоритма была написана короткая программа в оболочке Mathematica 5.0, вывод результатов для удобного графического представления был осуществлён в Excel. Применение метода к ряду модельных потенциалов (потенциал в полиномиальной форме, потенциал Ван-дер-Ваальса, потенциал Редлиха-Кистера) показало уверенную работоспособность метода. Для нахождения точек касания с точностью 10^{-4} достаточно не более трёх итераций. Каждая из итераций состоит в точном вычислении значений функции $\Phi(x)$, ее первой и второй производной в начальных точках $x_i^{(n)}$, а затем, с их помощью $x_i^{(n+1)}$.

1. M. Hillert. Phase equilibria, phase diagrams and phase transformations. Cambridge e.a.: Cambridge University Press, 2008.
2. А. А. Шнайдер, Вестник НовГУ, **65**, (2011), стр. 43-47.

Секция «Методика»

Исследование структуры никель фталоцианина методами рентгеновской абсорбционной спектроскопии и теории функционала плотности

*Л. А. Авакян¹, А.С. Манукян², А.А. Мизарханян², Е.Г. Шароян², Я.В. Зубавичус³, А.Л. Тригуб³,
Н.А. Колпачева¹, Л.А.Бугаев¹*

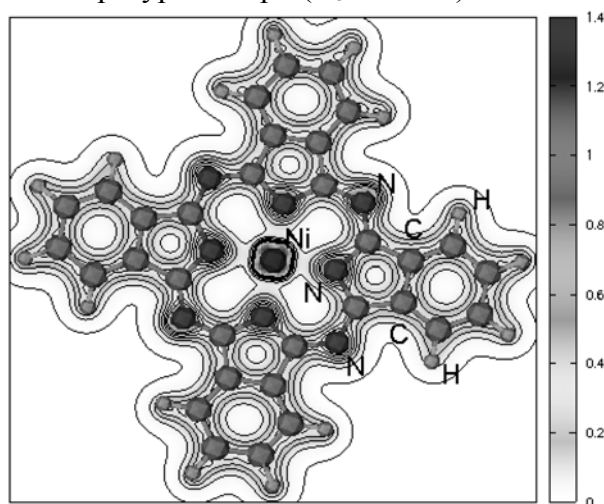
¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

² Институт физических исследований Национальной академии наук Армении, Аштарак, Армения

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Металл фталоцианины ($\text{MPC} \equiv \text{MC}_{32}\text{H}_{16}\text{N}_8$) представляют большой интерес, в основном, благодаря своему сходству с такими биологическими молекулами как хлорофилл и гемоглобин. За последнее время было синтезировано множество металл фталоцианинов [1], которые могут быть использованы в нелинейной оптике, медицине, солнечной энергетике и в качестве высокостабильных красителей. Знание атомной структуры металл фталоцианинов очень важно при исследовании их электронной и магнитной структур. В частности, недавно было обнаружено, что Ni фталоцианин (NiPC), допированный атомами щелочных металлов, приобретает ферромагнитные свойства с необычно высокой для такого типа соединений температурой Кюри ($T_C \sim 300 \text{ K}$).

Атомная структура NiPC была исследована еще в 1936 г. методами рентгеновской дифракции, которыми были установлены параметры решетки, симметрия и позиции неэквивалентных атомов. Более поздние рентгенографические данные для родственных соединений, а также квантово-механические расчеты на базе теории функционала плотности (ТФП), подтверждают общие выводы о симметрии этого соединения, но дают несколько иные координаты атомов, в частности, длина Ni-N связи превышает ранние данные и составляет $\sim 1.9 \text{ \AA}$.



Для снятия этого противоречия, а также для разработки методов исследования структуры допированных образцов были проведены измерения и анализ Ni K-XAFS спектров соединения NiPC , а также моделирование отдельной молекулы методами ТФП.

В результате количественного анализа Ni K-XAFS спектров, включающего в себя Фурье-преобразование и последующую многопараметрическую подгонку вкладов от различных путей рассеяния, был уточнен радиус первой координационной сферы поглощающего атома Ni и оценены радиусы двух последующих координационных сфер. Первопринципные расчеты, проведенные на основе теории функционала плотности с помощью программы ABINIT [2], использующей разложение Кон-Шэммовской волновой функции на плоские волны и нормосохраняющие псевдопотенциалы, учитывающие химически пассивные электроны атомных остовов, подтвердили полученные результаты.

1. N. V. McKeown. *Phthalocyanine Materials: Synthesis, Structure and Function*. Cambridge University Press, 1998

2. ABINIT Software Project <http://www.abinit.org>

Создание монохроматоров мягкого рентгеновского излучения на ленгмюровских пленках для дифрактометров и спектрометров WAXS, SAXS и EXAFS

М.Е. Бойко¹, А.М. Бойко¹, М.Д. Шарков¹, Н.С.Белякова², В.В.Руцкая³

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

² Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский Академический университет – НОЦ Нанотехнологий РАН, Санкт-Петербург, Россия

При исследовании вещества рентгеновскими методами возникают проблемы, связанные с потерей центра инверсии и неопределенностью, обусловленной дифракцией рентгеновских лучей на скачках электронной плотности. Если стандартные рентгеноструктурные исследования (WAXS) связаны с рентгеновской дифракцией на кристаллографических плоскостях, то при изучении микро- и наноструктур для характеристики образца требуются применять иные методики, реализуемые обычно на источниках синхротронного излучения. И, прежде всего, это – метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР=SAXS).

Для преодоления упомянутой неопределенности (Babinet) необходимо проводить исследования с использованием излучения с длинами волн выше и ниже края поглощения атомов, содержащихся в материале. Чтобы охватить образцы в максимальном диапазоне атомарного состава, недостаточно применять только традиционные монохроматоры типа Si (111) или Ge (220), позволяющие использовать рентгеновское излучение с энергиями только выше 1980 eV и 1550 eV соответственно.

Многослойные пленки с периодом порядка 5-6 nm позволяют получать монохроматические пучки мягких рентгеновских лучей, энергии которых достигают 210 eV возле длинноволновой границы диапазона. Это позволяет получать спектры поглощения на К-краях легких элементов (от бора и тяжелее). Эксперименты проводятся в ФТИ на рентгеновском источнике с вращающимся анодом Rigaku Ultrax 18NB.

Подобные монохроматоры мягкого рентгеновского излучения могут быть реализованы на основе пленок Ленгмюра-Блоджетт (ПЛБ). Их можно использовать также для измерения XANES- и EXAFS-спектров веществ из легких элементов и при вакуумных малоугловых рентгеновских измерениях крупных кристаллитов, где важно увеличение разрешения SAXS-спектра по волновому вектору (в т.ч. для органических соединений).

Отбор ПЛБ проводился по направлениям как кристаллографического совершенства по всей поверхности образца (10x15 mm), так и отбора одинаковых образцов.

Применение метода SAXS было необходимо, так как область рассеяния вблизи падающего пучка дает размерную информацию как о периодичности, фрактальной размерности, 3D-размере для кристаллитов (доменов и пор), так и о размерах крупнейших однородных фаз и толщин интерфейсов и границ наноразмерных пленок.

В результате исследований было установлено, что у выбранных ПЛБ бегената бария периодичность слоев параллельно поверхности равна 6 nm (с точностью до 0.1 nm). Высокая отражательная способность монохроматоров достигнута за счет большого количества - 10 и более слоев, содержащих тяжелый атом бария.

Показано, что с помощью таких монохроматоров могут быть исследованы объекты не только нано-, но и микронных размеров.

1. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние // Д.И.Свергун и Л.А.Фейгин // Москва, Наука 1986
2. Бойко М.Е., Бойко А.М. Grazing-Incidence Small-Angle X-Ray Scattering (GISAXS) for Studying Superlattices in Optoelectronic Devices. // 10-ая Европейская конференция по неразрушающему контролю и технической диагностике (10th RSNDT ECNDT). June 7–11, 2010. – М., 2010.

Рентгенографическое исследование ближнего порядка в ксерогеле на основе жидкого стекла, легированном никелем

Н.С. Васильева¹, А.Д. Фофанов¹, Р.Н. Осауленко¹, Е.Ф. Кудина²

¹Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия

²Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого НАН Беларуси, Гомель, Беларусь

Целью работы было выявление структурных изменений в ксерогеле на основе жидкого стекла при легировании никелем. Образец ксерогеля был получен из водного раствора силиката при дегидратации до постоянного веса при 200°C. В качестве водного раствора щелочного силиката использовали стандартное натриевое жидкое стекло (ЖС, ГОСТ 13078, силикатный модуль $n=2.9\pm 0.1$ плотность $\rho=1.45$ г/см³). Композицию ЖС-Ni получали совмещением модификатора с водным раствором ЖС, после чего смесь дегидратировали, высушивали при 325-330К, диспергировали и просеивали. Исследования атомной структуры проводили методом рентгеноструктурного анализа. Рентгенограммы получены на дифрактометрах типа ДРОН в $\text{Cu-K}\alpha$ и $\text{Mo-K}\alpha$ излучениях. Рентгенографирование проводилось в геометрии на отражение и на просвет в интервале углов 2θ от 2 до 145°.

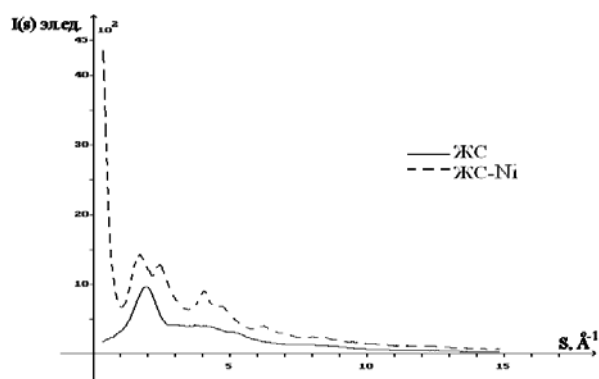


Рисунок 1. Кривые распределения интенсивности рассеяния для исследуемых образцов (излучение $\text{MoK}\alpha$).

Анализ кривых распределения интенсивности рассеяния (см. рис.1) показывает, что образцы рентгеноаморфны и введение в силикатную матрицу ионов Ni^{2+} приводит к значительным изменениям в структуре ксерогеля. Об этом свидетельствует изменение формы основного диффузного максимума и появление дополнительных максимумов. На кривой распределения интенсивности рассеяния от системы ЖС-Ni присутствует значительное рассеяние в области малых углов, чего не наблюдается для исходного ксерогеля. При проведении эксперимента на излучении $\text{CuK}\alpha$ становится видно, что данное рассеяние представляет собой дополнительный диффузный максимум при $S=0.30 \text{ Å}^{-1}$. Данный максимум, возможно, обусловлен когерентным рассеянием регулярно расположенными ультрадисперсными частицами примерно одного и того же размера.

Расчет характеристик ближнего порядка показал, что при легировании никелем характер расположения атомов в области ближнего упорядочения меняется, однако $[\text{SiO}_4]$ -тетраэдры сохраняются. Происходит уменьшение числа атомов на первой сфере O-O, и увеличение числа атомов на первой сфере Si-Si, что свидетельствует об изменении ориентации кремний-кислородных тетраэдров в пространстве. Можно предположить, что ионы никеля внедряются между $[\text{SiO}_4]$ -тетраэдрами и окружают себя атомами кислорода, тем самым, вызывая изменение углов связи Si-O-Si и, возможно, торсионных углов, определяющих взаимную ориентацию соседних кремний-кислородных тетраэдров.

Исследования проведены при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009—2013 гг. № П801 от 24 мая 2010 г.

Анизотропия упругих свойств и остаточные напряжения в реакторных материалах

Р.Н. Васин¹, А.М. Балагуров¹, И.В. Папушкин¹, В.В. Сумин¹

¹ *Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

В работе исследованы структура, кристаллографическая текстура и свойства реакторных материалов: аустенитной стали 12X18H10T (наплавка корпуса реактора ВВЭР-1000), циркониевого сплава Э-110 (заглушки ТВЭЛов реактора ВВЭР-1000) и графита ГР-280 (замедлитель реактора РБМК) [1-3]. По данным дифракции нейтронов восстановлена функция распределения зерен по ориентациям (ФРО) и проведено моделирование объемных упругих свойств этих конструкционных материалов.

Показано, что аустенитная наплавка корпуса реактора ВВЭР-1000 имеет острую аксиальную текстуру (текстурный индекс $F_2 = 8.48$), образованную вращением зерен вокруг нормали к плоскости $\{002\}$ стали, ось текстуры перпендикулярна поверхности корпуса реактора. Соответственно, в этом направлении достигается и минимальное значение модуля Юнга (110.7 ГПа). Объемные упругие свойства демонстрируют высокую анизотропию, что необходимо учитывать при анализе внутренних напряжений в наплавке.

Комплексные нейтронографические и акустические исследования реакторного графита ГР-280 показали, что анизотропия его упругих свойств обусловлена кристаллографической текстурой, сформировавшейся в процессе изготовления графитового блока экструзией. ФРО характеризуется ориентировкой осей 6-го порядка графита перпендикулярно направлению экструзии. Текстурный индекс очень мал: $F_2 = 1.19$, однако рассчитанный коэффициент упругой анизотропии графита ГР-280 составляет 17%. Также наблюдается огромное различие между реальными (измеренными ультразвуковым методом при различных давлениях) и модельными (рассчитанными с помощью усреднения упругого тензора графита по ФРО) скоростями продольных упругих волн. Оно составляет около 5 раз при атмосферном давлении и около 3-х – при 150 МПа. Это обусловлено высокой (21.4% при атмосферном давлении) пористостью материала; при высоких давлениях внутренние поры и трещины в ГР-280 не закрыты полностью [4].

Установлено, что в цилиндрической заглушке ТВЭЛа из сплава Э-110 (Zr+1%Nb) процесс изготовления ротационной ковкой приводит к формированию острой аксиальной текстуры с осью, совпадающей с осью цилиндра. В нагартованной заглушке $F_2 = 3.38$, текстура образована вращением кристаллитов вокруг нормали к плоскости $\{1-40\}$. При отжиге текстура существенно изменяется, текстурный индекс возрастает до $F_2 = 4.04$, ось текстуры смещается на 12° к нормали к плоскости $\{321\}$. Тем не менее, и нагартованная, и отожженная заглушки практически изотропны по своим упругим объемным свойствам. По данным нейтронографических экспериментов с учетом ФРО были рассчитаны остаточные напряжения первого рода в заглушках. В нагартованной детали зарегистрированы растягивающие напряжения ≈ 150 МПа в радиальном направлении. При отжиге напряженно-деформированное состояние детали изменяется: остаточные напряжения в отожженной заглушке близки к нулю.

Работа частично поддержана грантом ОИЯИ для молодых ученых и специалистов 2010 и проектом МНТЦ 3074.2

1. В.В. Сумин, Р.Н. Васин, и др., Атомная энергия. **110**, 78 (2011).
2. T. Lokajicek, P. Lukas, et al., Carbon. **49**, 1374 (2011).
3. V.V. Sumin, I.V. Papushkin, et al., Journal of Nuclear Materials. **421**, 64 (2012).
4. S. Matthies, Journal of Applied Crystallography. **45**, 1 (2012).

Первые эксперименты на установке СЭ-МУРН ПИЯФ

*Е. В. Величко¹, Ю.О. Четвериков¹, Л.А. Аксельрод¹, В.Н. Забенкин¹, В.В. Пиядов¹,
А.А. Сумбатян¹, В.Краан², С.В. Григорьев¹*

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

² Delft University of Technology, JB Delft, The Netherlands

Метод спинового эхо для регистрации малоуглового рассеяния нейтронов (СЭ-МУРН) является комплементарным стандартному методу МУРН, и альтернативным методу ультрамалоуглового рассеяния нейтронов (УМУРН). Высокая светосила метода спинового эхо в ряде случаев позволяет значительно повысить эффективность решения исследовательских задач [1]. В отличие от традиционного метода МУРН, метод спинового эхо находится в состоянии активного развития и обладает высоким инновационным потенциалом. Сейчас в мире работают три СЭМУРН прибора, два из которых расположены на реакторе ТУ Дельфта; один на импульсном источнике нейтронов института ISIS (Великобритания).

Разработка и создание установки СЭ-МУРН в ПИЯФ является особенно актуальной задачей в связи с вводом в эксплуатацию реактора ПИК [2], научная программа которого включает исследования магнитных явлений, молекулярной биофизики и физики атомных кластеров и наноструктур. Спектрометр входит в проект приборной базы реактора ПИК.

Представлены результаты первых экспериментов на установке СЭ-МУРН, построенной в Гатчине на реакторе ВВР-М. СЭ-МУРН является новым методом определения структурных характеристик материалов в реальном пространстве на масштабах $10 - 10^4$ нм. Проведены аттестационные измерения на образцах коллоидных кристаллов SiO₂. Образцы, с диаметром сфер SiO₂ определенным методами сканирующей электронной микроскопии и ультрамалоуглового рассеяния синхротронного излучения, были использованы для калибровки установки. Аппроксимация полученных на СЭ-МУРН данных проводилась автокорреляционной функцией для разбавленных сфер. Полученные методом СЭ-МУРН размеры сфер в пределах ошибки совпадают со значениями, полученными другими методами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 10-02-00634-а).

1. Wim G. Bouwman, Roger Pynn, M. Theo Rekveldt, Physica B 350 (2004) 787–790.
2. Реактор ПИК Проекты нейтронных исследований, экспериментальных установок и оборудования [электронный ресурс]/под редакцией чл. Корр. РАН В. А. Назаренко, ПИЯФ РАН, Гатчина 2002— Режим доступа: <http://nrd.pnpi.spb.ru/sbornik/sbornik.page1.htm>, свободный.— Загл. С экрана.

Моделирование формы рентгеновской линии для случая диффузии из постоянного источника

В. В. Волков, А. В. Покоев

Самарский государственный университет, Самара, Россия

Рассматривается возможность использования рентгеновских лучей для неразрушающей диагностики поверхностного слоя, подвергнутого диффузии. Для этого используется рентгенографический метод, который чувствителен к изменению параметра решётки растворителя, в которой происходит диффузия примеси. Форма рентгеновской линии отражённой от образца, несёт информацию об изменении параметра кристаллической решётки. При этом, используя решение уравнения диффузии для граничных условий постоянного источника, можно получить данные о коэффициенте диффузии. Для случая диффузии азота в железо, т.е. азотирования, рассматривается объёмная диффузия из постоянного источника в поликристаллический образец.

Рентгенографическим методом определяется дифракционная форма рентгеновской линии (ФРЛ), «отражённой» от образца. Алгоритм математического моделирования формы РЛ диффузионно-насыщенного образца, позволяет прогнозировать процесс диффузионного насыщения. Для этого, с учётом атомных констант для данной диффузионной пары, вычисляется концентрационное распределение по глубине образца. Разбивая концентрационный профиль на слои [1], в пределах которых концентрация меняется на одну и ту же величину, можно найти их толщину и глубину залегания. Далее по закону Буггера, вычисляется интенсивность отражения излучения от каждого слоя разбиения с учетом коэффициента поглощения рентгеновских лучей. Зная положения максимумов отражений и их величину, суммированием интенсивностей можно найти результирующую ФРЛ. Таким образом, вся форма линии содержит интенсивность от чистого растворителя, до линии образовавшегося твёрдого раствора, с переменным по глубине [2] параметром решётки. Для численного моделирования использовалась зависимость параметра решётки железа от концентрации азота по закону Вегарда, и была определена константа Вегарда для данной диффузионной пары.

Выполнено моделирование зависимости ФРЛ от температуры на разных стадиях процесса азотирования. Показано, как изменение положения максимума отражения от линии чистого растворителя, соотносится со степенью образования твёрдого раствора. Максимум смещения линии происходит до положения соответствующего пределу растворимости данной компоненты в основе.

Знание предела растворимости даёт значение максимального смещения линии, а это позволит контролировать степень диффузионного насыщения. Показано, что смещение линии пропорционально градиенту концентрации на глубине проникновения рентгеновских лучей. Установлена связь между интенсивностью смещённой компоненты рентгеновской линии и коэффициентом диффузии. Оценена возможность решения обратной задачи.

1. Р. Л. Фогельсон, Я. А. Угай, А. В. Покоев ФТТ **1028**, 13 (1971)
2. Б. Я. Пинес, Э. Ф. Чайковский Доклады Академии наук СССР **1235**, 6 (1956)

Трехкристальный монохроматор с фиксированным поворотом выходного пучка

И. Л. Жогин

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

Предложена схема рентгеновского перестраиваемого монохроматора с тремя кристаллами (обозначены на рис. 1а буквами A, B, C). Причем линия выходящего пучка повернута на угол α относительно входящего пучка (оба лежат в горизонтальной плоскости, а отрезок AC делит этот угол пополам), см. рис. 1а. Первый и последний кристаллы имеют одинаковое межплоскостное расстояние d , и их положение фиксировано. Кристалл B , наоборот, подвижен, и находится посередине, т.е. $|AB|=|BC|$, а его межплоскостное расстояние меньше примерно в два раза: $d^* \approx d/2$. Подходит, скажем, такой набор: 2 x Si-111 и Si-311 (или Ge-311); при этом $k^2 = (d^*/d)^2 = 3/11$. Угол φ , наклон треугольника ABC относительно вертикали, и длина $h=|OB|$ полностью определяют положение кристалла B .

Удобно принять длину отрезка AO за единицу длины: $|AO|=|AC|/2=1$; можно считать, что эта длина сравнима с размерами кристаллов, т.е. порядка 4–5 см.

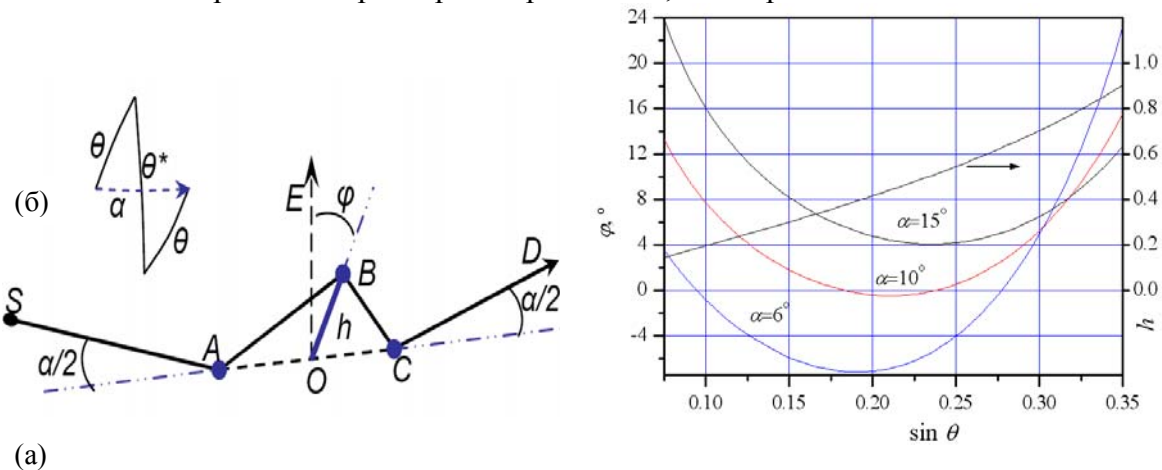


Рис. 1. (а) Схема трехкристального монохроматора; (б) брэгговские углы кристаллов и итоговый поворот пучка; (в) графики $h(\sin \theta)$, а также $\varphi(\sin \theta)$ для разных углов поворота α ($k^2=3/11$).

На рис.1в показаны графики h и φ от угла Брэгга θ (разумеется, $\sin \theta = k \sin \theta^*$):

$$h = \frac{\sin \theta}{\sqrt{k^2 - \sin^2 \theta}}, \quad \sin \varphi = \frac{\sqrt{1 + h^2} \cos 2\theta - \cos \alpha}{h \sin \alpha}.$$

Видно, что даже небольшого хода 1–2 см достаточно для изменения энергии в два-три раза (т.е. можно, например, использовать пьезокерамическую подвижку).

В отличие от двухкристальной схемы общего положения, рассмотренной в [1], в данной схеме три отражения не приводят в итоге к наклону профиля пучка (и поляризации): видно, что на рис.1б два треугольника, образованные дугами $\theta, \theta^*, \theta, -\alpha$, сокращают друг друга. (При таком движении один «треугольник» обходится по часовой стрелке, а другой – против часовой). Кроме относительно простой и симметричной кинематики, достоинством данной схемы является возможность использования разных кристаллов – как кремния, так и германия (для центрального кристалла; германий больше подходит для сагиттальной фокусировки), а также отражений с индексами разной четности.

Предложенный трехкристальный монохроматор дает возможность распределять пучок СИ на несколько соседних станций; это особенно важно для планируемых уникальных источников СИ 4-го поколения типа FEL (лазер на свободных электронах, ЛСЭ).

1. N. Gavrilov, I. Zhogin, M. Sheromov, B. Tolochko, Nucl. Instr. & Meth. A **543**, 375 (2005); arXiv.org/physics/0306191. (Подробности вычислений в препринте arXiv:0805.0393).

Определение кристаллической структуры шести бензимидазолоновых промышленных пигментов по данным порошкового рентгеноструктурного анализа

С. Н. Ивашевская¹, Я. ван де Стрик², М. Шмидт², Ю. Брюнинг²

¹ *Институт Геологии КарНЦ РАН, Петрозаводск, Россия*

² *Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, Goethe University, Frankfurt am Main, Germany*

Определение кристаллической структуры органических пигментов имеет важное прикладное значение, так как многие из них имеют различные полиморфные модификации, а полиморфизм определяет колористические характеристики. Пигменты, содержащие структуру бензимидазольона (как часть компоненты сцепления), относятся к группе бензимидазолоновых. Они покрывают спектр оттенков от зеленовато-желтого до оранжевого и производятся в промышленных масштабах. Эти пигменты имеют отличную устойчивость к свету и атмосферным воздействиям, обладают хорошей кроющей способностью, используются в автомобильной промышленности, для окраски пластмассы и в производстве высококачественных типографских красок [1].

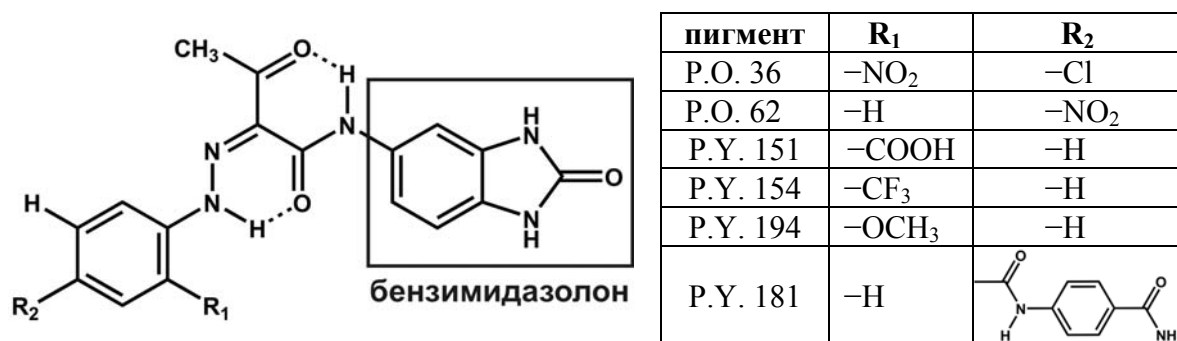


Рис.1. Химическая структура бензимидазолоновых пигментов

Из-за слабой растворимости пигментов не удалось вырастить монокристаллы, пригодные для исследований. Кристаллическая структура была определена и уточнена по данным порошкового рентгеноструктурного анализа с использованием пакетов программ *DASH*, *MRIА* и *TOPAS* [2].

Анализ показал, что хорошие прикладные свойства данных пигментов являются результатом сочетания сильных межмолекулярных Н-связей и упаковки молекул:

пигмент	топология Н-связи бензимидазольона	2 ^{ая} связь N–H бензимидазольона	общая топология Н-связей	упаковка молекул
β-P.O.36	8-колец ¹	ацетил	двойная цепь	слой
P.O. 62	8- колец ¹	ацетил	цепь	слой
P.Y.151	8- колец с COOH	ацетил	цепь	слой
α-P.Y.154	8- колец ¹	ацетил	двойная цепь	гофрированный слой
P.Y. 194	спираль ²	ацетил	2D-сеть	“3D”
β-P.Y.181	спираль ²	CONH ₂	3D-сеть	“3D”

¹ – через центр инверсии, ² – вдоль оси 2₁

1. W. Herbst & K. Hunger Industrial Organic Pigments: Production, Properties, Applications. 3th ed. Weinheim: Wiley-VCH (2004).
2. J. van de Streek, J. Brüning, S. N. Ivashevskaya, M. Ermrich, E. F. Paulus, M. Bolte & M. U. Schmidt Acta Cryst. **B65**, 211(2009).

Развитие методов радиационной интроскопии и их применение к исследованию минеральных объектов биологического и геологического происхождения

Е. С. Коваленко¹, А. А. Калоян¹, А. В. Пахневич², К. М. Подурец¹, В. А. Соменков¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Палеонтологический институт им. А. А. Борисяка РАН, Москва, Россия

В последние годы важным методом неразрушающей диагностики для изучения внутреннего строения минеральных объектов различного происхождения стала рентгеновская томография и микротомография. При этом для биологических и геологических объектов были установлены определенные ограничения метода, связанные, во-первых, с недостаточным контрастом, так как в составе подобных объектов часто содержатся минералы близкие по рентгеновской плотности, а во-вторых, с размерами и толщиной объектов из-за недостаточной глубины проникновения рентгеновского излучения. Поэтому в рамках представленной работы исследовались новые возможности для изучения минеральных объектов, связанные с применением синхротронного и нейтронного излучения. Синхротронное излучение позволяет использовать фазовые механизмы формирования контраста, а нейтроны имеют другую природу взаимодействия с веществом по сравнению с рентгеновскими лучами и большую проникающую способность. Взаимодополняющее применение различных видов излучения позволяет повысить результативность томографического исследования минеральных объектов.

Эксперименты проводились в Курчатовском институте на источнике синхротронного излучения и на реакторе ИР-8 на минеральных объектах различного происхождения (биоминералах, геологических, палеонтологических) с использованием комплекса методов нейтронной и синхротронной интроскопии, а также дополнительных методов. На реакторе ИР-8 созданы прототипы установок и проведена серия модельных экспериментов по нейтронной радиографии и томографии, демонстрирующих возможности получения нейтронных изображений для изучения минеральных объектов (окаменелостей, кернов горных пород, метеоритного вещества и т.п.).

На станции «Медиана» Курчатовского источника синхротронного излучения проведены первые эксперименты по томографии с применением рефракционного фазоконтрастного метода, а также разработан программный комплекс для реконструктивной томографии. Были исследованы образцы ископаемых беспозвоночных (*Rhipidocystis sp.* (Echinodermata, Eocrinoidea), *Cleiothyridina sp.* (Brachiopoda, Athyridida), Crinoidea (Echinodermata) и т.п.), природных алмазов, патогенных биоминералов человека (желчные и почечные камни). Показано, что применение данной методики позволяет существенно повысить контрастность изображений и, соответственно, томографической реконструкции.

Работа проводилась при поддержке федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» по теме «Исследование живых систем на уникальных установках “Курчатовский источник синхротронного излучения” и “Исследовательский реактор ИР-8”» (шифр заявки «2011-1.8-518-004-219») и гранта РФФИ «Развитие методов медицинской диагностики с использованием синхротронного и нейтронного излучения» (номер проекта 11-02-12155-офи-м-2011).

Рентгенографические исследования углеродного порошка с содержанием графена

Д. В. Логинов¹, Л. А. Алешина¹, А.Д. Фофанов¹

¹ *Петрозаводский государственный университет, Петрозаводск, Россия*

В работе исследовался углеродный порошок, предположительно содержащий графен. Рентгенографирование образцов проводилось на дифрактометре ДРОН-6 в $\text{MoK}\alpha$ излучении в интервале углов рассеяния $3\text{-}145^\circ$, кристалл монохроматор был установлен в первичных лучах. Зависимости интенсивности от угла рассеяния $I(2\theta)$ были перестроены в масштаб $I(s)$, где s – длина дифракционного вектора (рис. 1а), исправлены на поглощение поляризацию, переведены в электронные единицы (эл. ед.) и исправлены на комптоновское рассеяние. После введения поправки на поглощение кривые распределения интенсивности, полученные в геометриях на просвет и отражение, совпали в пределах погрешности эксперимента, что свидетельствовало об изотропности исследуемого объекта.

Как видно из рис. 1а, на интерференционной функции углеродного порошка в области $s = 1.25 \text{ \AA}^{-1}$ присутствует размытый максимум. Поскольку углеродный порошок был получен электродуговым плазменным методом распыления графитовых электродов в атмосфере гелия, то он может содержать сажу графита в которой находятся фуллерены и, возможно, нанотрубки, а также отдельные углеродные слои (графен).

Согласно методике описанной в работе [1] был выполнен поиск оптимальной конфигурации, для каждой построенной конфигурации рассчитывалась кривая $H(s)$.

Было показано, что в исследуемом углеродном порошке присутствуют как кластеры идеального графита, состоящие из шести слоев с общим числом атомов углерода равным 3240, так и смещенные в плоскости друг относительно друга графеновые слои (рис. 1б). Последние представляют собой две углеродные плоскости, имеющие размеры $18a$, $18b$ по осям x , y , смещенные друг относительно друга на 25 \AA и содержащие 280 вакансий. Соответствующие кривые $H(s)$, просуммированные в соотношении 1:2, наилучшим образом описывали экспериментальную кривую.

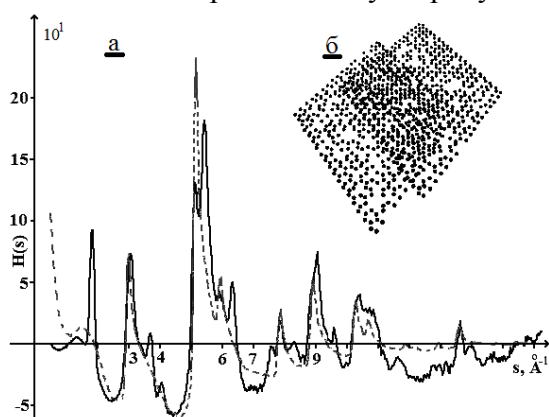


Рис. 1. а) s - взвешенные интерференционные функции $H(s)$ (— - эксперимент, --- - теоретический расчет); б) Атомная конфигурация.

Таким образом, в исследованном углеродном порошке присутствуют искаженные наличием вакансий смещенные друг относительно друга слои графена и идеальные кластеры гексагонального графита.

Исследования проведены при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. № П801 от 24 мая 2010 г.

1. Логинов Д.В. Рентгенографические исследования и построение моделей структуры ряда углеродных материалов. диссертация к.ф.-м.н. Петрозаводск. ПетрГУ.– 2011. – 167с.

Амплитуда рассеяния и потенциал в задачах многократного малоуглового рассеяния

Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов

Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия

В зависимости от соотношения между длиной свободного пробега нейтрона в веществе и толщиной образца малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) может быть однократным (тонкие образцы) или многократным. Метод однократного МУРН наиболее информативен, и существуют стандартные программы обработки спектров. При изучении современных материалов часто бывает невозможно изготовить столь тонкие образцы, чтобы МУРН было однократным, при условии сохранения структуры образца. В этом случае необходимо анализировать спектры многократного МУРН (ММУРН). Однако в обоих случаях для построения теории необходимо задать потенциал взаимодействия нейтрона со средой. Обычные выводы нейтроннооптического потенциала (см., например, [1]) неприменимы в реальных условиях многократного рассеяния. Поэтому мы провели новый анализ [2] и показали, что как в борновском, так и в эйкональном приближении в качестве потенциала неоднородности должен быть взят нейтронно-оптический потенциал, представляющий собой среднее от псевдопотенциала Ферми по объему, содержащему много ядер, но имеющему линейные размеры, много меньшие размеров измеряемых неоднородностей.

В теории малоуглового рассеяния [3] традиционно используется концепция амплитуды рассеяния, а поток рассеянных нейтронов выражается через квадрат модуля амплитуды рассеяния. В стандартной трактовке [3] это допустимо при удалении от рассеивателя с характерным размером a на расстояние $r \gg R = a^2 / \lambda$, где λ – длина волны излучения (условие Фраунгофера). Однако, в реальных экспериментах это условие не выполнено. Существует мнение, что если падающая волна излучается некогерентным источником, то вместо размера образца в условии Фраунгофера входит поперечная длина когерентности, равная $l_c = \lambda / \alpha$, где α – угловой размер источника, т.е. $r \gg l_c^2 / \lambda$. Мы показываем, что в последовательной теории данное условие не возникает. Применимость амплитуды рассеяния в приложении к опытам с двухкристальными дифрактометрами была доказана в работе [4]. Мы также проанализировали этот вопрос для стандартных малоугловых спектрометров, и получили такое же выражение для потока рассеянных нейтронов, какое следует из концепции амплитуды рассеяния, но при условиях, которые значительно мягче условия дифракции Фраунгофера.

1. Гуревич И.И., Тарасов Л., Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. 608 с.
2. Dzheparov F. S., Lvov D. V. // Crystallography Reports. 2011. V. 56. P. 16.
3. Свєргун Д.И., Фейгин Л.А., Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 279 с.
4. Джепаров Ф.С., Забелин К.С., Львов Д.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 9, С. 9

Основные тенденции формирования наноискажений кристаллической решётки в системе твёрдых растворов $ZnS_{1-x}Se_x$ ($0 \leq x \leq 1$), легированных малым количеством ионов железа

В. И. Максимов¹, С. Ф. Дубинин¹, В. Д. Пархоменко¹

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

При видимых перспективах применения в устройствах электронной оптики и спинтроники, интерес к исследованиям свойств полупроводниковых твердых растворов на основе соединений $A^{II}B^{VI}$ обусловлен в том числе возможностью прецизионной настройки параметров кристаллической решётки и, соответственно, зонной структуры при анионном или катионном замещении. Легирование рассматриваемых соединений магнитоактивными ионами делает их замечательными модельными объектами для изучения как зонной структуры [1], так и особенностей обменных взаимодействий в кристаллической решётке, которой изначально должна быть свойственна определённая степень деградации, поскольку составляющие её атомы определяют два незначительно отличающихся параметра длины химической связи в исходных бинарных соединениях ZnS и $ZnSe$ [2]. В представляемой работе, методом нейтронографии при температурах 300К и 78К, исследовалось структурное состояние монокристаллов $ZnS_{1-x}Se_x:Fe$ ($0 \leq x \leq 1$) в кубической модификации с уровнем легирования железа $y \sim 0.001$ в абсолютных единицах. Используемые в эксперименте кристаллы были выращены из газообразной фазы методом химического транспорта.

Ранее с помощью дифракции тепловых нейтронов нами было показано (см., напр., [3] и ссылки в работе), что в легированных магнитоактивными $3d$ - ионами халькогенидах цинка в широкой температурной области имеют место два типа локальных ян-теллеровских искажений кубической кристаллической решетки: 1 – нанодеформации тригонального типа, обусловленные ионами Ni, V ; 2 – искажения тетрагонального типа, индуцированные ионами Cr и Fe .

Полученные в настоящем исследовании данные показывают, что в легированных ионами железа соединениях $ZnS_{1-x}Se_x$ при низких температурах тетрагональный тип искажений кластера $Fe^{2+}(S,Se)_4$ сохраняется. Однако, в кристалле $ZnS:Fe$ в модификации сфалерита выявляется тенденция к формированию сверхструктуры с волновым вектором $q = (\bar{1}/3, 0, 1/3) 2\pi/a$, которую следует рассматривать как предпереходную между ГЦК и гексагональной- $6H$ структурами вследствие склонности исходного сульфида цинка к политипии, приводящей к нестабильности кристаллической решётки. Замещение серы селеном в соединении ZnS в большей степени стабилизирует ГЦК решётку. При этом в твёрдых растворах ряда $ZnS - ZnSe$ эффекты искажения кристаллической структуры, индуцированные внедрёнными ионами железа, могут усиливаться (преимущественно через рост амплитуды ядерных смещений в определённых кристаллографических плоскостях или направлениях) по сравнению с идентичными эффектами в ZnS и $ZnSe$. Локальная нестабильность кристаллической структуры сфалерита твёрдых растворов $ZnS_{1-x}Se_x$, легированных малым количеством ионов Fe , существенно зависит от состава кристалла.

Работа выполнена при частичной поддержке Государственного Контракта Министерства образования и науки № 16.518.11.7032, проекта № 12-Т-02-1006 ОФН РАН.

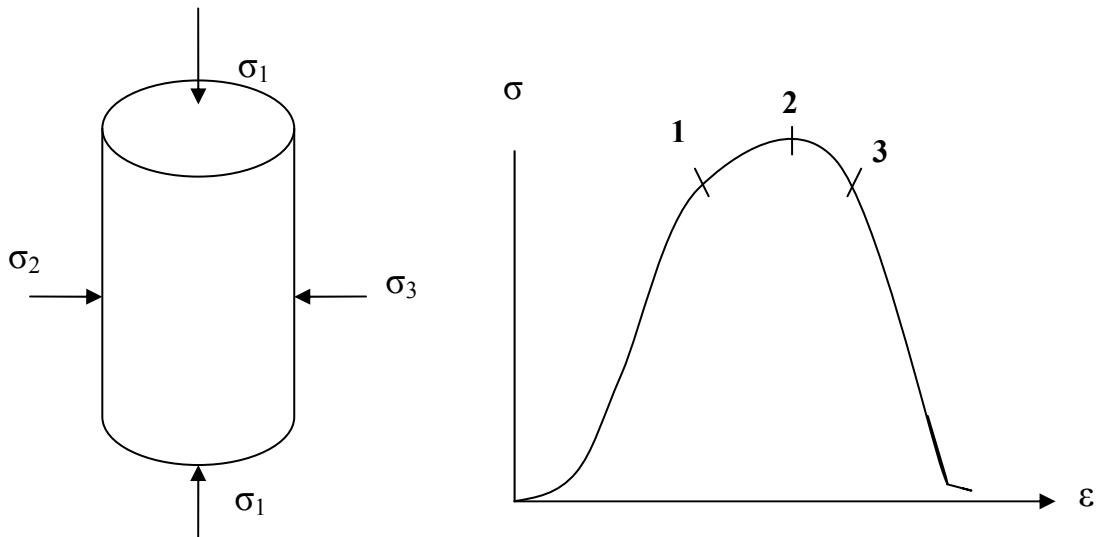
1. V.R. Galakhov, T.P. Surkova et.al., Phys. Rev. B, **68**, 033204 (2003).
2. Semiconductors and Semimetals. Volume 25. Diluted magnetic semiconductors. / ed. by J.K. Furdyna and J. Kossut, - New York, Academic Press (1988).
3. В.И. Максимов, С.Ф.Дубинин и др., Международная конференция «Научное наследие академика С.В.Вонсовского». Тезисы докладов. <http://conference.imp.uran.ru/ru/vonsovsky100/>

Количественный микроанализ образцов мрамора

Х.Ф. Махмудов

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

Эксперименты проводились на образцах мрамора в камере высокого давления. Из предварительных испытаний были определены характерные точки, при достижении которых образцы разгружались и извлекались для изготовления шлифов и аншлифов. На рис. приведены схема и этапы нагружения образцов горных пород.



Выводы

1. Микроскопический анализ шлифов позволил выявить 3 типа генераций трещин, из которых вторая-генерация (трещины сдвига) влияет на вязкий тип разрушения.
2. Увеличение нагрузки (σ_1) приводит к увеличению числа локально нарушенных участков (большое количество сколовых микротрещин) и перестройке структурного облика породы, выраженной в изменении контактов и грануляции зерен кальцита.
3. Увеличение бокового давления $\sigma_2 = \sigma_3$ до 10 МПа уменьшает дилатансию горных пород.
4. Выявлены остаточные деформации, выраженные в виде трансляций пластического скольжения, двойникования, что обусловлено вязким типом разрушения породы (мрамора).
5. С увеличением бокового давления число акустических сигналов на II этапе деформирования уменьшается, а на III этапе, т.е. в запредельной области, начинает увеличиваться.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-05-00320).

1. Kuksenko V.S., Makhmudov Kh.F., Mansurov V.A., Sultonov U., Rustamova M.Z Journal of Mining Science. 2009. T. 45. № 4. С. 355-358.

Синтез и строение новых молибдатов висмута с колончатой структурой

З.А.Михайловская, Е.С.Буянова

Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б.Н.Ельцина, Екатеринбург, Россия

Молибдаты висмута $\text{Bi}_{13}\text{Mo}_5\text{O}_{34\pm\delta}$ и твердые растворы на их основе, содержащие колончатые фрагменты $[\text{Bi}_{12}\text{O}_{14}]_n^{8n+}$, тетраэдры MoO_4 и изолированные ионы Bi обладают кислородно-ионной проводимостью, причем перенос заряда в структуре осуществляется анизотропно, вдоль колонок.

Работа посвящена исследованию возможности образования и свойств, замещенных кобальтом, молибдатов висмута и установлению специфики структуры данных соединений. Образцы были синтезированы по стандартной керамической технологии и методом соосаждения. Фазовый состав контролировали РФА. Установлено, что происходит образование ограниченных твердых растворов при введении Co . Рассчитаны структурные параметры синтезированных соединений.

Определен размер частиц порошков, который находится в пределах 1-10 мкм, морфология и состав поверхности брикетов. Химический анализ показал соответствие конечного продукта составу исходной шихты. Плотность спеченных брикетов составляет не менее 98%. Образцы термически устойчивы, не испытывают фазовых переходов при варьировании температуры. Электропроводность твердых растворов изучена методом импедансной спектроскопии. Температурная зависимость проводимости в аррениусовских координатах имеет линейный вид. Наблюдаемая проводимость твердых растворов выше по сравнению с матрицей.

Для дальнейшего уточнения структуры были проведены нейтронографические исследования, образцы изучали с применением электронной микроскопии, колебательной спектроскопии.

Было установлено значительное изменение подрешетки кислорода по сравнению с недопированными образцами, предложены варианты замещения в катионную и анионную подрешетки и объяснены эффекты изменения значений электропроводности при допировании.

Динамическая теория резонансной дифракции рентгеновских импульсов с ограниченным волновым фронтом

А.П.Орешко

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

Резонансная дифракция рентгеновского излучения является интенсивно развивающимся методом изучения свойств кристаллов, позволяющим исследовать как структуру кристаллов, так и тонкие детали магнитного и орбитального упорядочения [1]. Однако анализ полученных результатов преимущественно проводится на основе кинематической теории дифракции, что существенно сужает спектр рассматриваемых явлений. Впервые динамическая теория резонансной дифракции рентгеновского излучения в совершенных кристаллах была построена в [2].

В настоящее время, в связи с появлением источников субмикронных фемтосекундных рентгеновских импульсов, возникла необходимость в решении задачи дифракции двумерно-ограниченного рентгеновского импульса с произвольной пространственной структурой падающего поля и последующим анализом пространственной структуры поля на произвольных расстояниях от дифракционных элементов.

В рамках динамической теории, задача дифракции ограниченных ультракоротких рентгеновских импульсов в совершенных кристаллах и их последующего распространения получила решение в [3].

Помимо этого, значительный интерес представляет так же рассмотрение явления дифракции импульсов, ограниченных в пространстве и во времени, вблизи краев поглощения атомов вещества, что может дать как фундаментальную информацию о временной структуре возбужденных электронных состояний кристаллов, так и получить практическое использование при съемке “дифракционного кино” быстропротекающих процессов.

В настоящей работе построена динамическая теория дифракции субмикронных фемтосекундных рентгеновских импульсов с произвольной пространственной и временной структурой падающего поля в совершенных кристаллах вблизи края поглощения атомов вещества. Показано, что основные уравнения обычной динамической теории дифракции являются частным случаем резонансной динамической теории.

На основе предложенной теории разрабатывается программный комплекс, основанный на полном аналитическом решении задачи динамической резонансной дифракции рентгеновского излучения в совершенных кристаллах с произвольной толщиной и коэффициентом асимметрии отражения в геометрии Брэгга.

Вычисления проводились на суперкомпьютерном комплексе “Скиф” МГУ.

Работа поддержана грантами РФФИ 10-02-00768а.

1. В.Е.Дмитриенко, Е.Н.Овчинникова, Кристаллография. **48**, S1 (2003).
2. А.П.Орешко, Вестник Московского ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия. **3**, 55 (2007).
3. V.A.Bushuev, J. Synchrotron Rad. **15**, 495 (2008).

Влияние жирных кислот и pH на структуру модельных липидных смесей *oral stratum corneum*

Н. Ю. Рябова^{1,2}, А. Ю. Грузинов³, А. В. Забелин³

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² НИИ ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, МГУ, Москва, Россия

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Слой эпителия *oral stratum corneum*, покрывающий ротовую полость выполняет роль барьера, защищающего нижележащие ткани и контролирующего проникновение веществ через слизистую оболочку, хотя, не такого явного, как эпидермальный слой *stratum corneum*. Липидный состав *oral stratum corneum* хорошо определен, но структурная организация редких липидных бислоев OSC изучена мало [1] и роль отдельных типов липидов в формировании барьерных функций не ясна.

Методом рентгеновской дифракции на станции Дикси в ЦСИиНТ, НИЦ «Курчатовский институт» проведены исследования водных суспензий мультислойных везикул мембран на основе церамид-6, моделирующих липидную составляющую *oral stratum corneum*.

Липидные смеси церамид-6 / холестерин / жирная кислота / сульфат холестерина / (ДПФХ, ДПФЭ, сфингомиелин) с массовым соотношением компонентов 28/23/15/8/26 с пальмитиновой (C16:0) и арахиновой (C20:0) кислотами при 20-37°C и pH 5,8 и 8,4 характеризуются присутствием двух ламеллярных фаз с периодами повторяемости 46,4 и 42,2-43,8 Å. При тех же условиях в структуре мембран с бегеновой (C22:0), лигноцериновой (C24:0) и церотиновой (C26:0) кислотами существует доминирующая фаза с периодом повторяемости 47-52,9 Å при pH 5,8 и 48,1- 61,8 Å при pH 8,4. При высоких температурах (80-90°C) структура мембран характеризуется сосуществованием жидко-кристаллической ламеллярной и обратной гексагональной фаз Н_{II}. Установлено, что структурный параметр фазы Н_{II} *a* увеличивается с увеличением длины углеводородной цепочки жирной кислоты. Повышение pH от 5,8 до 8,4 приводит к увеличению параметра *a* для всех мембран с индивидуальными жирными кислотами и подавлению ламеллярной фазы в структуре мембран с длинноцепочечными жирными кислотами (C20:0, C22:0, C24:0 и C26:0).

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» (государственный контракт № 02.740.11.0542) и гранта для молодых ученых и специалистов ОИЯИ 2011 г.

1. P.W. Werzt, B. van den Bergh. Chemistry and Physics of Lipids **91**, 85 (1998).

Пьезоэлектрический трансформатор с увеличенным диапазоном рабочих частот

А. Н. Соловьев¹, М. И. Бичурин¹

¹ *Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия*

Пьезоэлектрические трансформаторы (ПЭТ) обладают целым рядом преимуществ, но при этом у них есть существенный недостаток, такой как узкая полоса рабочих частот. Цель данной работы заключается в определении метода увеличения диапазона рабочих частот и коэффициента трансформации (КТ) ПЭТ. Основными задачами, поставленными перед этой работой, являются составление эквивалентной схемы ПЭТ, определение формулы для расчета КТ, математическое и компьютерное моделирование ПЭТ в программе Maple для определения оптимального метода.

В проекте рассматривается ПЭТ конструкции Розена. На основе данной конструкции проводятся математические расчеты и моделирование. Основными параметрами, характеризующими ПЭТ, являются резонансная частота, диапазон рабочих частот, коэффициент трансформации, коэффициент полезного действия (КПД). Особое внимание заслуживает КТ ПЭТ и диапазон рабочих частот.

В проекте была составлена электрическая эквивалентная схема ПЭТ. При её анализе методом электромеханических ассоциаций была определена формула для расчета КТ.

При детальном рассмотрении полученной формулы видно, что КТ ПЭТ сильно зависит от параметров пьезоэлектрического материала и конструктивного исполнения.

Были определены основные факторы, влияющие на величину КТ, максимальное значение которого достигается в области электромеханического резонанса, который определяет диапазон рабочих частот. Отсюда следует, что для увеличения эффективности ПЭТ необходимо расширить диапазон рабочих частот. Существенного расширения можно добиться за счет применения многослойной структуры возбuditеля с различными геометрическими размерами слоев. В данном проекте рассматривались однослойная, трёхслойная и пятислойная структура. После проведения математических расчетов и моделирования в программе Maple были получены зависимости коэффициента трансформации от частоты для одного, трех и пяти слоев возбuditеля ПЭТ.

Из анализа полученной зависимости были сделаны следующие выводы:

а) ширина диапазона рабочих частот и КТ для однослойной структуры составляет 0,7 кГц и 4800, для трехслойной – 2 кГц и 7200, для пятислойной - 3,6 кГц и 8800;

б) с увеличением количества слоев возбuditеля происходит существенное увеличение КТ и расширение диапазона рабочих частот;

в) коэффициент полезного действия образцов практически не зависит от количества слоев и составляет 95%.

Полученные результаты показывают возможность увеличения диапазона рабочих частот более чем в 3 раза и коэффициента трансформации более чем на 80%. КПД остается неизменным на всем диапазоне рабочих частот, тем самым улучшается эффективность ПЭТ конструкции Розена. Следующим этапом проверки данного метода будет служить постановка эксперимента и получение экспериментальной зависимости коэффициента трансформации от частоты с различным количеством слоев возбuditеля.

Аномальное диффузное рассеяние в плотноупакованных кристаллах

А.Е. Шестаков¹, Ф.А. Кассан-Оглы², Ю.Э. Турхан², В.Е. Архипов²

¹ Российский федеральный ядерный центр – ВНИИТФ имени академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Экспериментально обнаружено аномальное диффузное рассеяние рентгеновских лучей в виде сплошных линий и дополнительных точек (extra spots), не совпадающих с пятнами от Брэгговских рефлексов, на рентгенограммах, полученных на кристаллах алюминия (ГЦК структура) и кобальта (ГПУ структура). Для съемки рентгенограмм использовались два метода: метод Лауэ — облучение неподвижного монокристалла полихроматическим

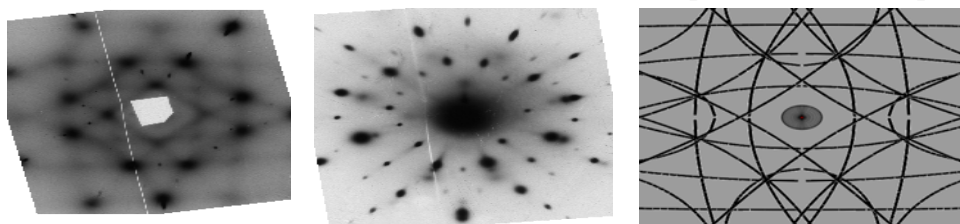


Рис.1 Экспериментальная монолауэграмма (а), излучение $MoK\alpha$, экспозиция 92 часа, лауэграмма (б), излучение белое Mo , экспозиция 55 минут, рассчитанная (в) монолауэграмма (дуги) от монокристалла Al , падающий пучок – вдоль (001).

излучением (Mo) и моно-Лауэ методом — облучение неподвижного монокристалла монохроматическим излучением (fixed beam-fixed single crystal). На Рис.1 представлены: экспериментальная монолауэграмма (а), лауэграмма (б) и рассчитанная (в) монолауэграмма (дуги) от монокристалла Al . На лауэграмме (Рис.1б) кроме Брэгговских рефлексов присутствуют дополнительные точки (extra spots) от пересечений светящихся стержней в обратном пространстве (relrods) со сферой Эвальда. Сплошные линии (дуги) на рентгенограммах являются следами светящихся плоскостей в обратном пространстве (relplanes) и следствием колеблющихся цепочек атомов в прямом пространстве, а дополнительные точки (extra spots) – это следы светящихся стержней в обратном пространстве (relrods) вследствие колеблющихся плоскостей атомов в прямом пространстве. Ранее такое аномальное диффузное рассеяние наблюдалось только на неплотнупакованных кристаллах, причем при понижении температуры наблюдалось исчезновение диффузного рассеяния при фазовых переходах кристалла в плотноупакованное состояние (см., например, обзор [1]). Наиболее ярко это показано в работе Комеса и др. [2] на примере перовскита $KNbO_3$, в котором в каждом из трех фазовых переходов исчезают три семейства светящихся плоскостей, так что в низкотемпературной (плотнупакованной фазе) аномальное диффузное рассеяние полностью исчезает.

Произведен расчет диффузного рассеяния в монокристаллах Al и Co по схеме Эвальда и предложено объяснение наблюдаемого явления на основе теории фазовых переходов в кристаллах с ОЦК структурой [3].

1. F.A. Kassar-Ogly, V.E. Naish and I.V. Sagaradze, “Diffuse Scattering and Structural Phase Transitions”, *Phase Transitions*, **49**, 89—141 (1994).
2. R.Comes, M. Lambert and A. Guinier, “Desordre lineaire dans les cristaux (cas du silicium, du quartz et de perovskites ferroelectriques),” *Acta Cryst.* **A26**, 244—254 (1970).
3. Ф.А. Кассан-Оглы, В.Е. Архипов, А.Е. Шестаков, “Фазовые переходы в кристаллах с ОЦК структурой”, *ФММ*, **109**, с.608—624. (2010).

Секция «Наноструктуры»

Внутризонные оптические переходы в низкоразмерной системе

Р.Г.Абасзаде¹, Г.Б.Ибрагимов¹

¹Институт Физики им. Г.М.Абдуллаева НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан,

Полупроводниковые низкоразмерные системы один из интересных и перспективных объектов современной физики. Оптические электронные переходы в различных квантовых наноструктурах в настоящее время интенсивно изучаются. Когда энергия квантов меньше расстояния между подзонами размерного квантования, такое излучение может поглощаться только за счет внутризонных и, следовательно, не прямых переходов.

Внутризонные поглощения, при которых электроны совершают переходы между магнитными уровнями одной минизоны. Поглощение зависит от распределения электронов по начальным состояниям, определяемым их концентрацией и температурой. Матричные элементы магнитооптических переходов из начального состояния nlk_y в конечное состояние $n'lk_y$ в дипольном приближении имеют вид [1]:

$$M_{n'n}(k_y, k'_y) = C \int \psi_{nlk_y} \left[\left(P + \frac{e}{c} A \right) \varepsilon \right] \psi_{n'lk'_y} dr dz \quad (1)$$

Где: A – вектор потенциал, ε – вектор поляризации фотонного поля, C – постоянные, которые содержат в себе амплитуду вектор – потенциала.

Оптические переходы имеют место только тогда, когда ε параллельно поверхности и перпендикулярно H [2]. Когда ε параллельно H , оптические переходы не происходят. Из (1) непосредственно можно найти правила отбора $\Delta k_y = 0$, $\Delta n = 1$, т.е. могут происходить только вертикальные переходы. Для коэффициента поглощения получено [3]

$$\alpha^{2-D} = \frac{2\pi\hbar e^2}{ndm^*cR^2} \gamma_c(\hbar\omega_c) \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) (f_{nl} - f_{n+1,l}) \cdot J_{n+1,n} \quad (2)$$

$$\alpha^{1-D} = \frac{8\pi\hbar e^2}{nm^*cL_xL_yL_z} \gamma(\hbar\omega_c) \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) J_{n+1,n} \sum_{k_y} [f_{nlk_y} - f_{n'lk_y}] \quad (3)$$

Где n – коэффициент преломления света, $\gamma_c(\hbar\omega_c) = \frac{\hbar\omega_c}{\hbar\Omega}$

1. Ф.Бассани, Дж.Пастори «Электронные состояния и оптические переходы
2. в твердых телах», Наука, 391(1982).
3. U.Merkt, Phys.Rev.B, 32 (1985), 6699.
4. G.B.Ibragimov, J.Phys.Con.Matter, 14(2002) 8145.

Влияние диэлектрической прослойки на магнитные свойства многослойных структур на основе нанокompозитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$

А.А. Алешников, Ю.Е. Калинин, А.В. Ситников, А.Г. Федосов

Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Исследования магнитных свойств композитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$ выявили наличие в пленках значительной перпендикулярной составляющей магнитной анизотропии для составов с высоким содержанием металлической фазы. Это может быть связано с формированием столбчатой структуры кластеров металлических гранул композита в процессе роста пленки. В работе рассмотрена возможность ограничения роста столбчатой структуры пленки за счет создания прослоек из композита, полученного в среде активного газа.

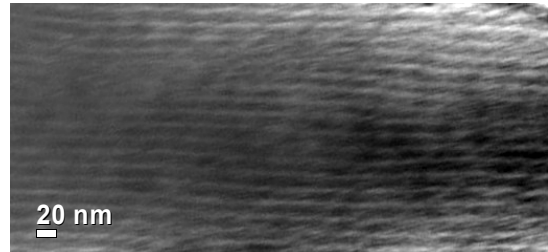


Рис. 1. Электронная микрофотография поперечного сечения многослойной гетерогенной структуры $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{55}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{45}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{55}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{45}+\text{O}_2]\}_{300}$

Пленки гетерогенных систем на основе ферромагнитного сплава $\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10}$ и Al_2O_3 были получены ионно-лучевым распылением составной мишени. Синтезированы объемные композиты $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$, рост которых осуществлялся в среде Ar, в среде Ar при добавлении 35 и 12 парциальных % N_2 и O_2 , соответственно, и многослойные гетерогенные системы $\{[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}+\text{N}_2(\text{O}_2)]\}_{300}$. Электронная микрофотография поперечного сечения многослойной гетерогенной пленки (рис. 1) показала хорошо сформированную слоистую структуру с периодом порядка 14 нм, что хорошо согласуется с рассчитанными толщинами бислоев.

Концентрационные зависимости удельного электрического сопротивления (ρ) исследованных гетерогенных структур являются характерными для перколяционных систем с фазами, существенно различающимися по величине собственной проводимости. Добавление кислорода и азота приводит к увеличению значений сопротивления в композитах. Выявлено, что в многослойных пленках зависимости $\rho(x)$ незначительно отличаются от данной характеристики композита $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{100-x}$.

Анализ кривых намагниченности показал наличие перпендикулярной магнитной анизотропии в композиционных с высоким содержанием металлической фазы. В пленках многослойных гетероструктур не выявлено перпендикулярной составляющей вектора намагниченности, также они характеризуются низким значением коэрцитивного поля, высокой магнитной проницаемостью и хорошо сформированной одноосной анизотропией в плоскости пленки.

Характеристики концентрационных зависимостей действительной (μ') и мнимой (μ'') частей комплексной магнитной проницаемости коррелируют с кривыми намагниченности исследуемых систем. Исследования показали, что максимальные значения $\mu'(x)$ на частоте 50 МГц в многослойной структуре $[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{57}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{43}]/[(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{57}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{43}+\text{O}_2]_{300}$ составляет 400, тогда как в композите $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_{43}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{57}$ 90. Отжиг гетерогенных структур при температуре 350°C в течении 30 минут в магнитном поле 2500 Э приложенном в плоскости пленки перпендикулярно оси образцов привел к значительному увеличению μ' и μ'' во всех исследуемых системах.

Теория эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлического субстрата

3.3. Алисултанов, А.А. Рухадзе

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

Гамильтониан для эпитаксиального графена может быть записан так

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + t' \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{ki\sigma} (\exp(-ikr_i) c_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} + h.c.) \quad (1)$$

Здесь ε_k - энергия электронов подложки, t - матричный элемент перехода электрона на ближайший соседний атом, t' - матричный элемент перехода на второй соседний атом, U - энергия внутриатомного кулоновского отталкивания, N - число атомов в подложке, $c_{k\sigma}^+$ ($c_{k\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона подложки, находящегося в состоянии $k\sigma$, $k = (\chi, k_z)$ - трехмерный квазиимпульс электронов подложки, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона i -го атома графена, относящегося к подрешетке А, $b_{i\sigma}^+$, $b_{i\sigma}$ - аналогичные операторы для подрешетки В, V - матричный элемент взаимодействия атома углерода с подложкой, r_i - двумерный радиус - вектор i -го атома графена. Отметим, что гамильтониан (1) учитывает косвенное взаимодействие между атомами эпитаксиального графена. Учитывая только переходы на ближайшие соседние атомы (т.к. $t' \ll t$) и пренебрегая внутриатомным кулоновским отталкиванием, а также замечая, что $kr_i = \chi r_i$ выражение (1) можно переписать в виде

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{k_z, \chi, i, \sigma} (\exp(-i\chi r_i) c_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} + h.c.) \quad (2)$$

Далее введем следующие функции Грина

$$\begin{aligned} G_{kk'}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle c_{k\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{qq'}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle a_{q\sigma} \left| b_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle b_{q\sigma} \left| a_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{gs}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle a_{\chi\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle b_{\chi\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{sg}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle c_{q,k_z\sigma} \left| a_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle c_{q,k_z\sigma} \left| b_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (3)$$

где $G_{kk'}^\sigma(\omega)$ - функция Грина электронов подложки, $G_{qq'}^\sigma(\omega)$ - функция Грина, описывающая переход электронов графена между соседними атомами, $G_{gs}^\sigma(\omega)$ и $G_{sg}^\sigma(\omega)$ описывают переходы электронов из графена в подложку и наоборот. Введенные функции позволяют полностью рассчитывать электронные функции эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металлического субстрата.

1. С.Ю. Давыдов, ФММ 47, 481 (1979)
2. С.Ю. Давыдов, ФТП 46, 204 (2012)

Фотостимулированная сборка адсорбированных наночастиц из мигрирующих под действием относительно слабого лазерного излучения адатомов

В. В. Андреев

ФГБОУ ВПО «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова», Чебоксары, Россия

Высокий интерес к поверхностным явлениям, протекающих под действием лазерного излучения относительно слабой интенсивности, вызван возможностями широкого применения результатов в технологиях фотостимулированной сборки адсорбированных наночастиц из мигрирующих под действием оптического излучения адатомов. В то же время необходимо отметить, что кинетика поверхностных явлений в области действия оптического излучения является не до конца выясненной. Обычно механизм воздействия светового поля на адсорбированные атомы объясняется безызлучательной релаксацией электронного взаимодействия атома с поверхностью, способной привести к десорбции атома [1]. В то же время световое излучение способно поляризовать адсорбированные частицы и в некоторых случаях взаимодействие таких частиц между собой может быть значительным [2].

В данной работе исследована последовательная фотостимулированная сборка адсорбированных наночастиц из мигрирующих под действием оптического излучения адатомов. Основной проблемой такой технологии является воспроизводимость самосборки элементов наноразмерных устройств с учетом возможных ошибок при укладке [3, 4]. Для разрешения таких трудностей наряду с адекватными математическими моделями необходимы также однозначные методы контроля размеров и состава наночастиц на каждом этапе их сборки.

Коллективное фотостимулированное поведение частиц, адсорбированных на однородной поверхности диэлектрика, полупроводника или металла, в случае двумерного распределения интенсивности падающего на поверхность оптического излучения, обладающего осевой симметрией, описывается уравнением [5, 6]:

$$\frac{\partial N}{\partial t_1} = S_0 F - \frac{N}{\tau} + \mu \frac{\partial}{\partial r} \left(r N \frac{\partial U}{\partial r} \right) + D \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial N}{\partial r} \right). \quad (1)$$

Здесь r - текущее радиальное расстояние; t_1 - текущее время; N - поверхностная концентрация адсорбированных частиц (атомов, молекул и т.п.); F - поток частиц из газовой фазы на поверхность; S_0 - коэффициент прилипания частиц к поверхности; τ - характерное время пребывания частиц в адсорбированном состоянии; μ - подвижность; D - коэффициент поверхностной диффузии; U - потенциал взаимодействия между адсорбированными частицами. Здесь величины μ и D предполагаются константами.

В работе показана возможность сборки на твёрдой поверхности диэлектрика, полупроводника и металла различных планарных структур из адсорбированных атомов в поле относительно слабого оптического (лазерного) излучения. В частности, в зависимости от физико-химических параметров модели, могут быть созданы на твёрдой поверхности кратерообразные и бугрообразные структуры.

1. И.Н. Абрамова, Е.Б. Александров, А.М. Бонч-Бруевич, В.В. Хромов, Письма в ЖЭТФ. **39**, 4 (1984).
2. В.П. Жданов. Элементарные физико-химические процессы на поверхности. Новосибирск: Наука, 1988.
3. Р.А. Андриевский, Рос. хим. журнал. **5** (2002).
4. А.Н. Латышев, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, Д.А. Минаков, С.С. Охотников, Конденсированные среды и межфазные границы. **8**, 1 (2006).
5. В.И. Полякова, Г.Г. Телегин, Хим. физика. **10**, 2 (1991).
6. В.В. Андреев, Д.В. Игнатъев, Г.Г. Телегин, Квантовая электроника. **34**, 2 (2004).

Влияние параметров синтеза на структурирование коллоидных растворов

*М.И. Арефьев¹, А.А. Мистонов¹, Н.А. Григорьева¹, А.К. Самусев²,
М.Ф. Лимонов², К.В. Воронина³, С.В. Григорьев³*

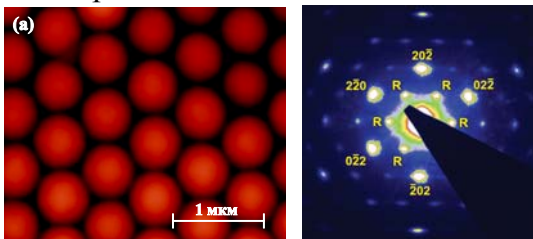
¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

²Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

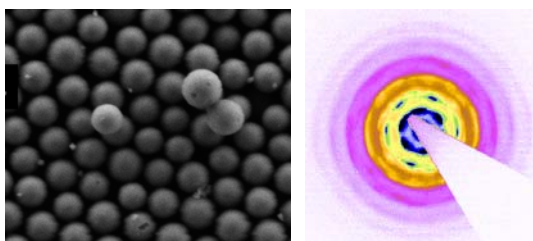
³ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова», Гатчина, Россия

Фотонные кристаллы (ФК) привлекают большое внимание исследователей благодаря своим удивительным оптическим свойствам и перспективе использования в таких областях, как управление распространением света, создание беспороговых лазерных излучателей, высокодобротных световодов, высокоэффективных светодиодов, батарей нового типа[1]. Наиболее значимым, при этом, оказывается параметр структурного порядка ФК. Трехмерные фотонные кристаллы на основе опалоподобных структур формируются из монодисперсных полимерных шаров, осажденных из коллоидного раствора на подложку методом вертикальной депозиции[2] или седиментации[3]. Для синтеза полимерных шаров на основе оксида кремния широко используется многоступенчатый метод Штобера[4], позволяющий получать монодисперсные шары диаметром от 40 нм до 2200 нм.

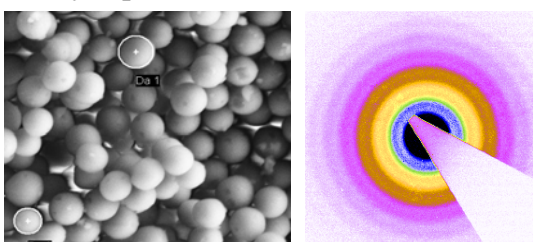
Упорядоченный



Частично упорядоченный



Разупорядоченный



В данной работе исследовались параметры, влияющие на самоорганизацию коллоидных шарообразных частиц разного диаметра в процессе испарения растворителя из суспензии. Аттестация полученных структур проводилась методом ультрамалоугловой дифракции рентгеновского излучения в Европейском центре синхротронных исследований (ESRF, г. Гренобль, Франция) и методом сканирующей электронной микроскопии (Междисциплинарный ресурсный центр СПбГУ по направлению «Нанотехнологии»). Показана корреляция размеров коллоидных частиц и параметра порядка опалоподобных структур при учете конкурирующего взаимодействия сил поверхностного натяжения и вязкости растворителя, силы тяжести частиц, температуры и конвекции в случае метода седиментации, а также дополнительного влияния капиллярных сил и смачиваемости подложки в случае метода вертикальной депозиции.

На рисунке представлены три типа структурирования коллоидных растворов: полностью упорядоченные (вертикальная депозиция), частично упорядоченные и полностью разупорядоченные (седиментация).

За предоставленные образцы приношу благодарности Е. Ю. Трофимовой, Д. А. Курдюкову, В.Г. Голубеву, В.М. Масалову, Г.А. Емельченко.

1. Lousse, V., Fan, S. Waveguides in inverted opal photonic crystals. Opt. Express, 2006, 14, 868-878
2. Плеханов А.И, Калини Д. В., Сердобинцева В. В. Журн. Российские нанотехнологии, 2006, 1, 245
3. Войнов Ю.П. и др. Влияние отжига на спектры отражения глобулярных фотонных кристаллов на основе искусственного опала. Неорганические материалы, 2009, 45, 6, 704-709
4. Stober W, Fink A, Bohn E. Controlled growth of monodisperse silica spheres in the micron size range. Journal of colloid. Interface Sci. 1968, 26, 62

Отрицательный фотоэффект и подавление эффекта магнитосопротивления светом в гетероструктуре гранулированная пленка с наночастицами Co на GaAs

А. А. Астрецов^{1,2}, В. В. Павлов², Л. В. Луцев², А. И. Стогний³, Н. Н. Новицкий³

¹ Санкт-Петербургский Академический университет – НОЦ Нанотехнологий РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ Научно-практический центр по материаловедению НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Эффект магнитосопротивления привлекает большое внимание исследователей благодаря его многочисленным практическим приложениям. Недавно обнаружены экстремально большие значения магнитосопротивления порядка 10^5 % при комнатной температуре на структурах гранулированная пленка – GaAs при развитии лавинного процесса [1,2,3]. Гранулированная пленка в этих структурах содержала ферромагнитные металлические наночастицы Co или ферромагнитную металлическую островковую структуру в диэлектрической матрице на поверхности GaAs.

В данной работе было исследовано влияние света на развитие лавинного процесса в гетероструктурах Co-SiO₂/GaAs, а также эффект фотоиндуцированного магнитосопротивления. Большие значения магнитосопротивления в этих структурах объясняются существованием спин-зависимого барьера в области интерфейса для инжектируемых в полупроводник электронов и положительной обратной связью, которая формируется дырками, образующимися при развитии лавины. Спин-зависимый барьер возникает в обогащенном электронном слое вблизи интерфейса и определяется обменным взаимодействием между электронами в этом слое и *d*-электронами Co [4]. Положительная обратная связь определяется дырками, которые рождаются в ходе лавинного процесса, и дрейфуют в область барьера [3]. Из-за кулоновского взаимодействия дырок с электронами обогащенного слоя в зависимости от количества дырок в этой области происходит поднятие или опускание барьера и, соответственно, уменьшение или увеличение лавинного тока [5]. При воздействии светового излучения с энергиями фотонов (1.37 – 1.4 эВ) меньших ширины запрещенной зоны GaAs (1.42 эВ при T = T_{комн.}) обнаружен отрицательный фотоэффект, заключающийся в уменьшении лавинного тока. Выявлен сильный эффект фотоиндуцированного магнитосопротивления, определяемый существенной зависимостью величины проводимости структур Co-SiO₂/GaAs в магнитном поле при дополнительном световом облучении. Данные эффекты объяснены наличием локализованных дырочных состояний и образованием области неподвижного положительного заряда в GaAs, а также уменьшением положительной обратной связи, которая осуществляется рожденными в ходе лавинного процесса дырками. Механизмы эффектов отрицательного фотоэффекта и фотоиндуцированного магнитосопротивления существенно отличается от механизма, описанного в работах [5, 6, 7]. Выявлена область энергий фотонов (E ~ 1.39 эВ) с наибольшим подавлением эффекта магнитосопротивления. Использование обнаруженного эффекта фотоиндуцированного магнитосопротивления позволит осуществлять эффективное управление спиновым транспортом в гетероструктурах типа ферромагнетик – полупроводник.

1. Л.В.Луцев, А.И.Стогний, Н.Н.Новицкий, Письма в ЖЭТФ 81 (10), 636 (2005).
2. L.V. Lutsev, A.I.Stognij, N.N.Novitskii et al., J. Magn. Magn. Mater. 300 (1), e12 (2006).
3. L.V. Lutsev, A.I.Stognij and N.N.Novitskii, Phys. Rev. B80 (18), 184423 (2009).
4. L.V. Lutsev, J.Phys. : Condensed Matter 18(26), 5881 (2006).
5. G. Tuttle, H. Kroemer, and J.H. English, J. Appl.Phys. 65 (12), 5329 (1989).
6. J.-P. Cheng, I. Lo, and W.C. Mitchell, J. Appl.Phys. 76 (2), 667 (1994).
7. A.I. Yakimov, A.V. Dvurechenskii, A.I. Nikiforov et al., Phys.Rev. B62 (24), R16283 (2000).

Квазиупругое вторичное свечение одиночной квантовой точки в условиях колебательного резонанса

А.С. Баймуратов¹, А.В. Федоров¹, I. D. Rukhlenko², M. Premaratne²

¹ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (НИУ ИТМО), Санкт-Петербург, Россия

² Advanced Computing and Simulation Laboratory, Department of Electrical and Computer Systems Engineering, Monash University, Clayton, Australia

Несмотря на интенсивное изучение наноразмерных структур, до сих пор остаются неясными многие вопросы, связанные с энергетическим спектром квазичастиц в таких системах, микроскопическими механизмами взаимодействия квазичастиц друг с другом и внешними полями [1]. В частности, недостаточно полно изучено электрон-фононное взаимодействие в квантовых точках, играющее важную роль в определении их физических свойств [2]. Это взаимодействие приводит к рассеянию электронов, дырок и экситонов, а также может вызвать существенную модификацию энергетического спектра квантовых точек. Особый интерес представляет случай колебательного резонанса, когда энергия фонона совпадает с энергетическим зазором между какой-либо парой уровней электронной, дырочной или экситонной подсистем [3]. При этом происходит перестройка энергетического спектра электрон-фононной системы, в результате которой возникают поляроноподобные состояния. Сложность низкоразмерных систем заставляет привлекать для их изучения новые оптические методы и развивать теоретическое описание известных оптических методов применительно к наноразмерным структурам. В частности, существенный интерес представляет оптическая спектроскопия одиночной квантовой точки [4], позволяющая изучать поляроноподобные состояния, возникающие в условиях колебательного резонанса. В рамках этого метода удается получить спектры вторичного свечения квантовых точек, свободные от неоднородного уширения, связанного с их распределением по размерам.

Разработана низкотемпературная теория квазиупругого вторичного свечения полупроводниковых квантовых точек, электрон-дырочная подсистема в которых находится в колебательном резонансе с продольными оптическими фононными модами. В теории используется обобщенная модель перенормированных, вследствие полярного электрон-фононного взаимодействия, энергетических спектров квантовых точек. Модель учитывает вырождение электронных состояний и позволяет включить в рассмотрение несколько ЛО-фононов участвующих в колебательном резонансе. Получено аналитическое выражение для дифференциального сечения квазиупругого вторичного свечения одиночной квантовой точки.

1. А.В. Федоров, И.Д. Рухленко, А.В. Баранов, С.Ю. Кручинин *Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек*, Наука: СПб, (2011).
2. A. Fujishima, T.N. Rao, D.A. Tryk *J. Photochem. Photobiol. C* 1 (2000).
3. Y. Masumoto, T. Takagahara *Semiconductor Quantum Dots: Physics, Spectroscopy and Applications*, Springer: Berlin, (2002).
4. С.Ю. Кручинин, А.В. Федоров *Опт. и спектр.* **100**, 47 (2006).
5. E.A. Chekhovich, A.B. Krysa, M.S. Skolnick, A.I. Tartakovskii *Phys. Rev. Lett.* **106**, 027402 (2011).

О теплоемкости сверхпроводящих нанокластеров

В.С. Батурин

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

Нанокластеры, как и другие мезоскопические системы, благодаря своему промежуточному положению между молекулами и массивными твердыми телами, обнаруживают ряд качественно новых свойств. В частности недавно (Цао и др., 2008) было обнаружено косвенное свидетельство перехода кластеров алюминия Al₄₅- в сверхпроводящее состояние (пик в теплоемкости как функции температуры) при температуре ~200К, что не только является рекордным показателем, но и на два порядка выше температуры для объемного образца. Считается (см., напр. Кресин, 2008), что причину такого необычного поведения следует искать в оболочечной структуре электронного спектра. Поэтому было интересно построить простейшую модель кластера, учитывающую ключевые для сверхпроводящих кластеров свойства – парное взаимодействие, оболочечную электронную структуру и фиксированное число частиц. Системой, моделирующей кластер, были выбраны N электронов, распределенных по двум оболочкам – верхней заполненной и нижней незаполненной с включенным парным взаимодействием. Выяснилось, что при реалистичном выборе параметров в теплоемкости действительно появляется пик при указанной температуре, причем поведение этого пика при вариации параметров соответствует общей теории сверхпроводимости. Положение пика (условно - TC) сдвигается влево при уменьшении константы взаимодействия, а так же при уменьшении кратности вырождения оболочек или разрежении уровней, что подтверждает важность оболочечной структуры. Кроме того, наблюдается эффект четности. Таким образом, удалось построить модель, которая «задешево» позволяет исследовать свойства сверхпроводящих нанокластеров, представляющих несомненный практический интерес благодаря высокой TC. Хотелось бы поблагодарить П. И. Арсеева за ценные замечания обсуждения.

Исследование природы и свойств высокотемпературной наноразмерной углеродной аморфной фазы на основе C₆₀

П.А. Борисова, М.А. Сумароков, В.П. Глазков

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Недавние высокотемпературные исследования аморфных фуллеритов C₆₀ показали, что в наноразмерных углеродных структурах переход между стабильными состояниями: аморфным фуллеритом и аморфным графитом - происходит через промежуточную метастабильную высокотемпературную алмазоподобную аморфную фазу [1]. Целью настоящей работы является изучение природы высокотемпературной аморфной фазы C₆₀ и её взаимодействия с другими углеродными фазами.

Высокотемпературную аморфную фазу C₆₀ получали при помощи механоактивации с последующим отжигом. Исследования с помощью нейтронной и рентгеновской дифракции, дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показали, что высокотемпературная аморфная фаза C₆₀ является графеноподобной (квазидвумерной) фазой. Получены данные о взаимодействии высокотемпературной аморфной фазы C₆₀ с другими углеродными материалами (наноалмаз, аморфный графит).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 09-02-00464а, № 10-02-00176а) и госконтракта (№ 16.552.11.7003)

1. С.С.Агафонов, В.П.Глазков, И.Ф.Кокин, В.А.Соменков, ФТТ **1245**, 52(2010).

Моделирование свойств наночастиц гидроксилapatита, их поверхностных свойств и межфазных взаимодействий

А.В. Быстрова^{1,3}, Е.В. Парамонова², Ю.Д. Дехтяр³, В.С. Быстров^{2, 4}, Е.И. Маевский¹

¹Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино, Россия

²Институт математических проблем биологии РАН, Пущино, Россия

³Институт биомеханики и нанотехнологий, Рижский технический университет, Рига, Латвия

⁴Dept. Cer. & Glass Eng. & CICECO, Университет Aveйро, Aveйро, Португалия

В данной работе представлены результаты моделирования и численного исследования свойств наночастиц (НЧ) гидроксилapatита (ГАП), их поверхностных межфазных взаимодействий, связанных с водородными связями и особенностями переноса протона, их поверхностные и поляризационные свойства [1].

ГАП является одним из наиболее широко используемых материалов в сфере современной нанобиомедицины и нанотехнологий. Взаимодействие между биоматериалом из ГАП и живых клеток улучшается, если поверхность ГАП заряжена. Индуцированный заряд появляется на структурах ГАП из-за переноса протонов вдоль цепочек ОН в столбчатых каналах. Эти цепи образуются ионами ОН вдоль оси с и окружены кальциевыми треугольниками. Представленные данные являются результатом как *ab initio* квантово-химических расчетов (на основе программы Gaussian98, методом Хатри-Фока, в базисе 6-31G (d)), так и полуэмпирических (PM3), а также методом теории функционала плотности (ТФП) с помощью HyperChem 8.0. Результаты расчетов наглядно демонстрируют полученные профили потенциальной энергии протона в двухъямном асимметричном потенциале. В работе были проведены исследования и расчеты величин энергетических барьеров для переноса протона вдоль столбчатых каналов. Наибольший интерес был сосредоточен на исследовании приповерхностных свойств ГАП, связанных с его взаимодействием через сеть водородных связей с окружающей средой, имеющей свой изменяющийся рН-индекс. Другой важный вопрос заключается в том, что высокое внешнее давление может влиять на включение атомов водорода (или протонов) в поверхностные слои ГАП и НЧ ГАП с накоплением их высокой концентрации, которое может создать общий высокий рост положительных зарядов на поверхности. Рассчитанные значения величин энергетических барьеров объясняют длительное сохранение поляризационного заряда, который наблюдается в экспериментах. Этот эффект аналогичен сохранению заряда в электретах. Поляризация поверхности ГАП влияет на движение живых клеток и приводит к возрастанию их адгезии на заряженной поверхности ГАП. Эти результаты моделирования хорошо подтверждаются экспериментальными данными, которые показывают, что число присоединенных остеобластов увеличивается, когда величина отрицательного электрического заряда увеличивается на поверхности образца ГАП [1, 2].

Полученные результаты позволяют уточнить свойства поверхности ГАП и особенности ее преобразования для НЧ ГАП, особенно при изменении внешних параметров, и имеют очень важное значение для дальнейшего развития исследований и создания новых вариантов применения НП ГАП в сфере нанобиомедицины и нанотехнологий.

1. V.S.Bystrov, E. Paramonova, Yu. Dehtyar, A. Katashev, A. Karlov, N. Polyaka, A.V. Bystrova, A. Patmalnieks and A. L. Kholkin. J. Phys. Condens. Matter. 23, 065302 (2011).

2. Yu. Dehtyar, V. Bystrov, I. Khlusov, N.Polyaka, R. Sammons and F.Tyulkin. - In: The Society for Biomaterials 2011 Annual Meeting.-April 13-16, 2011, Orlando, Florida,USA.

Сборка наноструктур в приповерхностной плазме барьерного разряда

Л. А. Васильева, В. В. Андреев

ФГБОУ ВПО «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова», Чебоксары, Россия

В настоящее время значительный научный и практический интерес сосредоточен на разработке новых энергосберегающих и эффективных методов возбуждения электрических разрядов вблизи поверхности твердого диэлектрика (так называемый барьерный разряд). Это вызвано тем, что в барьерном разряде сравнительно легко реализовать химический синтез в промышленных масштабах [1, 2]. В последнее время также активно развиваются методы синтеза различных наноструктур в барьерном разряде. Кроме того, существенный интерес к данной проблеме вызван возможностью использования приповерхностной плазмы для управления высокоскоростными потоками воздуха путём воздействия на характеристики пограничного слоя вблизи летательных аппаратов с помощью электрических разрядов [3, 4]. Характеристики пограничного слоя могут изменяться, например, при взаимодействии синтезированных в электрическом разряде наночастиц с молекулами обтекающего объекта газа. Исследования приповерхностной плазмы барьерного разряда важны также с точки зрения разработки эффективных способов контроля процессами горения в газовых потоках.

Здесь наиболее сложными и важными проблемами, в частности, являются:

- 1) поиск оптимальных режимов развития барьерного электрического разряда;
- 2) определение оптимальной энергии, которую необходимо вкладывать в разряд;
- 3) нахождение оптимальной конфигурации электрического поля в разрядной ячейке;
- 4) оптимизация плазмохимических атомных и молекулярных процессов в газовых разрядах и другие.

В работе представлены результаты анализа синтеза различных наноструктур в барьерном разряде.

Из результатов, полученных в данном исследовании, в частности, также следует, что для генерации оптимальной конфигурации электрического поля в разрядной ячейке поверхностного барьерного разряда, наряду с физико-химическими характеристиками диэлектрика, величины подаваемого на электроды напряжения и других параметров системы, следует учитывать геометрию металлических электродов.

Полученные результаты представляют интерес также в связи с тем, так как барьерный разряд является одним из эффективных способов создания неравновесной плазмы при высоких давлениях для разнообразных технологических применений.

1. V.V. Andreev, Yu.P. Pichugin, V.G. Telegin, G.G. Telegin, *Plasma Physics Reports*. **37**, 12 (2011).
2. V.V. Andreev, L.A. Vasilyeva, A.N. Matyunin, Yu.P. Pichugin, *Plasma Physics Reports*. **37**, 13 (2011).
3. В.М. Шибков, А.Ф. Александров, А.П. Ершов и др., *Физика плазмы*. 31, 9 (2005).
4. В.М. Шибков, А.Ф. Александров, А.П. Ершов и др., *Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия*. 5 (2004).

Исследование сигма-фазы в нанопорошковых магнитотвердых сплавах Fe-Cr-Co

Т. А. Вомпе, И. М. Миляев, М.Е. Пруцков, А.Б. Анкудинов, В.С. Юсупов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

Единственным классом магнитотвердых материалов, обладающих хорошим сочетанием достаточно высоких магнитных ($H_c = 40 - 80$ кА/м, $B_r = 1,1 - 1,6$ Т, $(BH)_{\text{макс.}} = 32 - 72$ кДж/м³) и прочностных свойств ($\sigma_b \sim 800 - 1000$ МПа), являются сплавы системы Fe-Cr-Co (ГОСТ 24897-81). Они относятся к деформируемым сплавам как в горячем, так и в холодном состоянии, обладают удачным сочетанием высоких магнитных свойств с коррозионной стойкостью и пластичностью.

Высококоэрцитивное состояние в этих сплавах связано со спинодальным распадом высокотемпературного α -твердого раствора с ОЦК решёткой в процессе термомагнитной обработки или предварительной пластической деформации и последующим многоступенчатым отпуском [1].

Из литературных данных известно, что постоянные магниты, изготовленные методами порошковой металлургии практически не уступают по своим магнитным свойствам магнитам, изготовленным из проката [2-3].

Ранее в работах [4-5] было показано, что образование сигма-фазы в Fe-Cr-Co сплавах является нежелательным, так как резко снижаются магнитные свойства (в первую очередь остаточная индукция). С другой стороны образование сигма-фазы можно рассматривать как процесс дестабилизации α -твердого раствора, который предшествует распаду и формированию высококоэрцитивного состояния этих сплавов.

На сегодняшний момент необходимы систематизированные экспериментальные данные о влиянии сигма-фазы на магнитные свойства как с точки зрения понимания процесса формирования высококоэрцитивного состояния, так и с целью поиска новых путей повышения магнитных свойств магнитотвердых сплавов системы Fe-Cr-Co.

В данной работе изучали образование сигма-фазы в порошковых магнитотвердых сплавах системы Fe-Cr-Co.

Кинетику образования и структурные характеристики выделения сигма-фазы определяли методами измерения твёрдости, намагниченности насыщения, металлографического и рентгеноструктурного анализа. С помощью сканирующего электронного микроскопа изучали распределение элементов после многочасовых отпусков.

1. H. Kaneko, M. Homma and K. Nakamura, AIP Conf. Proc. Mag. Mater. **1088-1092**, 5(1971).
2. M. L. Green, R. C. Scherwood, Wong C. C. J. Appl. Phys. **2398**, 53, 3(1982).
3. Pat. 4401482 (USA). (1983).
4. Ю.И. Устиновщиков, Б.Е. Пушкарев, Металлы. **32-39**, 4(2005).
5. Blachowski et al. Phil. Mag. Let. **87-91**, 79, 2(1999).

Выявление идентификационных особенностей многослойных углеродных нанотрубок на основе рентгенодифракционных картин рассеяния

С.В. Данилов¹, Д.В. Логинов¹, А.Д. Фофанов¹

¹ Петрозаводский Государственный Университет, Петрозаводск, Россия

В работе исследовались порошковые образцы углеродных нанотрубок (УНТ) типа "русская матрешка" диаметром 10-20 нм (образец 1) и 20-30 нм (образец 2), длиной ~30 мкм, полученные из «Aray International Group Ltd».

Исследуемые образцы рентгенографировались на дифрактометре ДРОН-6 в FeK α излучении в интервале углов рассеяния 3-145°, кристалл монохроматор был установлен в первичных лучах. Рентгенографирование образцов проводилось в геометрии на отражение. Зависимости интенсивности от угла рассеяния $I(2\theta)$ были перестроены в масштаб $I(s)$, где s – длина дифракционного вектора (рис. 1а), исправлены на поглощение поляризацию, переведены в электронные единицы (эл. ед.) и исправлены на комптоновское рассеяние.

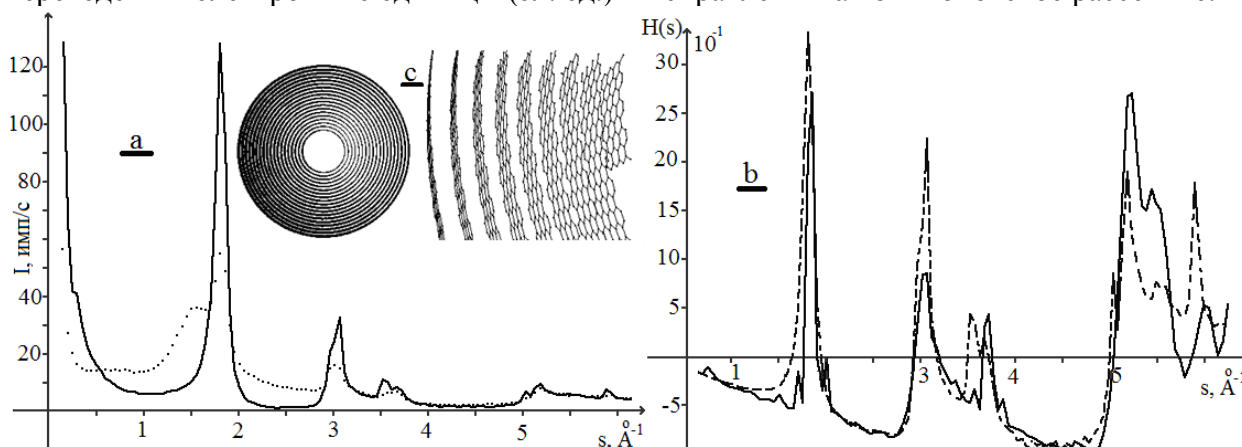


Рис. 1. а) Кривые распределения интенсивности рассеяния $I(s)$: ... образец 1, — образец 2; б) s - взвешенные интерференционные функции $H(s)$: --- образец 2, — модель нанотрубки; в) модель УНТ.

Полученные кривые распределения $I(s)$ отличаются между собой в первую очередь наличием на образце 1 размытого максимума в области $s=1.5\text{Å}^{-1}$. Наличие максимума в области $s=1.8\text{Å}^{-1}$ свидетельствует о том, что УНТ в образцах 1 и 2 многослойные.

Методика построения моделей многослойных нанотрубок схожа с методикой построения моделей однослойных УНТ, подробно описанной в работе [1].

На рис. 1б кривые $H(s)$ для образца 2 сравниваются с расчетом для сконструированной УНТ с внутренним радиусом 20.34 Å, внешним радиусом 81.38 Å и числом слоев - 19. Длина составила ~20 Å. Степень хиральности - 0.5 соответствует УНТ типа "кресло" (рис. 1с). Сравнение (рис. 1б) экспериментальной и теоретической кривых $H(s)$ показывает определенное подобие картин рассеяния от модельной нанотрубки и от образца. Имеющиеся различия в картинах рассеяния обсуждаются.

Следующим этапом работы является построение искаженных моделей, кластеров состоящих из нанотрубок различного размера и ориентации для достижения наилучшего согласия эксперимента и теоретического расчета.

Исследования проведены при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. № П801 от 24 мая 2010 г.

1. Данилов С.В., Фофанов А.Д., Построение моделей однослойных углеродных нанотрубок и расчет координат атомов в них // Ученые записки Петрозаводского Государственного Университета, 2011, № 6 (119), с.109-114

Вычисления коэффициента абсорбции в случае невырожденного электронного газа в наноструктурах

Р. Г. Абасзаде, Р. М. Джафаров

Нахчыванский государственный университет, Нахичеван, Азербайджан

Abstract: The absorption coefficient has been calculated in the case of a nondegenerate electron gas in nanostructures.

Низкоразмерные системы являются одним из наиболее интересных и перспективных объектов современной физики твердого тела. Успехи современной технологии наноструктур позволяют создавать системы довольно сложной геометрической формы. Характерным примером являются так называемые квантовые кольца, получаемые на основе гетероструктур [1,2], в которых формируется двумерный электронный газ.

Коэффициент поглощения в случае невырожденного газа в первом порядке теории возмущений по константе электрон-фононного взаимодействия описывается выражением [3]

$$\alpha = \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon(\omega)}}{c\hbar N_f} \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right] \sum_{n'l'_e} \sum_{n'l_e} f_0(E_{n'l_e}) \left| \langle n'l_e | H_R | n'l'_e \rangle \right|^2 \delta(E_{n'l_e} - E_{n'l'_e} + \hbar\omega) \quad (1)$$

где $\varepsilon(\omega)$ -вещественная часть диэлектрической проницаемости, f -волновой вектор фотона,

$f_0(E_{n,l_e})$ -электронная функции распределения, множитель $\left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right]$ учитывает

вынужденное испускание фотонов.

Оператор электрон-фононного взаимодействия имеет вид

$$H_R = \frac{e}{m^*} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N_k}{\varepsilon(\omega)\omega}} e_k \left(p + \frac{e}{c} A \right) \quad (2)$$

где A - векторный потенциал однородного магнитного поля, e_k -вектор поляризации фотона.

Нормировочная константа функции распределения в (1) находится из условия

$$\sum_{l_e} \sum_n f_0(E_{n,l_e}) = N$$

Здесь N - число электронов в единице объема.

1. A.Fuhrer, S.Luscher, T.Ihn, T.Heinzel, K.Ensslin, W.Wegscheider, M.Bichler. Nature 413, 822 (2001).
2. U.Keyser, S.Borck, R.Haug, M.Bichler, G.Abstreiter, W.Wegscheider, Semicond. Sci.Tech.17,122 (2002).
3. Ф.Г. Басс, И.Б. Левинсон. ЖЭТФ **49**, 914 (1970)

Влияние условий ионной имплантации на перколяционный и кластерный ферромагнетизм в тонких пленках Ge:Mn

А. И. Дмитриев, Р. Б. Моргунов

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Работа посвящена созданию экспериментальных условий для повышения температуры Кюри в подсистеме диспергированных ионов Mn^{2+} ионно-имплантированных тонких пленок $Ge_{1-x}Mn_x$.

Установлено, что увеличение флюенсов при имплантации приводит к росту температур Кюри в подсистеме диспергированных ионов Mn^{2+} и кластеров Ge_3Mn_5 . Первый эффект обусловлен увеличением эффективной концентрации ионов Mn^{2+} , участвующих в косвенном ферромагнитном упорядочении, происходящем по перколяционному сценарию. Второй – увеличением размеров нанокластеров Ge_3Mn_5 .

Обнаружено также, понижение температуры ионной имплантации приводит к подавлению термоактивационной агрегации ионов Mn^{2+} в кластеры Ge_3Mn_5 и увеличению их концентрации в диспергированном состоянии. Увеличение эффективной концентрации ионов Mn^{2+} , участвующих в косвенном ферромагнитном обмене, приводит к значительному повышению температуры перколяционного магнитного упорядочения в подсистеме диспергированных ионов Mn^{2+} . Подавление агрегации ионов марганца в кластеры Ge_3Mn_5 приводит к понижению их температуры Кюри.

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-1764.2011.3. Авторы признательны сотруднику Национальной физической лаборатории Великобритании О. Л. Казаковой за предоставленные образцы.

Спин-решёточная релаксация в жидких индии и галлии, внедренных в нанопоры

Н. И. Зайцева

Санкт-Петербургский государственный университет (физический факультет), Санкт-Петербург, Россия

Исследование спин-решеточной релаксации позволяет получать немаловажную информацию о структуре нанокompозитов и о фазовых переходах веществ в условиях ограниченной геометрии. Целью данной работы является обзор исследований по данной теме.

Известно, уровень энергии ядра в магнитном поле расщепляется на $2I+1$ зеемановских уровней. Изолированное ядро может находиться на одном из энергетических уровней. Если рассматривать не одно, а совокупность большого числа невзаимодействующих ядер, то все они будут распределены по зеемановским уровням. Воздействие внешнего переменного магнитного поля индуцирует переходы ядер между зеемановскими уровнями. По прошествии достаточно длительного времени после окончания внешнего воздействия система ядерных спинов, имевшая температуру T_0 , должна прийти в состояние термодинамического равновесия с окружающей средой. Процесс установления равновесия между спиновой системой и тепловыми колебаниями решетки, называемой спин-решеточной релаксацией, мы и будем изучать.

В ходе исследования жидкого индия^[2], внедренного в искусственные опалы (с размером силикатных шаров 240 и 210 нм) и пористые стекла (диаметр пор около 7 нм), было обнаружено значительное сокращение времени спин-решеточной релаксации для изотопа ^{115}In , по сравнению с объемным расплавом индия. Было показано, что ускорение спиновой релаксации, главным образом, обусловлено увеличением квадрупольного вклада. Измерения показали, что квадрупольный механизм релаксации был доминирующим и, что время корреляции атомной подвижности увеличивалось, по сравнению с объемным образцом более чем в 6 раз в зависимости от размера пор. Увеличение времени корреляции демонстрирует значительное замедление атомной диффузии для расплавленного индия в условиях ограниченной геометрии.

Кроме индия, также исследовался жидкий галлий^[1,3]. Галлий имеет два изотопа, ^{69}Ga и ^{71}Ga , со слегка отличающейся распространенностью. Оба изотопа имеют спин $3/2$ и различные гироманнитные отношения γ_n и квадрупольные моменты Q ($Q=0.168$ барн и 0.106 барн, и $\gamma_n=6.44 \cdot 10^{-7}$ и $8.18 \cdot 10^{-7}$ рад \cdot Тл $^{-1} \cdot$ с $^{-1}$ для ^{69}Ga и ^{71}Ga , соответственно). Это позволяет разделять магнитный и электрический квадрупольный вклады в ядерную спиновую релаксацию.

Исследования проводились на образцах с размером частиц галлия 50 и 5 μm в волокнах ваты, а также на образцах галлия, внедренного в искусственный опал с диаметром силикатных шаров 250 нм и в пористые стекла с размерами пор 8 нм^[1], 16 и 2 нм^[3]. Измерения проводились в температурном диапазоне от 330 К и до замерзания галлия в порах. Нужно отметить, что температура плавления объемного галлия равна 303 К, кроме того, галлий легко переохлаждается ниже комнатной температуры, однако для малых частиц температура плавления значительно понижается по сравнению с объемным галлием.

Было обнаружено, что релаксация для обоих изотопов галлия, как и в случае с индием, существенно ускоряется по сравнению с релаксацией объемного расплава. Измерения ЯМР для двух изотопов галлия показали, что доминирующий механизм релаксации менялся с магнитного на квадрупольный. Время корреляции флуктуаций градиентов электрического поля было оценено с использованием данных для вклада квадрупольной релаксации, и было обнаружено, что оно существенно возросло по сравнению с объемным образцом, что соответствовало понижению подвижности в жидком галлии в нанопористых матрицах. Из этого можно сделать вывод о схожих результатах в исследованиях жидкого индия и галлия.

1. E. V. Charnaya, T. Loeser, D. Michel, C. Tien, D. Yaskov, and Yu. A. Kumzerov, *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 097602 (2002).
2. E. V. Charnaya, C. Tien, Yu. A. Kumzerov, and A. V. Fokin, *Phys. Rev. B* **70**, 052201 (2004).
3. E. V. Charnaya, C. Tien, W. Wang, M. K. Lee, D. Michel, D. Yaskov, S. Y. Sun, and Yu. A. Kumzerov, *Phys. Rev. B* **72**, 035406 (2005).

Термодинамика легированных порошков диоксида урана

Н.А. Иванова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), Москва, Россия

Одним из перспективных направлений в развитии ядерной энергетики является использование смешанного уран-плутониевого оксидного топлива $U_{1-y}Pu_yO_{2-x}$ в быстрых и повышение глубины выгорания оксидного уранового топлива в тепловых реакторах. При глубоком выгорании за счет накопления продуктов деления существенно изменяется структура, химический и фазовый состав оксидного топлива, что влияет на изменение его термодинамических свойств, в частности, на такую важную характеристику, как кислородный потенциал $\Delta\bar{G}_{O_2}$. От его значения зависят химическое состояние продуктов деления, степень окисления внутренней поверхности оболочки твэла при выгорании топлива, технологические и эксплуатационные свойства оксидного топлива.

Однако, для получения предварительных результатов по изучению характера изменения термодинамических свойств таблеток смешанного уран-плутониевого оксидного топлива $U_{1-y}Pu_yO_{2\pm x}$ в зависимости от величины нестехиометрии, содержания плутония и температуры целесообразно вначале проводить измерения на уран-цериевых оксидах $U_{1-y}Ce_yO_{2\pm x}$. Это объясняется тем, что церий является химическим аналогом плутония и в то же время не относится к радиоактивным и токсичным материалам, что облегчает проведение экспериментов и их безопасность.

Порошки уран-цериевых оксидов UO_2-CeO_2 получали методом совместного осаждения из смеси азотнокислых растворов, что обеспечивает максимально равномерное распределение легирующего оксида в конечной смеси. Таблетки на основе UO_2 , изготовленные методом порошковой металлургии, имели состав $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{1,999}$.

Керамографическим и рентгеновским фазовым анализами изучены фазовый состав и структура легированного оксидного топлива. Показано, что образец содержит только фазу на основе кубического диоксида урана. Это свидетельствует о растворении церия в диоксидной матрице и об образовании равновесного твердого раствора замещения церия в диоксиде урана в достехиометрической области. Методами электродвижущей силы твердоэлектролитной гальванической ячейки и твердофазного кулонометрического титрования установлены закономерности изменения кислородного потенциала в зависимости от температуры и величины нестехиометрии для оксида $U_{0,718}Ce_{0,282}O_{2\pm x}$. В до- и застехиометрической областях характер температурных и концентрационных зависимостей кислородного потенциала уран-цериевого оксида подобен тем, которые имеют место и для уран-плутониевого оксида.

1. M. Rato, T. Tamura, K. Konashi, *J. Nucl. Mater.* **385**, 419 (2009).
2. S. Vana Varamban, V. Ganesan, P.R. Vasudeva Rao, *J. Nucl. Mater.* **389**, 72 (2009).
3. M. Kato, K. Konashi, N. Nakae, *J. Nucl. Mater.* **389**, 164 (2009).
4. M. Kato, K. Takeuchi, T. Uchida, et al., *J. Nucl. Mater.* **414**, 120 (2011).
5. P.R. Vasudeva Rao, S. Anthonysamy, M.V. Krishnaiah, et al., *J. Nucl. Mater.* **348**, 329 (2006).

Синтез и физико-химическое исследование твердых растворов на основе $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-\delta}$ с ультрамалым размером частиц

О.С. Иванова, А.Е. Баранчиков, В.К. Иванов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

Интерес к материалам на основе диоксида церия в значительной степени обусловлен возможностью использования CeO_2 при создании катализаторов, а также биомедицинскими применениями CeO_2 , основанными на высокой биологической активности диоксида церия (прежде всего, антиоксидантной). Было установлено, что кислородная нестехиометрия является одним из важнейших параметров, определяющих функциональные свойства наноматериалов на основе диоксида церия. Следовательно, разработка методик направленного синтеза нанокристаллического CeO_2 с различной нестехиометрией по кислороду в настоящее время является актуальной задачей, эффективное решение которой может привести к получению новых классов катализаторов и фармацевтических препаратов.

В настоящей работе был предложен новый метод синтеза наноматериалов на основе CeO_2 , допированного ионами редкоземельных элементов. Синтез золь нанодисперсных твердых растворов проводили осаждением из нитратов церия(III) и гадолиния в заданном молярном соотношении водным раствором NaOH при температуре кипения пропиленгликоля (140°C) в течение 1, 2 и 4 ч.

Согласно результатам рентгенофазового анализа (РФА), все материалы, полученные в указанных условиях, являются однофазными и обладают кристаллической структурой флюорита. По мере увеличения номинальной степени допирования от 0 до 20 % наблюдается смещение положения дифракционных максимумов в сторону меньших углов, что свидетельствует о вхождении ионов РЗЭ в кристаллическую решетку диоксида церия. Для определения значений параметров элементарной ячейки всех твердых растворов было выполнено уточнение кристаллической структуры твердых растворов по методу Ритвельда. Было установлено, что все полученные зависимости параметра ячейки от номинального содержания допирующего агента являются линейными. Согласно результатам рентгеноспектрального микроанализа (РСМА), в состав твердых растворов входят соответствующие катионы РЗЭ, причем по мере увеличения концентрации РЗЭ в исходных гликольных растворах их содержание в твердых растворах также увеличивается. Дополнительное подтверждение факта образования твердых растворов было получено на основании анализа данных рамановской спектроскопии. На спектрах всех образцов $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-\delta}$, помимо основного пика с максимумом в области $449\text{--}461\text{ см}^{-1}$ наблюдаются также уширенные максимумы в области 550 и 610 см^{-1} , возникающие как следствие кислородной нестехиометрии диоксида, присущей этому материалу в нанодисперсном состоянии. По данным просвечивающей электронной микроскопии, средний размер частиц твердых растворов составляет $1.5\text{--}2.2\text{ нм}$, что хорошо согласуется с данными рентгеновской дифракции. Было установлено, что увеличение продолжительности сольвотермальной обработки от 1 до 2 и 4 ч никак не сказывается на размерах наночастиц твердых растворов. По данным динамического светорассеяния, размеры агрегатов в золях твердых растворов, содержащих гадолиний, неодим, европий и иттербий, составляют $30\text{--}60\text{ нм}$, что свидетельствует о низкой степени агрегированности наночастиц.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 11-03-00828.

Магнитооптические функциональные гетероструктуры для качественной и количественной визуализации микрораспределений магнитного поля

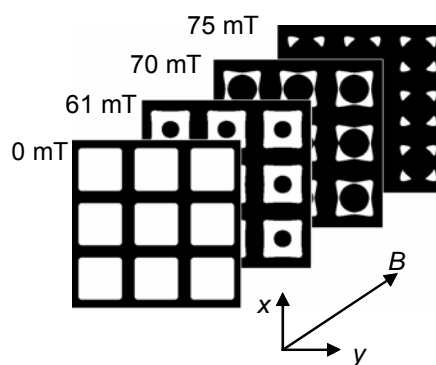
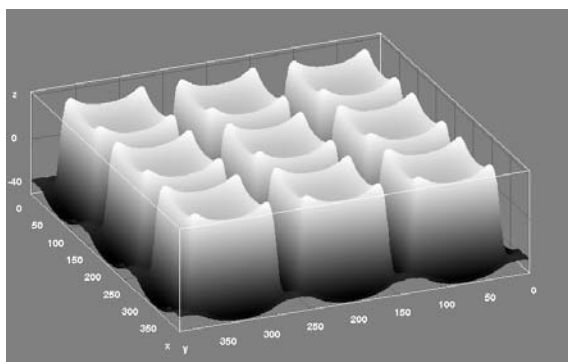
Е.И. Капдунова

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

Исследуются магнитные свойства (доменная структура, магнитная анизотропия, магнитооптический эффект Фарадея и др.) эпитаксиальных тонкоплёночных гетероструктур на основе висмутзамещённых гранатов ($(R_{3-x}Bi_x)(Fe_{5-y}M_y)O_{12}$ (R – редкоземельный, M – переходный элемент), нашедших в последнее время применение для визуализации (индикации) пространственных распределений магнитного поля различных микрообъектов (носителей магнитной записи информации, магнитных микроэлектромеханических систем (MagMEMS) и др.) [1]). Различают два основных вида магнитооптических индикаторных плёнок (МОИП) – плёнки с одноосной (перпендикулярной) магнитной анизотропией, и квазиизотропные («планарные») МОИП с минимизированными константами естественной и наведённой магнитной анизотропии. В настоящей работе исследуется возможность расширения функциональных возможностей (получения количественных оценок исследуемых полей) с помощью одноосных плёнок, которые, в отличие от планарных МОИП, считались ранее пригодными лишь для качественных наблюдений.

Исследовались распределения полей плёночных ($d \sim 10$ мкм) постоянных магнитов Nd-Fe-B, полученных методом магнетронного распыления на монокристаллические подложки Si. С помощью термомагнитной лазерной записи на этих плёнках создавалась структура антипараллельно намагниченных полосовых или шахматных областей с характерными размерами порядка 10...100 мкм. Для достижения поставленной цели – получения количественных данных с помощью одноосных МОИП, была сконструирована магнитная система, смонтированная на предметном столике поляризованного оптического микроскопа и создающая градуированные поля смещения в области образца, находящегося в контакте с МОИП.

На рисунке представлен пример расчётного распределения поля и его отображения на МОИП в виде куба данных для разных значений внешнего поля. Видно, что в хорошем согласии с расчётом серийные сечения границами 180° -ных доменов одноосной МОИП соответствуют изолиниям нулевых значений суммарного поля образца и известных полей смещения. Таким образом, система позволяет получать полную количественную картину распределения z -компоненты поля, при этом МОИП играет роль нуль-индикатора. Помимо повышения точности, описанный метод позволяет также расширить диапазон измерений до значений, превышающих поле насыщения МОИП.



1. R. Grechishkin, S. Chigirinsky, et al., Magnetic Imaging Films, in: B. Azzarboni (ed.), Magnetic Nanostructures in Modern Technology, pp. 195-224, Springer, 2008.

Получение и исследования декагональных квазикристаллов Al-Co-Cu

М.В. Ключева, Д. А. Шулятев, Н.А.Козловская

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

В силу различий между кристаллами и квазикристаллами, а также между квазикристаллами и аморфными материалами задача получения однофазных квазикристаллов представляется весьма важной с точки зрения получения достоверных сведений об их структуре и свойствах. В данной работе были подобраны условия для получения квазикристаллических образцов системы $Al_{65}Co_{7,5}Cu_{27,5}$. Выращивание монокристаллов производилось методом спонтанной кристаллизации в контролируемой атмосфере. Методами рентгенофазового анализа подтверждена однофазность, а с помощью Лауэ анализа доказана монокристалличность образцов. На исследуемых кристаллах установлена температурная зависимость параметров решётки.

Исследование давления полидисперсной магнитной наножидкости Теория и эксперимент

Е.В.Крутикова¹, Е.С.Минина², С.С.Канторович^{1,2}

¹ *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

² *Институт компьютерной физики, Штутгарт, Германия*

В жидком состоянии сильномагнитные вещества в природе отсутствуют, поэтому около сорока лет назад, в результате многолетних попыток, были синтезированы магнитные наножидкости (ферроколлоиды, феррожидкости). Магнитные наножидкости обладают набором уникальных свойств - сочетают в себе текучесть и сильные магнитные свойства, что является основой их применения в технологических процессах, медицине и даже современном искусстве. Самым приоритетным направлением внедрения магнитных наножидкостей сейчас является биомедицина: разрабатываются нетрадиционные методы диагностики и терапии раковых заболеваний. Поэтому важно в полной мере изучить свойства магнитных жидкостей при изменении различных физико-химических условий.

Данная работа посвящена изучению поведения давления полидисперсных магнитных наножидкостей как функции диполь-дипольного магнитного взаимодействия и полидисперсности. Для теоретического вычисления давления магнитная наножидкость моделировалась системой бидисперсных дипольных мягких сфер [1,2]. При вычислении давления использовался метод, основанный на диаграммном разложении дипольного взаимодействия, с последующим применением этого разложения для вычисления парной корреляционной функции и непосредственно давления. Дополнительно проводилось сравнение с давлением, полученным из термодинамического подхода при интегрировании парной корреляционной функции с производной от функционала [2-4].

Для проверки адекватности построенных моделей было проведено сравнение с результатами компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Компьютерное моделирование проводилось также для систем с интенсивным межчастичным взаимодействием, для которого необходимо использовать другие теоретические методы. Для таких систем, однако, благодаря полученной в компьютерном эксперименте кривой давления от плотности магнитных частиц, удается методом интерполяции вычислять вириальные коэффициенты.

Проведен анализ построенных моделей и зависимости давления от изменения физических параметров магнитной наножидкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента МК-2221.2011.2.

1. Krutikova E.V., Elfimova E.A., Physics of Particles and Nuclei Letters, **8** (10), (2011).
2. Cerda J., Elfimova E., Ballenegger V., Krutikova E., Ivanov A., Holm C., JMMM., **323** (10), (2011).
3. Балеску Р., М.:Мир, т. 1. с. 405 (1978).
4. Дж.Гиршфельдер, Ч.Кертисс и др., М: ИИЛ, с.931 (1961).

Характеристика поверхности порошков шунгита

Н.В. Кулик, Н.Н.Рожкова

Институт Геологии Карельского Научного Центра РАН, Петрозаводск, Россия

Постоянно растущий интерес к нанокуглеродным материалам обусловлен широким спектром возможностей их применения в науке и технологии. Шунгит – высокоуглеродистая порода Карелии, перспективный источник нанокуглерода, который может быть использован в качестве адсорбентов, катализаторов, для производства композитов, в медицине и биотехнологии. В настоящее время структура и свойства наночастиц шунгита недостаточно исследованы. Для изучения углеродных материалов используют различные методы: ИК и фотоэлектронной спектроскопии, титриметрические и электрокинетические [1].

Целью данной работы является характеристика поверхности порошков шунгита, подвергнутых различной обработке.

Большинство физико-химических свойств углеродсодержащих материалов определяется наличием и концентрацией кислородсодержащих функциональных групп (КФГ) на их поверхности. Методика потенциометрического титрования Боэма, основанная на нейтрализации различной кислотности функциональных групп основаниями разной силы, является одним из наиболее доступных методов и позволяет получать точные и воспроизводимые результаты для углеродных образцов [2]. Удельная поверхность порошков была определена по методу низкотемпературной десорбции азота.

Объект - шунгитовая порода III разновидности (по классификации П. А. Борисова) Зажогинского месторождения (содержание углерода 34 вес.%). Исследовались образцы, различающиеся обработкой и по гранулометрическому составу: 1 – исходный порошок (размер частиц менее 40 мкм), 2 – исходный порошок после многократной обработки дистиллированной водой, 3 – нанопорошок. Нанопорошок – это полученный недавно, малоизученный материал, однородный по составу и размерам частиц.

Анализ полученных результатов показал, что обработка шунгитового порошка не влияет на наличие кислородных функциональных групп на поверхности, но влияет на общее содержание и соотношение КФГ. Наибольшее количество обнаружено в порошках обработанных водой, наименьшее - в нанопорошке (таблица). На поверхности 1 образца преобладали фенольные ФГ, количество лактонных и карбоксильных ФГ было сопоставимо друг с другом. Количество лактонных групп уменьшилось в два раза, а карбоксильных групп увеличилось в три раза на поверхности 2 образца, относительно 1. По сравнению с 1 и 2 образцами, на поверхности нанопорошка содержание фенольных ФГ увеличилось, а содержание карбоксильных ФГ уменьшилось.

Таблица. Содержание кислородсодержащих функциональных групп на поверхности порошков шунгитов.

образец	удельная поверхность (м ² /г)	кислородсодержащие функциональные группы			
		Σ (ммоль-экв/м ²)	фенольные (ммоль-экв/м ²)	лактонные (ммоль-экв/м ²)	карбоксильные (ммоль-экв/м ²)
1	32	$1.82 \cdot 10^{-3}$	$1.16 \cdot 10^{-3}$	$0.32 \cdot 10^{-3}$	$0.34 \cdot 10^{-3}$
2	32	$2.3 \cdot 10^{-3}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$0.14 \cdot 10^{-3}$	$0.97 \cdot 10^{-3}$
3	100	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$1.36 \cdot 10^{-3}$	$0.16 \cdot 10^{-3}$	$0.11 \cdot 10^{-3}$

1. Н. Н. Рожкова, В. С. Рожкова, И. В. Кочнева, А. Г. Туполев Исследование химических свойств поверхности дисперсного шунгита / Материалы международной конференции Углерод: минералогия, геохимия и космохимия 24-26 июня, Сыктывкар, 121, (2003).
2. J. Boehm Н.Р. Chemical identification of surface groups// Advances in catalysis and related subjects. **16**, 197, (1966).

Линейный дихроизм в коллоидных растворах на основе пластинчатых частиц гексаферрита стронция

*С. Е. Кушнир¹, Д. С. Кошковаев¹, Д. М. Зуев¹, А. И. Гаврилов¹, П. Е. Казин^{2, 1},
Ю.Д. Третьяков^{2, 1}*

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (факультет наук о материалах) Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (химический факультет), Москва, Россия*

Под действием внешнего магнитного поля частицы магнитной жидкости ориентируются, изменяя, таким образом, оптические свойства жидкости. В случае ориентации анизотропных частиц возникает эффект линейного дихроизма, т.е. зависимость оптического поглощения жидкости от взаимной ориентации плоскости поляризации (**Р**) света и вектора напряжённости приложенного магнитного поля (**Н**). Чем больше анизотропия формы частиц и степень их ориентации, тем сильнее проявляется эффект дихроизма, который можно количественно описать как соотношение оптических плотностей при перпендикулярной и параллельной ориентации **Р** и **Н**. Частицы магнитотвёрдого гексаферрита стронция $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ обычно обладают пластинчатой формой и под действием магнитного поля ориентируются перпендикулярно силовым линиям. В тоже время синтез стабильных коллоидных растворов на основе магнитотвёрдых частиц гексаферрита представляет проблему, вследствие их термодинамической нестабильности.

Целью данной работы являлась разработка методики синтеза коллоидных растворов гексаферрита стронция, проявляющие зависимость оптического пропускания в магнитном поле.

Синтез проводили с использованием стеклокерамического и гидротермального методов. Были получены пластинчатые наночастицы гексаферрита стронция со средним диаметром до 250 нм и отношением диаметра к толщине до 16. Путём ультразвуковой обработки частиц в разбавленной уксусной кислоте были получены коллоидные растворы. Метод динамического светорассеяния показал, что положение максимума распределения по размеру рассеивающих центров в коллоидном растворе совпадает со средним диаметром выделенных наночастиц, определённым по микрофотографиям. Это говорит об отсутствии крупных агрегатов в растворе. Частицы в коллоидном растворе стабилизированы электростатически, их ζ -потенциал лежит в интервале $+40 \div 70$ мВ.

Кривая намагничивания коллоидных растворов полностью обратима, т.е. частицы в растворе поворачиваются под действием магнитного поля. При этом распределение по объёму частиц в коллоидном растворе не выявляет образование агрегатов. Концентрация магнитных частиц в растворе составляет $1 \cdot 10^{-3} \div 60 \cdot 10^{-3}$ об. %.

Для полученных коллоидных растворов максимальное отношение оптической плотности в различных направлениях при 550 нм в поле 114 Э составляет 3,8, при этом оптическое пропускание (при длине оптического пути 1 см) изменяется в 2 раза уже в поле 3,5 Э. Время реакции такой системы на магнитное поле составляет менее 1 мс. Подобные магнитные жидкости могут применяться в оптических модуляторах и детекторах магнитного поля.

О механическом сплавлении системы медь – фуллериты C_{60/70}

Н.С. Ларионова, Р.М. Никонова, В.И. Ладьянов

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

Механическое сплавление (МС) в настоящее время используют как один из перспективных методов получения наноструктурированных материалов. При высокоэнергетическом перемешивании возможно синтезирование различных неравновесных фаз в твердом состоянии при низких температурах. Исследование и описание механизмов твердофазных реакций является одним из главных вопросов при изучении процессов МС.

В настоящей работе методом МС получены наноструктурированные композиты Cu-C_{60/70} с содержанием 5 и 25 ат.% смеси фуллеритов C_{60/70} (~18%C₇₀). Образцы подвергались деформационному воздействию в шаровой планетарной мельнице АГО-2С мощностью 28,1 Вт в среде инертного газа (P_{Ar} = 0,1 МПа). Полученные порошки исследовались методами рентгеноструктурного (Bruker D8 Advance, CuK α излучение) и термического анализа (совмещенный ТГА/ДСК/ДТА анализатор SDT Q600, скорость нагрева 10°C/мин, проточный аргон), оптической (Neohpot 21) и растровой электронной микроскопии (QUANTA 200 3D с использованием детектора вторичных электронов).

Несмотря на то, что система Cu-C является системой с положительной энтальпией смешения, при МС в ней возможно образование пресыщенного твердого раствора углерода в меди [1]. Последнее проявляется в увеличении параметра решетки меди поле 2ч МС от 3,6155±0,0001Å до 3,6186±0,0001 Å при содержании 25 ат.% C_{60/70}. При этом с увеличением длительности размола наблюдается уменьшение размера областей когерентного рассеяния (ОКР) и рост уровня микроискажений в решетке меди. Показано, что для получения наноструктурного состояния время размола составляет 0,5-1 ч. Для объяснения механизма механического сплавления использованы интерфейсная модель и представления о дислокационном массопереносе [2] при деформационном перемешивании.

1. R.M.Nikonova, N.S.Pozdeeva, V.I.Lad'yanov. Influence of nanostructural carbon forms on deformation behaviour of copper at mechanical activation // Joint International conference "Advanced Carbon Nanostructures" (ACN'2011), St Petersburg, 2011.
2. Е.П. Елсуков, Г.А. Дорофеев Механическое сплавление бинарных систем Fe-M (M=C, Si, Ge, Sn): кинетика, термодинамика и механизм атомного перемешивания // Химия в интересах устойчивого развития **10** (2002).

Исследование процессов релаксации электронной подсистемы полупроводниковых нанокристаллов методом нестационарной спектроскопии вторичного свечения

М. Ю. Леонов

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (НИУ ИТМО), Санкт-Петербург, Россия

Определение скоростей релаксации энергии состояний электронной подсистемы полупроводниковых квантовых точек является важной задачей физики низкоразмерных систем. Эта тема актуальна как с фундаментальной точки зрения, поскольку пространственное ограничение приводит к изменению энергетического спектра квантовой точки, различных взаимодействий ее элементарных возбуждений друг с другом и внешними полями, и следовательно, процессов энергетической и фазовой релаксации [1], так и с прикладной, как известно, релаксационные процессы играют ключевую роль в работе различных электронных и оптоэлектронных устройств на основе квантовых точек. Хотя изучению этой проблемы посвящено большое число работ, имеющиеся в настоящее время данные весьма неоднозначны. Трудности обусловлены отсутствием общепризнанного понимания того, какими доминирующими механизмами определяются релаксационные процессы, протекающие при возбуждении состояний квантовых точек [2]. Кроме того, недостаточно развито адаптированное к квантовым точкам теоретическое описание оптических методов исследования кинетики населенности таких состояний.

Значительный вклад в процессы релаксации в квазиуменьренных полупроводниковых структурах дает электрон-фононное взаимодействие. Оно проявляется в увеличении скорости дефазировки спектроскопических переходов и снижении времени жизни электронных возбуждений. Электрон-фононное взаимодействие, также может вызывать изменение энергетического спектра квантовых точек, особенно в режиме колебательного резонанса [3], который реализуется, когда энергия фонона совпадает с энергетическим зазором между парой состояний электронной подсистемы квантовых точек. Перенормировка энергетического спектра приводит к формированию гибридных (поляроноподобных) состояний.

В настоящей работе развит единый теоретический подход, позволяющий учесть влияние релаксационных процессов на нестационарные оптические отклики от квантовых точек. Разработана физическая модель нестационарного квазиупругого вторичного свечения таких систем в условиях колебательного резонанса при их возбуждении короткими лазерными импульсами.

1. Федоров А.В., Рухленко И.Д., Баранов А.В., Кручинин С.Ю. Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. СПб.: Наука, 2011.
2. Sanguinetti S., Guzzi M., Grilli E. et al. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 085313.
3. А.В. Федоров, А.В. Баранов, А. Itoh, Y. Masumoto // Физика и техника полупроводников, 2001, Т.35, №12, 1452-1459.

Определение формы наночастиц с использованием данных рентгенографических исследований

И.Н. Леонтьев¹, А.Б. Куриганова², Н.В. Смирнова²

¹ Южный Федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

² Южно-Российский государственный технический университет (НПИ), Новочеркасск, Россия

В настоящее время хорошо известно, что каталитическая активность катализаторов на основе Pt помимо состава и размера наночастиц, существенным образом зависит от их формы [1]. Традиционно, для визуализации формы частиц в таких катализаторах служит просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). В действительности в катализаторе присутствуют частицы разных размеров и разной формы и использование методов основанных на анализе диффрактограмм позволяет определять как средний по объему размер частиц (формула Шеррера) так и усредненную по всему объему катализатора форму частицы.

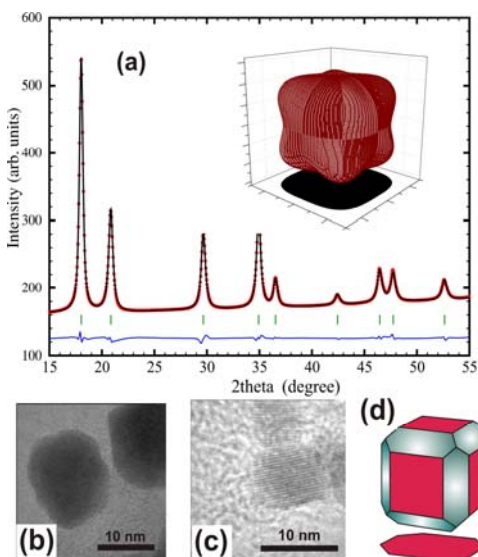


Рис.1

Рентгенографические исследования Pt/C катализатора проводились на Швейцарско-Норвежской линии Европейского центра синхротронного излучения (SNBL ESRF) ($\lambda=0.77$ Å). Детектор излучения - Image Plate Mar-345). Анализ диффрактограммы выявил наличие анизотропного уширения диффракционных максимумов. Причины появления такого уширения подробно обсуждались нами в [2]. Далее нами было произведено уточнение рентгенограммы (Ritveld refinement), используя FullProf software [3], в модели анизотропии размера и микронапряжений, используя метод сферических гармоник для точечной группы $m\bar{3}m$ [4]. Результат уточнения, а именно форма частиц синтезированного катализатора, представлен на рисунке 1a (средний размер наночастиц вдоль направлений (111) и (100) 10.6 и 7.3, соответственно). Форма частиц – усеченный куб, ограниченный плоскостями типа $\{100\}$ и $\{110\}$ (рис. 1d). Такая форма наночастиц полностью подтверждается результатами ПЭМ (рис. 1b,c), а также результатами электрохимических исследований.

Таким образом, представляемый нами метод в дополнение к ПЭМ, безусловно может быть полезен для исследователей, работающих в области синтеза и характеристики наночастиц и нуждается в дальнейшем обсуждении и апробации.

1. Y. Wang, J. Ren, K. Deng, L. Gui, Y. Tang Chem. Mater. **12**, 1622-1627 (2000).
2. I.N. Leontyev, et al. Appl. Catal. A General **357**, 1 (2009).
3. T. Roisnel, J. Rodrigues-Carvajal. Proceedings of the European Powder Diffraction Conference (EPDIC7) 118, 378 (2001)
4. M. Jarvinen Application of Symetrized Harmonics Expansion to Correction of the Preferred Orientation Effect J. Appl. Cryst **26**, 525 (1993).

Фокусировка частиц при каналировании в хиральных УНТ

И. В. Лысова

Чувашский государственный педагогический университет им. И. Я. Яковлева, Чебоксары, Россия

Каналирование в нанотрубках имеет некоторые отличия от каналирования в кристаллах, такие, как более широкие каналы, слабое деканалирование, частицы, попавшие в режим каналирования проходят большие расстояния в канале нанотрубки. Нанотрубки также отличают малые потери энергии на упругое взаимодействие каналирующих частиц при углах, меньших критического [1]. Интересна возможность управления пучками частиц, используя изогнутые нанотрубки. Создание потоков частиц, направляемых нанотрубкой, может найти применение, как способ доставки химических веществ в биологические клеточные структуры, для вывода ускоренных частиц из ускорителя. Кроме того, нанотрубки могут применяться для хранения особо опасных или летучих веществ (например, водорода), лекарственных препаратов и других целей.

В работе классические траектории каналирующих частиц изучаются на основе решения уравнений движения в потенциале, создаваемом всеми атомами стенок нанотрубки.

$$M \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = - \sum_n \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_n)}{\partial r} + \vec{f}(\vec{r}, \vec{v}),$$

где $U(\vec{r})$ - потенциал взаимодействия каналирующей частицы с отдельным атомом стенки УНТ; $\vec{f}(\vec{r}, \vec{v})$ – диссипативная сила, учитывающая торможение частицы за счет потерь на в электронном газе. Потери энергии на электронах рассчитывались в приближении локальной плотности на основе экспериментальных данных для твердого тела [2]. В расчетах в качестве потенциала $U(\vec{r})$ использовалось приближение Дойля-Тернера [3].

Численное моделирование на примере нанотрубок armchair (10,10) и хиральной (11,9) показало, что степень фокусировки зависит не только от поперечного размера, но и от хиральности нанотрубки.

1. Лысова И.В., Сабиров А.С., Степанов А.В. // «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования». – 2010. – №4.
2. Готт Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. – М., Наука, 1978г. – 272 с.
3. Жеваго Н.К., Глебов В.И. // ЖЭТФ. 2000. Т. 118. вып.3(9). С. 579.

Исследование процесса окисления тонких пленок титана

В. А. Матвеев¹, Н. К. Плешанов¹, В. Г. Сыромятников¹, А. П. Булкин¹

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

Исследования с применением пучков поляризованных нейтронов широко используются в современных исследованиях материалов. Благодаря сочетанию наличия у нейтрона магнитного момента и его высокой проникающей способности, такие исследования позволяют исследовать магнитную структуру, как на поверхности, так и внутри объема образца. Увеличение поляризации нейтронов позволит получать более точную и детальную информацию о строении магнитной структуры. Поэтому повышение степени поляризации нейтронных пучков представляет важную задачу нейтронной оптики.

Пучки поляризованных нейтронов обычно получают двумя способами: отражением нейтронного пучка от поляризующих покрытий или пропусканием нейтронов через поляризующие фильтры. Последний способ намного сложнее технически и требует значительных затрат на обслуживание. Отражение пучка от поляризующих покрытий широко используется при создании нейтронно-оптических систем, таких как поляризаторы, анализаторы, поляризующие нейтронотводы и монохроматоры.

Поляризующие покрытия представляют собой многослойные структуры, состоящие из чередующихся магнитных и немагнитных нанослоев. Основными факторами, ухудшающими качество поляризующих суперзеркал CoFeV/TiZr, являются структурные несовершенства, такие как немагнитные области на межслойных границах и оксидный слой на поверхности поляризующего покрытия [1-3].

В дальнейшем, сотрудниками отдела нейтронной оптики ПИЯФ был предложен, теоретически обоснован и экспериментально проверен новый метод улучшения поляризующих нейтронных покрытий [4-6]. Он сводится к использованию слоев определенной толщины с отрицательным потенциалом («антибарьерных» слоев) для подавления отражения нейтронов с нежелательным спином от потенциальных барьеров, образованных структурными несовершенствами, в том числе оксидными пленками на поверхности поляризующих покрытий.

Основным претендентом на роль материала для таких «антибарьерных» слоев является титан, который обладает отрицательным нейтронно-оптическим потенциалом. Таким образом, для совершенствования поляризующих покрытий требуется учет процессов окисления титанового антибарьерного слоя при его контакте с атмосферным воздухом. С этой целью необходимо исследовать кинетику процесса окисления тонких титановых слоев.

В данной работе представляются результаты исследований процесса окисления титановых пленок толщиной от 10 до 40 нм с помощью методов нейтронной рефлектометрии и атомно-силовой микроскопии.

1. S.V. Metelev, N.K. Pleshanov, A. Menelle, V.M. Pusenkov, A.F. Schebetov, Z.N. Soroko, V.A. Ul'yanov, *Physica B* **297**, 123 (2001).
2. V.M. Pusenkov, S.V. Metelev, N.K. Pleshanov, V.G. Syromyatnikov, V.A. Ul'yanov, A.F. Schebetov, *Physica B* **348**, 285 (2004).
3. N.K. Pleshanov, B.G. Peskov, A.F. Schebetov, V.G. Syromyatnikov, B. Chen, C.Q. Huang, X.X. Li, *Physica B* **397**, 62 (2007).
4. N.K. Pleshanov, *Nucl. Instrum. Methods A* **613**, 15 (2010).
5. Н.К. Плешанов, А.П. Булкин, В.Г. Сыромятников, *ФТТ* **52**, вып. 5, 954 (2010).
6. N.K. Pleshanov, A.P. Bulkin, V.G. Syromyatnikov, *Nucl. Instrum. Methods A* **634**, 63 (2011).

Процессы перемагничивания в ферромагнитных инвертированных опалоподобных структурах: исследование методами малоуглового рассеяния нейтронов и СКВИД-магнитометрии

*А.А. Мистонов¹, Н.А. Григорьева¹, А.В. Чумакова², Х. Эккерлебе³, Д. Менцель⁴,
С.В. Григорьев²*

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ Institute of Condensed Matter Physics, Braunschweig, Germany

Методы малоуглового рассеяния нейтронов и СКВИД-магнитометрии были использованы для изучения изменения магнитной структуры геометрически фрустрированных трёхмерных наноматериалов, обладающих инвертированной опалоподобной структурой (ИОПС). Образцы различной толщины были синтезированы методом электрохимического осаждения ферромагнетика в поры искусственно опала, сформированного из полистирольных микросфер, упорядоченных в ГЦК структуру с периодом решетки $a_0 = 720 \pm 20$ нм.

При проведении эксперимента по малоуглому рассеянию нейтронов внешнее магнитное поле \mathbf{H} величиной до 1.2 Тл прикладывалось вдоль кристаллографических осей $[\bar{1}2\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[0\bar{1}0]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$. В работе проанализирован магнитный вклад $I_H(q) \sim |A_m \mathbf{m}_{\perp q} S(q) F(\mathbf{q})|^2$, где $\mathbf{m}_{\perp q} = \mathbf{m} - (\mathbf{q} \times \mathbf{m}) \mathbf{q} / q^2$, \mathbf{m} – единичный вектор намагниченности \mathbf{M} , \mathbf{q} – вектор рассеяния, в интенсивность нейтронного рассеяния в брэгговских рефлексах, соответствующих системе намагниченных кристаллографических плоскостей семейства $\{202\}$. Получены и проанализированы кривые перемагничивания для этих плоскостей. Построена карта распределения намагниченности в инвертированной опалоподобной структуре для различных значений величины магнитного поля. Магнитное поведение объяснено наличием конкурирующего взаимодействия кристаллической анизотропии структуры и магнитного поля.

СКВИД-магнитометрия была проведена для различных углов θ между направлением вектора напряженности магнитного поля \mathbf{H} , величиной до 5 Тл, и нормалью к плоскости образца (от $\theta = 0^\circ$, когда поле перпендикулярно плоскости до $\theta = 90^\circ$, когда поле лежит в плоскости) для образцов различной толщины. Гистерезисные кривые характеризовались значениями коэрцитивной силы, поля насыщения, остаточной намагниченности. Было показано наличие двух механизмов перемагничивания – когерентный поворот магнитных моментов и кёрлинг. Кроме того, обнаружены особенности перемагничивания кобальтовых образцов малой толщины вблизи коэрцитивной силы при значениях θ от 0° до 15° в виде скачков намагниченности. Возможным источником этих скачков является влияние на поведение намагниченности нескольких факторов – анизотропии атомарной структуры кобальта, двумерной плёночной анизотропии, трёхмерной анизотропии ИОПС, направления и величины напряжённости внешнего магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке немецкой службы академических обменов ДААД по программе Михаил Ломоносов II.

Исследование структурных параметров мицелл фоточувствительного поверхностно-активного вещества АЗОТАБ

*Т. Н. Муругова^{1,2}, О. Иваньков^{1,3}, Н. К. Осина², А. Х. Исламов^{1,2}, А. И. Куклин^{1,2},
К. И. Агладзе^{2,4}*

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Бионаноцентр Московского физико-технического института, Долгопрудный, Россия

³ Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

⁴ Университет г. Киото, Киото, Япония

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) получили широкое применение в различных областях науки и технологии, таких как исследование живых систем, нанотехнологии, развитие методов доставки лекарств и генетической информации и даже в понимании происхождения жизни. Доставка генов является нетривиальной задачей, т.к. нуклеиновые кислоты имеют большой размер, несут на себе заряд. Кроме того они нестабильны. Однако, поливалентная природа нуклеиновых кислот позволяет им за счет электростатического взаимодействия формировать пленки и агрегаты с другими объектами. В свете этого формирование комплексов нуклеиновых кислот с фоточувствительными молекулами является новым направлением в развитии доставки ДНК в клетки.

ПАВ склонны к спонтанной самоорганизации: они формируют мицеллы и биконтинуальные фазы. Информация о структуре и поведении таких агрегатов имеет фундаментальное значение для понимания и моделирования взаимодействия ПАВ с другими макромолекулами (например, синтетическими и биологическими полимерами).

Ранее был достигнут значительный результат в использовании света для манипуляции фоточувствительными молекулами [1, 2, 3]. Фоточувствительная молекула АзоТАБ способна обратимо связываться с ДНК. Это в свою очередь позволяет вызывать конформационные изменения в ДНК посредством облучения светом [4, 5, 6]. Подобная фоторегуляция достигается благодаря фотоизомеризации двойной связи в азобензеновом участке молекулы АзоТАБ. Транс- и цис- изомеризация вызывается облучением молекулы видимым (434 нм) и УФ (365 нм) светом соответственно, что имеет перспективу в биотехнологиях. Было показано, что именно одновалентный АзоТАБ с коротким хвостом может обратимо блокировать возбуждения в сердечной ткани [7]. Помимо этого такой тип АзоТАБ является химически стабильным, имеет быстрый изомеризационный отклик и высокую светочувствительность.

С помощью малоуглового рассеяния нейтронов нами были исследованы структурные параметры мицелл АзоТАБ в воде. Исследования проводились при концентрациях выше критической концентрации мицеллообразования (10-35 мМ). Было показано изменение размеров мицелл, их поверхностного заряда и агрегационного числа при изменении температур в интервале 10-35 °С и при облучении видимым и УФ-светом.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Правительства РФ для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных учреждениях высшего профессионального образования (№ 11.G34.31.0015).

1. S Rudiuk et al., *Biomacromolecules*. **12**, 3945 (2011).
2. S. C. Wang, P. Mirarefi, A. Faraone, *Biochemistry* **50**, 8150 (2011).
3. A. Estévez-Torres, *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* **106**, 12219 (2009).
4. A. L Le Ny, C. T. Lee Jr., *Biophys. Chem.* **142**, 76 (2009).
5. Yu. L. Sun et al., *Soft Matter* **7**, 5578 (2011).
6. S. Rudiuk et al., *Soft Matter* **7**, 5854 (2011)
7. N. Magome et al., *Tissue Eng. Part A* **17**, 2703 (2011).

Кинетика и механизм самоорганизации пористой структуры пленок анодного оксида алюминия

*К.С. Напольский¹, И.В. Росляков¹, А.А. Елисейев¹, А.В. Лукашин¹, А.А. Романчук¹,
О.О. Капитанова¹, А.С. Манкевич¹, В.А. Лебедев¹, Д.В. Белов², А.В. Петухов²,
Н.А. Григорьева³, W.G. Voigtman⁴, А.П. Чумаков⁵, С.В. Григорьев⁵*

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

² *Университет г. Утрехт, Утрехт, Нидерланды*

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

³ *Технологический университет г. Дельфт, Дельфт, Нидерланды*

⁴ *ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова», Гатчина, Россия*

Пленки анодного оксида алюминия – это один из ярких примеров самоорганизующихся структур, имеющих важное практическое значение в современной науке и технике. В настоящее время анодный оксид алюминия является основой для создания большого круга наноматериалов и высокотехнологичных устройств. Примером могут служить работы, посвященные синтезу нанонитей и нанотрубок, созданию мембран, катализаторов, сенсоров, излучателей и других устройств на основе пористого Al_2O_3 . Идеальная структура пленок анодного оксида алюминия может быть представлена как система упорядоченных каналов с плотнейшей гексагональной упаковкой, расположенных перпендикулярно подложке. Следует подчеркнуть, что движущая сила и механизм упорядочения пор до сих пор были не ясны, что может быть связано с одновременным влиянием многих факторов на рост оксидной пленки, а также с отсутствием подходящих методов исследования для изучения процесса упорядочения на количественном уровне.

В качестве объектов исследования в работе выступали высокоупорядоченные плёнки пористого Al_2O_3 с периодом структуры 65 и 105 нм, полученные с использованием технологии двухстадийного анодного окисления высокочистого алюминия в растворах серной и щавелевой кислот при постоянном напряжении 25 и 40 В, соответственно.

Для структурной аттестации исследуемых объектов в настоящей работе использовали методы растровой электронной микроскопии, дифракции отраженных электронов и in-situ малоугловой дифракции рентгеновского излучения. Показано, что двухстадийное анодное окисление алюминия приводит к формированию пористой оксидной пленки, состоящей из разориентированных доменов – областей с идеальной гексагональной упаковкой пор – размером около 8 мкм. Впервые установлено, что микроструктура исходной алюминиевой подложки является важным фактором, влияющим на упорядочение пористой структуры. Выделенное направление ориентации системы пор сохраняется в пределах одного зерна металлического алюминия, размер которого может достигать 5 ÷ 10 мм. При переходе к другому зерну металла ориентация системы пор резко изменяется. Показано, что причиной возникновения дальнего порядка в структуре пористых пленок является анизотропия скорости растворения металла на интерфейсе металл/оксид в различных кристаллографических направлениях.

Зависимости положения и ширины дифракционных рефлексов, наблюдаемых в малоугловом пределе, от времени анодирования использованы для изучения кинетики самоупорядочения пористой структуры. Установлено, что на начальных этапах окисления структура оксидной плёнки малоупорядочена и определяется неровностями на поверхности металла, нанесенными в результате предварительной подготовки подложки. При получении толстых пленок (более 20 мкм) все большую роль играет микроструктура металла. Показано, что мозаичность пористой структуры на интерфейсе металл/оксид обратно пропорциональна $t^{0,2}$, где t - продолжительность анодирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки (грант № 16.513.11.3011) и РФФИ (гранты № 09-03-01123, 09-03-12246 и 10-02-00634).

Некоторые оценки в теории спин – волнового затухания в низкоразмерных магнетиках

А.К. Нухов, Г.М. Мусаев, К.К. Казбеков, Фадель Хайдер

Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

В недавней нашей работе [1] было показано, что учет локальной геометрии поверхности в рамках классической теории спиновых волн приводит к затуханию спиновых волн. Здесь мы приведем некоторые оценки, связанные с полученным результатом.

Общее смещение частотного спектра спиновых волн, равное $\Delta\omega(k) = \Delta\omega_R(k) + i \cdot \Delta\Gamma(k)$, отражает только мнимое смещение, так как $\Delta\omega_R(k) = 0$ [1]. Мнимая составляющая $\Delta\Gamma(k)$, позволяет найти выражение для времени поверхностной релаксации τ_s :

$$\tau_s = \frac{1}{B \cdot \lambda_n(k, \bar{\mathbf{r}})}, \quad (1)$$

где $\mathbf{r} = \bar{\mathbf{r}}$ - характеристическая вектор-функция. Переписав второй сомножитель в знаменателе (1) в виде:

$$\lambda_n(k, \bar{\mathbf{r}}) = k^j \cdot L_j(\bar{\mathbf{r}}) = \sum_{m_1, m_2} k^j \cdot (1+m) \cdot (1 + \hat{\pi}(l, j)) \cdot \delta^{ll'} \cdot (\beta_{m_1})_l \cdot (\beta_{m_2})_j \cdot \tilde{F} \left\{ \begin{matrix} m_1, m_2 \\ l, j \end{matrix} \right\}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

обнаружим для времени релаксации следующую оценку (определения написанных функций можно найти в [1]):

$$\tau_s \sim \frac{\hbar}{6\pi A L}, \quad (3)$$

или, в численной форме, с учётом того, что $A \approx k_B \Theta$, $\Theta \sim 10^3$ °K (Θ - температура Кюри ферромагнетика), для обычных ферромагнетиков, имеем:

$$\tau_s \cong 4,04 \cdot 10^{-16} \cdot L^{-1} \text{ сек}. \quad (4)$$

Как непосредственно видно из (4), численное значение времени релаксации параметрически зависит от геометрического фактора L , который, как легко заметить из (2), полностью определяется только локальной поверхностной геометрией через коэффициенты β и функцию $\tilde{F}(\mathbf{r})$. Таким образом, в данной теории фактор L оказывается именно тем параметром, который определяет численное значение рассматриваемых физических величин, устанавливает их зависимость от поверхностной геометрии системы.

Моделирование водородных связей дипептидных нанотрубок

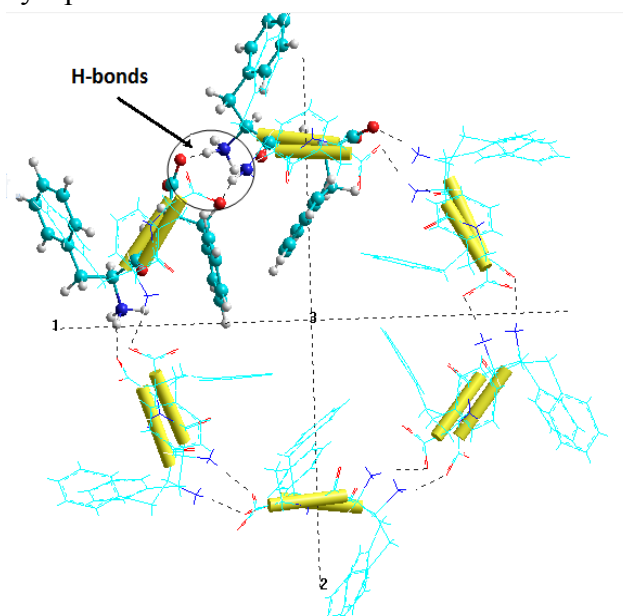
Е.В. Парамонова¹, В.С. Быстров^{1,2}, I. Bdkin², A.L. Kholkin²

¹Институт Математических проблем биологии РАН, Пущино, Россия

²Dept. Ceramics and Glass engineering & CICECO, University of Aveiro Campus Universitário de Santiago, Aveiro, Portugal

Дифенилаланин дипептид является простейшим строительным блоком β -амилоидного белка, связанного со многими заболеваниями, в основном нейродегенеративными (болезни Альцгеймера, Паркинсона). Дифенилаланиновые нанотрубки представляют собой уникальный класс самоорганизующихся функциональных биоматериалов с широким диапазоном интересных в практическом применении химических и механических свойств, также недавно были показаны пьезоэлектрические свойства дипептидных нанотрубок, что открывает возможность их использования в качестве наноразмерных сенсоров и наноэлектронных устройств.

Моделирование молекулярных структур проводилось методами молекулярной механики, полуэмпирическими, *ab initio*, реализованными в программном пакете Hyperchem 7.52 и 8.0, некоторые точные расчёты (энергии при изменении водородной связи) выполнены с помощью Gaussian, (HF/6-31G(d,p)98, B3LYP/6-31G(d,p)). Также рассмотрено влияние водородных связей на стабильность формируемой наноструктуры. Расчёты, проведённые для молекулярных моделей с оптимизацией геометрии и использованием молекулярной динамики методами в приближениях MM, OPLS, BIO CHARMM и PM3, показывают



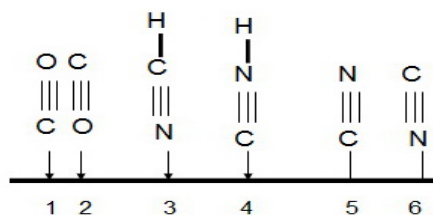
стабильную самоорганизацию 6 молекулярных колец дифенилаланина, влияющую на пространственную ориентацию фенилаланиновых колец в пептидной нанотрубке. Было показано, что 6 фенилаланиновых колец образуют упорядоченные кольца (гексагональная группа симметрии $P6_1$) с внутренним и внешним диаметрами, соответственно ~ 10.5 и 25 \AA , связанными посредством водородных связей N-H...O с расстоянием O-H $\sim 1.65 \text{ \AA}$ и общей длиной N-O около 2.7 \AA , что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Молекулярно-динамическое моделирование при различных температурах также полностью согласуется с экспериментальными данными, т. е. средний дипольный момент последовательно уменьшается как функция температуры.

Применение метода изотопного замещения для установления структуры комплексов, образующихся на поверхности твердого тела при адсорбции

С.Н. Петров, А.А. Цыганенко, А.В. Рудакова

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Положение полос в ИК спектрах адсорбированных молекул не всегда дает прямую информацию о том, какие существуют центры на поверхности твердого тела. Выводы о том, какая полоса соответствует взаимодействию адсорбированной молекулы с тем или иным атомом основывались на температурном поведении полос. Вместе с тем, данный о геометрии поверхностного комплекса можно получить, используя изменение частот при изотопном замещении. Этот метод позволяет нам найти композицию и геометрию поверхностных комплексов адсорбированных молекул СО [1,2] или озона [3]. В этой работе мы использовали метод изотопного замещения для систем с изомерией связывания. Так, для молекулы СО, адсорбированной на цеолитах [4] две полосы валентных колебаний были отнесены к С- и О-связанным формам (структуры 1 и 2 на схеме). Для адсорбированной HCN могут существовать две изомерные формы для координационно связанной молекулы (структуры 3 и 4) и иона CN⁻ (структуры 5 и 6), возникающие как результат диссоциации HCN.



Известно, что цеолиты типа Zn-Y, Cs-X и другие, полученные методом катионного обмена из Na-X обладают набором центров, характеризующими адсорбция на катионах натрия, цинка или цезия. Идентифицировать то, в какой степени произошло замещение и произошло ли оно совсем может рентгеноструктурная дифрактограмма. Но более, точным методом является ИК-спектроскопия. В данной работе были получены цеолиты Zn-Y и Cs-X из порошка Na-X. Определение положения полос, адсорбированной молекулы-зонда СО дало возможность определить какие присутствуют катионы на поверхности и в какой конфигурации с ними находится СО.

1. A. A. Tsyganenko, E. Escalona Platero, C. Otero Arean, E. Garrone and A. Zecchina, *Catalysis Letters*, 61, 187-192 (1999)
2. A. A. Tsyganenko, A. M. Chizhik and A. I. Chizhik, *PCCP* 12, 6387-6395 (2010).
3. J. Sunhee Kim, D. C. Sorescu, and J. T. Yates, Jr., *J. Phys. Chem. C*, 111, 5416-5425 (2007).
4. A. A. Tsyganenko, P. Yu. Storozhev, and C. Otero Arean, *Kinetics and Catalysis*, Vol. 45, No. 4, 530-540 (2004.)

Численный расчет процессов миграции электролитических ионов в каналах пористого проводника-конденсатора

М.Д. Шарков¹, В.В. Руцкая², А.В. Бобыль¹, М.Е. Бойко¹

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

²Санкт-Петербургский Академический университет – НОЦ Нанотехнологий РАН, Санкт-Петербург, Россия

Одним из перспективных направлений современных технологий являются суперконденсаторы, элементы электроники на основе пористых проводников. Для суперконденсаторов в настоящее время востребовано детальное изучение их структуры и механизма работы. В частности, актуален вопрос о миграции ионов электролита в окрестности пористого проводника-электрода и внутри каналов, формируемых порами. Кроме того, важна величина расстояния между характерными положениями ионов и проводящей стенкой канала.

Построена модель миграции ионов электролита в приповерхностной области электропроводящей пористой структуры. Проведен анализ глубины проникновения и адсорбции ионов внутри каналов проводника на основе метода Монте-Карло. Проведена оценка зависимости глубины проникновения и адсорбции ионов от длины их свободного пробега и диаметра канала внутри пористой структуры. Установлено, что при приложении к проводнику напряжения порядка одного вольта глубина проникновения и адсорбции ионов не может существенно превосходить величин диаметра цилиндрического канала и длины свободного пробега ионов. Показано, что основная масса заряда в конденсаторе на основе пористого проводника образуется из вещества электролита в каналах внутренней области пористой структуры.

Рассмотрена квантово-механическая модель поведения ионов вблизи поверхности канала. Получен энергетический спектр состояний ионов, имеющих нулевую скорость вдоль оси канала. Найдены характерные расстояния между положениями ионов и стенкой канала. Установлено, что они зависят от ширины канала слабо.

На основе результатов спектроскопии рентгеновского малоуглового рассеяния получены структурные данные, характеризующие размеры и форму каналов в электродах суперконденсаторов с различными электрохимическими свойствами.

Исследование структурных аспектов кластерообразования в силикатных стеклах при допировании оксидами церия и титана

С.А. Самойленко^{1,2}, С.Е. Кичанов¹, А.В. Белушкин¹, Д.П. Козленко¹, Б.Н.Савенко¹
Л.А. Булавин², В.М. Гарамус³, Г.П. Шевченко⁴, В.С.Гурин⁴

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

³ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁴ Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ, Минск, Беларусь

Одной из актуальных задач современной физики конденсированных сред является поиск новых оптических материалов с возможностями гибкого управления их оптическими характеристиками за счет вариации химического состава. Перспективными материалами являются силикатные стекла, допированные оксидами титана и церия. Они характеризуются высокой температурной стабильностью и устойчивостью к жесткому ультрафиолетовому излучению.

Методом малоуглового рассеяния нейтронов исследованы структурные аспекты формирования Ti-Ce-O кластеров в силикатных стеклах при допировании оксидами TiO₂ и CeO₂. При увеличении концентрации исходных оксидов наблюдается рост среднего размера кластеров от 330 до 370 Å. Обсуждается взаимосвязь между структурными характеристиками кластеров и оптическими свойствами допированных силикатных стекол.

Работа поддержана грантом БРФФИ-ОИЯИ №X10Д-007, госконтрактами №02.740.11.0542 и №16.518.11.7029 и Федеральными целевыми программами «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» и «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

Электрохимическое формирование магнитных металлических инвертированных опалов

*Н.А. Саполетова¹, К.С. Напольский^{1,2}, А.А. Елисеев¹, А.А. Грунин³, А.А. Федянин³,
Ю.Д. Третьяков^{1,2}*

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (факультет наук о материалах), Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (химический факультет), Москва, Россия*

³ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет), Москва, Россия*

В настоящее время магнитные металлические инвертированные опалы привлекают внимание ученых благодаря уникальным магнитооптическим свойствам (эффект Керра). Такие материалы получают путем заполнения пустот коллоидных кристаллов (КК), состоящих из плотноупакованных сферических частиц, требуемым веществом с последующим удалением матрицы. В никелевых инвертированных опалах по сравнению с неструктурированными металлическими пленками происходит возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов, что приводит к усилению эффекта Керра. Следует отметить, что условия возбуждения плазмонов в большой степени определяются морфологией внешней поверхности и толщиной упорядоченной структуры. В связи с чем, важной задачей является прецизионный контроль толщины металлических инвертированных опалов, который достижим при использовании метода потенциостатического электрохимического осаждения.

Целью настоящей работы является оптимизация условий формирования никелевых инвертированных опалов с контролируемой морфологией внешней поверхности и исследование оптических и магнитооптических характеристик синтезированных образцов. Малодефектные коллоидные кристаллы на основе полистирольных микросфер ($D = 530$ нм) на проводящих подложках получали методом, основанным на использовании внешнего электрического поля для упорядочения частиц [1]. Полученные пленки КК были использованы в качестве матриц для синтеза инвертированных структур путем электрокристаллизации никеля в пустотах коллоидных кристаллов с последующим растворением матрицы в толуоле. Прецизионный контроль толщины никелевых инвертированных опалов осуществляли по внешнему виду хроноамперограмм, которые характеризовались осциллирующим поведением с постепенно уменьшающейся амплитудой [2]. Осцилляции связаны с периодической модуляцией площади пор матрицы. Их наблюдение возможно лишь при одновременном выполнении двух условий: (1) высокое качество коллоидного кристалла, (2) планарный фронт роста вдоль всей поверхности образца. По данным магнитооптических измерений наибольшее усиление (в 3 раза) магнитооптического эффекта Керра по сравнению с гладкой металлической пленкой наблюдается для образца никелевого инвертированного опала с толщиной $0,6 D$, где D – диаметр микросфер [3]. Полученные образцы никелевых инвертированных опалов могут найти применение в качестве элементарной базы для высокоскоростных оптических переключателей.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (грант № 14.740.11.0256) и РФФИ (гранты № 10-03-01014-а и № 11-03-12121-офи-м).

1. K. S. Napolskii, N. A. Sapoletova, et al., *Langmuir* **26**, 2346 (2010).
2. N. Sapoletova, T. Makarevich, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 15414 (2010).
3. A. A. Grunin, N. A. Sapoletova, et al., *J. Appl. Phys.*, in print (2012).

Методика оценки толщины наноразмерных плёнок методом ЭОС

Д.А. Подгорный, Т.Н. Сметюхова

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

Использование в технике и электронике тонких и сверхтонких слоёв и плёнок приводит к необходимости контролировать их состав и толщину. Одним из методов, позволяющих решить эти задачи, является метод электронной оже-спектроскопии (ЭОС).

Существует несколько методик определения толщины плёнок с применением ЭОС. Наиболее распространённым является сочетание ЭОС с ионным травлением [1]. Он хорошо применим при исследовании толстых плёнок, но для тонких, меньше 10 нм, возникает ряд сложностей, связанных с особенностями ионного травления. Также существует несколько методик определения толщины слоя методом ЭОС без разрушения материала [1-3]. Но, к сожалению, в большинстве случаев они основаны на физико-математических моделях и стараются учитывать множество факторов, что требует сложный математический аппарат, а также увеличивает погрешность определения. Более простые методики не столь универсальны [3].

По этим причинам была разработана методика определения толщин сверхтонких плёнок методом ЭОС без разрушения исследуемого материала, путём вычисления по простой формуле. Данная формула включает в себя плотности, средние атомные массы и концентрации фаз подложки и плёнки, а также глубину выхода оже-электронов [4].

Для проверки данной методики методом ЭОС исследовались тонкие плёнки оксида кремния, полученные естественным окислением кремневой пластины (100) на воздухе, без ионного травления и с ним, а также образце алюминия, термически окисленного на воздухе.

Толщина оксида кремния в травленном образце составила 0,2 нм, а в нетравленном 0,8 нм, а толщина слоя адсорбированного углерода 0,4 нм. Для алюминиевого образца толщина оксида алюминия составила 0,7 нм, а слой адсорбированного углерода 0,4 нм.

Результаты, полученные с помощью предложенной методики, согласуются с результатами, полученными при использовании ионного травления. Но при этом данная методика проста в воспроизведении, не требует разрушения исследуемого объекта и дополнительных затрат, универсальна для любых типов оже-спектрометров и программ обработки данных, так как основана уже только на полученном соотношении веществ. При этом ошибка определения концентраций элементов для ЭОС не превышает 20%. Преимуществом методики является возможность определения толщин сверхтонких плёнок в монослойных гетероструктурах. Методику можно усовершенствовать путём учёта фактора рассеяния электронов, выходящих с разной глубины и проходящих через неомогенную структуру.

1. Анализ поверхности методами оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии / под редакцией Д. Бриггса, М.П. Сиха.– М.: Мир.– 1987.– 598с.
2. Patent №: US 7.582.868 B2. Date of patent: Sep.1, 2009. Jiang et al.
3. Smith J.F., Southworth H.N. Determination of layer thickness by Auger electron spectroscopy // Surface Science.– 1982.– 122.– P. 619-621.
4. Методы анализа поверхностей / под редакцией А. Зандерна.– М.: Мир, 1979.– 582с.

Флуоресценция цианиновых молекул в ближнем поле серебряных наночастиц

*А. А. Старовойтов, Н. А. Торопов, В. В. Захаров, А. В. Вениаминов, Н. Б. Леонов,
Т. К. Разумова, Т. А. Вартамян*

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (НИУ ИТМО), Санкт-Петербург, Россия

Гибридные наноструктуры на основе органических красителей, находящихся в ближнем поле металлических наночастиц, являются перспективными объектами для создания спазера.

В нашей работе была исследована флуоресценция слоя цианиновых молекул в присутствии наночастиц серебра. Приготовление образца производилось в два этапа, в начале посредством вакуумного напыления была получена наногранулированная пленка серебра на сапфировой подложке, на которую потом высаживался слой молекул из насыщенного раствора цианинового красителя. Полученные гибридные слои были исследованы на спектрофлуориметре RF-5301PC и лазерном сканирующем конфокальном микроскопе LSM 710.

Ранее было установлено [1], что в слоях цианинового красителя на поверхности диэлектрических подложек образуются следующие молекулярные конфигурации: all-trans- и cis-изомеры (А и С), а также коротковолновые димеры (d) и длинноволновые J-агрегаты (J). Спектры поглощения слоя молекул на чистом сапфире и на сапфире с наногранулированной пленкой серебра близки, что говорит о сходном компонентном составе слоев. Изображения гибридного слоя с конфокального микроскопа показало также наличие кристаллических микрочастиц красителя, размером до нескольких десятков микрон, которые образуются при осаждении из концентрированного раствора.

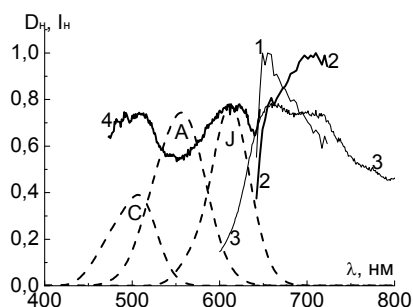


Рис 1. Нормированные спектры поглощения стереоизомеров и J-агрегата (штриховые контура С, А, J) в молекулярном слое, нормированные спектры излучения (1, 2, 3) и возбуждения (4) флуоресценции гибридного слоя.

Исходя из полученных данных, можно предположить, что максимум флуоресценции на 657 нм связан со свечением J-агрегатов. Свечение на 710 нм, очевидно, связано с наличием микрокристаллов красителя. Таким образом, флуоресценция гибридного слоя определяется преимущественно свечением молекул находящихся в агрегированном или кристаллическом состояниях. Отмечен межмолекулярный перенос оптического возбуждения от cis-изомера к J-агрегату и микрокристаллу. Спектры флуоресценции молекулярного слоя на чистом сапфире и на сапфире с наногранулированной пленкой серебра близки, однако, интенсивность свечения цианиновых молекул выше в несколько раз, если они находятся в ближнем поле наночастиц Ag.

1. Калитеевская Е.Н., Крутякова В.П., и др. Оптика и спектроскопия. 110, 398 (2011)

Моделирование транспорта и хранения водорода в углеродной нанотрубке методами молекулярной динамики

А. В. Степанов¹, Г. М. Филиппов^{2, 1}

¹ Чувашский государственный педагогический университет им И.Я Яковлева, Чебоксары, Россия

² Чебоксарский политехнический институт (филиал) Московского государственного открытого университета, Чебоксары, Россия

Исследование каналирования атомных и молекулярных частиц в углеродных нанотрубках является важным приложением к изучению каналирования частиц в кристаллах (см. например [1,2]).

В работе исследуется прохождение водорода через каналы углеродных нанотрубок (УНТ). Получены характеристики транспорта водорода и его влияния на состояние стенок УНТ при различных энергиях потока водорода. Рассмотрены такие параметры как эрозия стенок и образование структурных дефектов в УНТ, в частности, крышки нанотрубки. Получены вероятности адсорбции и образования новых соединений в результате вышеуказанных процессов. Моделирование происходило методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала REBO [3,4].

1. The Effect of Atomic Dynamics on the Energy Loss of Ions Channeled in Carbon Nanotubes. Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques , 2010, Vol. 4, No. 2, pp. 335–337
2. Моделирование каналирования в углеродных нанотрубках . Математика. Компьютер. Образование : тез. докл. Междунар. конф. – Дубна : Изд-во Москва; Ижевск. – 2010. – С. 152
3. A. Ito, and H. Nakamura. MolecularDynamics Simulation of Bombardment of Hydrogen Atoms on Graphite Surface COMMUNICATIONS IN COMPUTATIONAL PHYSICS Vol. 4, No. 3, pp. 592-610
4. DonaldW Brenner et.al A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons J. Phys.: Condens. Matter 14 (2002) 783–802

Динамика конденсации наночастиц углерода при детонации мощных ВВ.

К.А. Тен¹, В.М. Титов¹, Э.Р. Прууэл¹, Л.А. Лукьянчиков¹, Б.П. Толочко², И.Л. Жогин².

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия*

Вопрос о конденсации углерода при детонации взрывчатых веществ (ВВ) с отрицательным кислородным балансом остаётся дискуссионным до настоящего времени. Ответ на него важен как для понимания физики явления, так и для оценки количества энергии, которая выделяется при экзотермической коагуляции углеродных кластеров. Результаты сравнения расчётных и экспериментальных данных по ускорению тонких металлических пластин продуктами детонации ВВ с отрицательным кислородным балансом показали, что этот процесс точнее описывается в предположении о наличии конденсации углерода за зоной химической реакции.

Экспериментально зарегистрировать размеры наночастиц конденсированного углерода при детонации ВВ в настоящее время можно лишь с помощью дифракционных методик с использованием синхротронного излучения (СИ). Большая интенсивность СИ, малая длительность вспышки (~ 1 нс) и высокая периодичность (~ 250 нс) позволяют исследовать детонационные процессы в мощных ВВ. В методике малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) регистрируется дифракционный сигнал от образца в области малых углов. Метод широко применяется при статическом анализе структуры дисперсных наносистем.

Эксперименты проводились на ускорительном комплексе ВЭПП-3 (энергия 2 ГэВ, ИЯФ СО РАН, г. Новосибирск). Для регистрации угловых распределений МУРР использовался детектор DIMEX, позволяющий записывать кино из 32 кадров через 250 нс. Такая быстрая система регистрации МУРР позволяет исследовать взрывные процессы. Параметры пучка СИ, а также схема измерения МУРР позволяют регистрировать изменение размеров наночастиц от 2 нм до 100 нм.

Были проведены исследования смесей тротил/гексоген (используемых для получения ультрадисперсных взрывных наноалмазов), бензотрифуроксана (БТФ), а также новых, перспективных для промышленности ВВ, изготовленных на основе 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола (ТАТБ). Впервые в мире получена динамика размеров наночастиц конденсированного углерода (в том числе и наноалмазов) в течение первых микросекунд после взрыва [1].

Полученные данные используются для уточнения известных и построения новых уравнений состояния современных взрывчатых веществ .

1. В. М. Титов, Э.Р. Прууэл, К.А. Тен и др. ФГВ, **47**, 6 (2011).

Малоугловое рассеяние на системах наночастиц с диффузной поверхностью

А. В. Томчук^{1,2}, М. В. Авдеев¹, В. Л. Аксенов^{3,1}, Л. А. Булавин²

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Киевский национальный университет им.Т.Шевченко, Киев, Украина

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Рассмотрены особенности малоуглового рассеяния на полидисперсных частицах с диффузной поверхностью [1]. Выделен случай малого показателя диффузности.

Получены зависимости инвариантов кривых рассеяния в зависимости от контраста. Показано, что остаточного рассеяния в эффективной точке компенсации для систем с малым показателем диффузной поверхности, свойственного полидисперсным неоднородным частицам, не наблюдается. Информация о полидисперсности и внутренней структуре частиц анализируется на примере логнормального вида распределения по размерам.

Развитый подход использован для описания полученных ранее данных малоуглового рассеяния нейтронов для сухих [2] и жидких [3] дисперсий детонационных наноалмазов. Соответствующий анализ кривых рассеяния, включая вариацию контраста, доказывает, что ядро основных структурных единиц состоит из кристаллического алмаза, тогда как диффузный характер границы раздела определяется переходным слоем к графеновому состоянию углерода на поверхности частиц. Проведена оценка полидисперсности кристаллитов.

1. P.W. Schmidt, D. Avnir, et al., J. Chem. Phys. **1474**, 94 (1991).
2. M. V. Avdeev, V. L. Aksenov, L. Rosta, Diamond and Related Mater. **2050**, 16 (2007).
3. M. V. Avdeev, N.N. Rozhkova, et al., J. Phys. Chem. C. **9473**, 133 (2009).

Модификация абсорбционных свойств молекулярных слоев симметричных цианиновых красителей в ближнем поле серебряных наночастиц

Н.А. Торопов, Е.Н. Калитеевская, В.П. Крутякова, Н.Б. Леонов, Т.А. Вартамян

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики (НИУ ИТМО), Санкт-Петербург, Россия

Проблему создания когерентного излучателя с размерами меньшими длины волны можно решить, используя свойства поверхностных плазмонов. В плазмонных наноструктурах, создаваемых на основе благородных металлов, локализация света превосходит дифракционный предел. Однако при разработке ультракомпактных лазеров на поверхностных плазмонах – спазеров – возникает проблема, связанная с сильным затуханием оптических мод в наноструктурах. Эта диссипация энергии происходит за счет омических потерь в металлах на оптических частотах [1]. Вариантом уменьшения потерь является использование усиливающей среды, в качестве которой подходят органические красители, зарекомендовавшие себя в лазерной технике.

Данная работа направлена на выявление фундаментальных закономерностей абсорбционных свойств композиции из серебряных наночастиц, покрытых слоями цианиновых красителей. Данные органические соединения представляют собой цепь метиновых групп, соединяющую гетероциклические концевые группы.

Ансамбли металлических частиц были приготовлены распылением материала в сверхвысоком вакууме на подложку из сапфира. Поскольку зарождение островков носит случайный характер, спектры экстинкции гранулированной пленки уширены за счет островков различных форм и размеров. Неоднородное уширение плазмонной полосы позволяет исследовать резонансное взаимодействие плазмонов с различными красителями. Гибриды получали нанесением растворов цианиновых красителей разной длиной полиметиновой цепи и разными концевыми группами на подготовленные образцы островковых пленок, вращающиеся со скоростью 4000 об./мин.

Установлено, что при нанесении слоев красителей на поверхность сапфира с осажденной на ней островковой серебряной пленкой максимум поглощения молекулярных слоев увеличивается в 3–5 раз. При этом плазмонные полосы поглощения островковых пленок также претерпевают изменения вследствие аномальной дисперсии диэлектрических проницаемостей красителей.

Обнаруженные изменения абсорбционных свойств красителей связываются нами с локальными полями вблизи наночастиц серебра. Эти поля усилены в сотни раз по сравнению с падающим полем, а также имеют очень высокий пространственный градиент, определяемый размером частиц. Таким образом, в ближних полях наноструктур выравниваются вероятности дипольных и мультипольных переходов в молекулах красителей, а суммарное поглощение возрастает.

Помимо увеличения оптического поглощения спектры молекулярных слоев цианиновых красителей адсорбированных на наночастицах серебра демонстрируют значительное уширение по сравнению со спектрами растворов, обусловленное наличием в слое различных изомеров и агрегированных форм. Сложный компонентный состав слоя при высаживании является неравновесным и при нагревании или облучении импульсами рубинового лазера наблюдаются изменения спектров поглощения, связанные с изменением компонентного состава. Обнаружено влияние ближних полей серебряных наноструктур на процессы фотоиндуцированных изменений компонентного состава.

1. R.F. Oulton, V.J. Sorger, T. Zentgraf, et al. Nature. 461 (2009). P. 629–632.

Структура и магнитные свойства многослойных систем [(Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)_x(Al₂O₃)_(1-x)/a-Si:H]_m

*В. А. Уклеев^{1,2}, Е. А. Дядькина², А. А. Воробьёв^{1,3}, D. Lott⁴, А. В. Ситников⁵, Ю. Е. Калинин⁵,
О.В. Геращенко², С. В. Григорьев²*

¹ Санкт-Петербургский Академический университет – НОЦ Нанотехнологий РАН, Санкт-Петербург, Россия

² ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова», Гатчина, Россия

³ Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

⁴ Helmholtz Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

⁵ Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Исследовались многослойные наноструктуры, изготовленные методом ионно-лучевого напыления в Воронежском государственном техническом университете. Структура состоит из периодически повторяющихся бислоёв металл-диэлектрик (МД) (Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)_x(Al₂O₃)_(1-x) / полупроводник (ПП) a-Si:H. МД слой представляет собой аморфную матрицу Al₂O₃ с инкапсулированными наночастицами ферромагнитного сплава Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀, порог перколяции такой системы составляет $x = 46$ ат. % [1]. Полупроводниковый слой состоит из аморфного гидрогенизированного кремния a-Si:H. Такая структура проявляет необычные проводящие и магнитные свойства, такие как образование магнитно-мёртвых слоёв на интерфейсе МД/ПП. Кроме того, в зависимости от толщины ПП слоя происходит изменение электропроводящих (аномальное поведение удельного сопротивления) и интегральных магнитных свойств (аномальное поведение намагничённости) образцов при прочих равных параметрах. Для исследования были выбраны образцы с концентрацией ферромагнетика $x = 35$ ат. % с различными толщинами ПП прослоек $d_{Si} = 0.7$ нм, 1.5 нм и 2.3 нм, причём образец с промежуточным значением d_{Si} обладает минимальным удельным сопротивлением.

Рассеяние синхротронного излучения в скользящей геометрии (GISAXS) позволяет определять латеральное распределение наночастиц в матрице, а зеркальная рефлектометрия – толщины МД и ПП слоёв. Согласно данным GISAXS, образец с номинальной толщиной полупроводниковой прослойки $d_{Si} = 0.7$ нм представляет собой трёхмерную структуру со слабо упорядоченным распределением наночастиц со средним межчастичным расстоянием $l = 3.0$ нм. В образцах с прослойкой в $d_{Si} = 1.5$ нм и $d_{Si} = 2.3$ нм наночастицы упакованы в чередующиеся в вертикальном направлении слои со средним межчастичным расстоянием $l = 5.7$ нм и $l = 4.7$ нм, соответственно. По картам рассеяния синхротронного излучения было определено, что в латеральном направлении МД слои сдвинуты друг относительно друга на расстояние порядка размера одной наночастицы. Это предположение подтверждается данными рефлектометрии.

Интегральные магнитные свойства исследовались методом магнито-оптического эффекта Керра. Структуры обладают меньшей магнитной восприимчивостью в поперечном сечении, чем в продольном, что является типичным поведением для тонких плёнок. Интегральная намагничённость зависит от толщины прослойки и минимальна для образца с $d_{Si} = 1.5$ нм.

Таким образом, в работе рассмотрены корреляции между проводящими, структурными и магнитными свойствами многослойных структур МД/ПП, установлена их зависимость от толщины полупроводниковых слоёв.

1. А. В. Иванов, Ю. Е. Калинин, В. Н. Нечаев и др., ФТТ 51, 2331 (2009).

Исследование сложных оксидов $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2 - \text{SiO}_2$, полученных золь-гель методом

Л.Г. Лебедев¹, А.А. Фёдорова¹, Г.П. Копица², Е.В. Яковенко³,
L. Almasy⁴, Д.Д. Фролов¹, И.В. Морозов¹

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (химический факультет), Москва, Россия

² ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁴ Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary

Интерес к оксидной системе сложного состава $\text{Ce}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2\text{-SiO}_2$ вызван тем, что она может сочетать в себе достоинства обоих входящих в нее оксидов. Так, наличие оксида кремния обуславливает высокую удельную поверхность получаемого сложного оксида, а $\text{Ce}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$ – его относительную химическую инертность (отсутствие образования соединений с активной фазой катализаторов при его использовании как носителя). Таким образом, данная система может являться эффективным носителем для катализаторов. Кроме того, твердый раствор диоксидов церия и циркония обладает высокой кислородной емкостью и кислородной проводимостью, благодаря чему он может проявлять высокую активность в окислительно-восстановительном катализе.

В данной работе для синтеза образцов системы $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2 - \text{SiO}_2$ был впервые применен золь-гель метод с использованием циклодекстринов (циклических олигосахаридов) в качестве структурообразующих агентов. Введение исходных веществ для оксидов церия и циркония (хлорида цирконила и нитрата церия) осуществлялось на стадии гелеобразования; в качестве источника кремния использовался тетраэтоксисилан. В работе изучено влияние содержания $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ (0, 10, 30 масс.%), а также типа и количества вводимого циклодекстрина (синтез проведен с использованием альфа-, бета-, а также модифицированного бета-циклодекстрина) на свойства получаемых образцов. Полученные образцы исследованы методами рентгенофазового анализа, рентгеноспектрального микроанализа, а также определены величины их удельной поверхности. Исследование изотопного обмена кислорода с использованием изотопа ^{17}O на примере двух образцов $\text{Ce}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2\text{-SiO}_2$ с разным содержанием $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ (10 и 30 масс.%) показало, что количество обменоспособного кислорода составляет практически 100 % от его содержания в образцах. Подвижность кислорода в изучаемых образцах охарактеризована путем измерения скоростей обмена и диффузии кислорода, а также определением энергий активации этих процессов. Показано, что увеличение содержания $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ приводит к увеличению подвижности кислорода как на поверхности, так и в объеме образца, что можно объяснить увеличением концентрации кислородных вакансий и уменьшением эффективной энергии связи кислорода. Таким образом, данные образцы содержат легкоподвижный кислород, что позволяет предположить, что они будут проявлять высокую каталитическую активность в реакциях окисления.

Мезоструктуру синтезированных сложных оксидов изучали методами малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР) и нейтронов (МУРН). Измерения МУРР были выполнены на станции скоростной малоугловой дифрактометрии ДИКСИ (Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий, Москва, Россия) в диапазоне переданных импульсов $8 \cdot 10^{-2} < q < 1.14 \text{ нм}^{-1}$. Измерения МУРН были проведены на установке малоуглового рассеяния нейтронов «Yellow submarine» (реактор ВНС, Будапешт, Венгрия) в диапазоне переданных импульсов $6 \cdot 10^{-2} < q < 3.7 \text{ нм}^{-1}$. Из экспериментальных сечений рассеяния получен вид коррелятора ядерной плотности амплитуды рассеяния и определены характерные радиусы наночастиц в зависимости от содержания $\text{Ce}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ (0, 10, 30 масс.%), а также типа и количества вводимого циклодекстрина.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-03-00584-а).

Исследование мезоструктуры биоактивных нанокomпозиционных покрытий для защиты памятников культурного наследия

*Т.В.Хамова¹, О.А.Шилова¹, Г.П.Копица², С.В.Григорьев²,
В.К. Иванов³, L. Almasy⁴, Е.В. Яковенко⁵*

¹ *Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия*

² *ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики», Гатчина, Россия*

³ *Институт общей и неорганической химии РАН, Москва, Россия*

⁴ *Research Institute for Solid State Physics and Optics, Budapest, Hungary*

⁵ *НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

В последнее время процессы биодеструкции памятников, исторических зданий и конструкций в городской среде заметно ускорились и приняли новые формы. Поиск эффективного противодействия разрушению каменных памятников микробными семействами (грибы, лишайники, морские водоросли и бактерии) – одна из важных научных и практических задач в современном мире.

Настоящая работа посвящена исследованию мезоструктуры биоактивных нанокomпозиционных покрытий, формируемых на основе эпоксидно-силоксановых зольей, модифицированных наноалмазами детонационного синтеза (ДНА). Исследования морфологии поверхности покрытий проводили с привлечением методов атомной силовой микроскопии и сканирующей электронной микроскопии. Внутреннюю структуру покрытий на мезоскопическом масштабе анализировали методом малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), а также методами малоуглового (МУРР) и ультра малоуглового (УМУРР) рассеяния рентгеновских лучей на образцах ксерогелей, синтезированных на основе описанных зольей.

Измерения МУРР и УМУРР были проведены на станциях скоростной малоугловой дифрактометрии ДИКСИ (Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий, Москва, Россия) и ультра малоуглового рассеяния ID2 (ESRF, Гренобль, Франция), соответственно. Совместное использование методик МУРР и УМУРР позволяло измерять интенсивность рассеяния $I(q)$ в диапазоне $1.3 \cdot 10^{-2} < q < 1.14 \text{ нм}^{-1}$. Измерения МУРН были выполнены на установке малоуглового рассеяния нейтронов «Yellow submarine» (реактор ВНС, Будапешт, Венгрия) в диапазоне переданных импульсов $6 \cdot 10^{-2} < q < 3.7 \text{ нм}^{-1}$.

Из комплексного анализа экспериментальных данных установлено, что для полученных эпоксидно-силоксановых покрытий характерно незначительное фазовое расслоение и, по-видимому, формирование структуры взаимопроникающих сеток. Процессы агрегации в кремнезолях в присутствии эпоксидной составляющей происходят с образованием двухуровневой фрактальной структуры с последовательностью уровней: массовый фрактал (1-й структурный уровень) – поверхностный фрактал (2-й структурный уровень). Установлено, что как размерность D_m , так верхняя граница самоподобия ξ массового фрактала возрастают с ростом концентрации эпоксидной составляющей. Обнаружено, что введение в эпоксидно-силоксановые покрытия незначительных добавок ДНА (не более 0.2%) влияет как на размерности массового D_m и поверхностного D_s фракталов, так и на границы их самоподобия.

Работа выполнена при поддержке программы "СТАРТ-11" (проект 11-2-Н5.1-0177) и гранта РФФИ (проект 11-08-00287-а).

Исследования мезоструктуры монодисперсных порошков гидроксокарбоната иттрия методом МУРН

*И.Г. Чувашова¹, А.С. Ванецев^{1,2}, Г.П. Копица³, М.Н. Соколов¹, О.М. Гайтко^{1,2},
В.М. Гарамус⁴*

¹ Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

³ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

⁴ Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Монодисперсные коллоидные частицы контролируемой формы и размера находят широкое применение при создании оптических и магнитных материалов. В последнее время стабильные суспензии монодисперсных частиц используются в таких областях, как адресная доставка лекарств и нанесение биологических меток [1].

Для синтеза морфологически однородных высокодисперсных порошков люминесцентных оксидов, в частности оксида иттрия, допированного ионами РЗЭ, используются такие подходы как золь-гель синтез, термическое разложение аэрозолей, СВС, синтез в солевых матрицах, синтез в микроэмульсиях и т.д. Все перечисленные методы включают использование дорогостоящих реагентов и оборудования, что препятствует их практическому применению.

Для получения подобных порошков особенно перспективными являются подходы «мягкой химии», позволяющие значительно сократить временные и энергетические затраты при синтезе дисперсных материалов. В частности, для синтеза порошков оксидов РЗЭ хорошо зарекомендовал себя метод медленного высокотемпературного гидролиза солей в водных растворах в присутствии мочевины. Ранее нами [2] была разработана модификация данного метода, заключающаяся в использовании микроволнового воздействия для нагрева образцов. Это позволило существенно повысить выход конечного продукта реакции, что имеет исключительную важность для данного процесса, поскольку при использовании обычного нагревания выход реакции в подобных процессах очень низок (10-20 %).

Основной целью настоящей работы являлось исследование влияния параметров синтеза на микро- и мезоструктуру монодисперсных порошков гидроксокарбонатов РЗЭ, характеризующиеся частицами сферической формы и получаемых в ходе медленного гидролиза соответствующих нитратов в присутствии мочевины при микроволновом воздействии. Объектом исследования в работе были монодисперсные порошки $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$.

В ходе настоящей работы было проведено детальное исследование влияния мольного избытка мочевины и концентрации ионов Y^{3+} в исходном растворе на микроморфологию и мезоструктуру монодисперсных порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$, синтезируемых высокотемпературным микроволновым гидролизом водных растворов нитрата иттрия в присутствии мочевины. Изучено влияние изменения рН реакционного раствора как на процессы формирования и роста первичных зародышей, так и их агрегации с помощью метода МУРН. Показана возможность направленного формирования микроморфологии синтезируемых порошков $Y(OH)CO_3 \cdot xH_2O$ с частицами заданного размера в диапазоне 50-500 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (№12-03-01055-а и 11-02-91152-ГФЕН_а), Программы поддержки фундаментальных исследований Президиума РАН, а также гранта Президента Российской Федерации для поддержки российских молодых ученых (МК-2607.2011.3).

1. J.-G. Li, X. Li, X. Sun et al. // Chem. Mater. 2008. V. 20. No. 6. P.2274–2281.

2. А.С. Ванецев, Е.П. Буткина, А.Е. Баранчиков и др. // Доклады АН. 2009. Т. 424. №5. С. 627-630.

Исследование методом малоугловой дифракции массивов взаимодействующих ферромагнитных нанонитей

*А.П. Чумаков¹, С.В. Григорьев¹, Н.А. Григорьева², К.С. Напольский³,
А.А. Елисейев³, И.В. Росляков³, Х. Эккерлебе⁴, А.В. Сыромятников^{1,2}*

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴ Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Geesthacht, Germany

Исследование магнитных свойств массивов ферромагнитных нанонитей, поперечные размеры которых много меньше их длины, представляет несомненный интерес в связи с концепцией миниатюризации элементной базы электроники. Обычно индивидуальная нанонить рассматривается как единичный рабочий элемент, на который влияние остальных элементов массива считается пренебрежимо малым. Это пренебрежение взаимодействием вполне оправданно в том случае, когда плотность нанонитей в образце (отношение объема всех нанонитей к общему объему образца) не велика, однако, согласно данным, представленным в этой работе, при более плотной упаковке взаимодействием нанонитей пренебрегать нельзя, поскольку оно сильно изменит магнитные свойства всего массива в целом.

В качестве объекта исследования использовались порошковый образец из частиц мезопористого диоксида кремния с внедренными в поры нанонитями железа (длина нитевидных частиц составляла 1-2 мкм, диаметр ~ 2 нм) и квазимонокристалл - массив гексагонально упорядоченных никелевых нанонитей длиной 20 мкм и диаметром 40 нм, сформированных на основе пленок пористого оксида алюминия.

Массивы магнитных нанонитей исследовались методом малоугловой дифракции поляризованных нейтронов. Был изучен процесс перемагничивания массива нанонитей в поле, приложенном перпендикулярно оси нанонити. На картах интенсивности нейтронного рассеяния

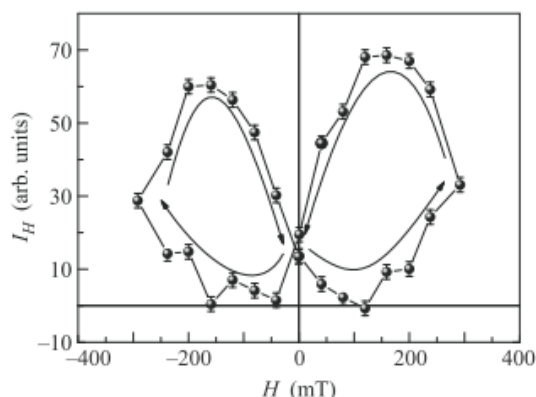


Рис. 1 – Зависимость магнитной части интенсивности I_H брегговского рефлекса при $Q=1.65$ нм⁻¹ для образца Fe/SiO₂ от магнитного поля.

наблюдали несколько дифракционных максимумов или колец, соответствующих рассеянию на высокоупорядоченной структуре пор/нанонитей с гексагональной упаковкой.

Были проанализированы интерференционный (ядерно-магнитный) и чистый магнитный вклады в рассеяние. Средняя намагниченность и пропорциональный ей интерференционный вклад растут с ростом поля и насыщаются при $H = H_S$. Процесс перемагничивания при этом проходит практически без гистерезиса. Интенсивность магнитного вклада имеет гистерезисное поведение в процессе перемагничивания как для положительных, так и для отрицательных полей, образуя зависимость интенсивности от поля в форме «крыльев бабочки», рис. 1. Показано, что такой вид зависимости обусловлен магнитостатическим взаимодействием между нитями в диапазоне полей $H \leq H_S$. Разработана теория, которая на качественном уровне хорошо описывает наблюдаемые эффекты в массивах взаимодействующих ферромагнитных нанонитей при перемагничивании [1].

1. С.В. Григорьев, Н.А. Григорьева и др. Письма в ЖЭТФ, том 94, вып. 8, (2011) с. 678-684

Образование искусственных опалов наблюдаемое *in-situ* с помощью рентгеновской дифракции в режиме скользящей геометрии

*А.В. Чумакова*¹, *А.А. Мистонов*², *А.А. Воробьев*^{1,3}, *Н.А. Григорьева*², *Н. В. Саполетова*⁴, *К.С. Напольский*⁴, *А. А. Елисеев*⁴, *С.В. Григорьев*¹

¹ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова», Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, С.-Петербург, Россия

³ Европейский центр синхротронного излучения (ESRF), Гренобль, Франция

⁴ Московский государственный университет, Москва, Россия

Искусственные опалоподобные структуры (ИОПС) являются хорошей основой для создания трёхмерных фотонных кристаллов. Монодисперсные сферические частицы формируют структуры, которые могут быть описаны в терминах плотнейшей шаровой упаковки. Цель настоящей работы – выявление особенностей процессов роста плёнки ИОПС в области динамического мениска и установление области формирования кристаллической структуры на подложке.

Методом рентгеновской дифракции в режиме скользящей геометрии *in-situ* был исследован процесс образования коллоидной пленки. Подложка из монокристаллического кремния была помещена в ячейку, заполненную водным раствором монодисперсных сферических полиметил-метакрилатных частиц. Во время эксперимента мениск двигался вниз, вследствие испарения растворителя. Сканирование поверхности формируемого образца проводилось в области под мениском, на границе раздела трех фаз (верхняя линия мениска) и выше мениска.

Было установлено, что частицы концентрируются под мениском и наиболее вероятной областью кристаллизации является тройная граница раздела - «воздух–жидкость–твердое тело». Полученные дифракционные картины представляли собой суперпозицию функции рассеяния от сформированной кристаллической структуры и функции рассеяния на сферической частице, находящейся в растворе. Анализ наблюдаемых брегговских рефлексов и форм-фактора частиц, показал что, сформированная пленка искусственного опала состоит из сфер диаметром 200 ± 10 нм. Сферы образуют плотноупакованные гексагональные слои, расположенные параллельно подложке. Характерный размер кристаллитов ИОПС, вычисленный из ширины брегговских рефлексов, составляет 550 ± 100 нм.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-02-00634, № 10-03-01014 и № 11-03-12121).

Свойства многослойных магнитоэлектрических структур сегнетоэлектрик / ферромагнетик на основе керамики PZT с плоскопараллельными интерфейсами наноразмерной гладкости

*С.А. Шарко¹, Н.Н. Новицкий¹, Н.Н. Поддубная¹, А.В. Беспалов², О.Л. Голикова²,
А.И. Стогний¹*

¹ ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Республика Беларусь

² «Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики» (МГТУ МИРЭА), Москва, Россия

Слоистые гетероструктуры ферромагнетик/сегнетоэлектрик с термостабильным интерфейсом, обладающие ферроэлектрическим эффектом при комнатных температурах, являются основой производства магнитоэлектрических электронных устройств. Однако получение термостабильного интерфейса ферромагнетик /сегнетоэлектрик представляет собой технологическую проблему. Как правило, слоистые композитные структуры получают непосредственным соединением магнитной и электрической компонент [1], например, при помощи клеев на основе эпоксидных смол. Это приводит к заметному снижению термической стабильности интерфейса и, как следствие, к старению магнитоэлектрических свойств. Особенно это проявляется при эксплуатации в интервале температур выше комнатной и во влажной атмосфере.

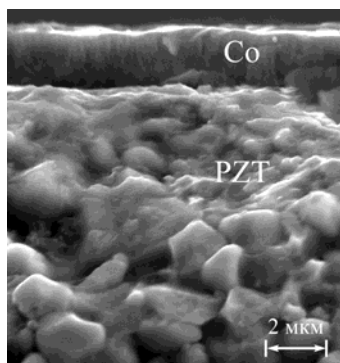


Рис. Поперечное сечение области интерфейса Co /PZT

В настоящем докладе рассмотрены гетероструктуры (Co/ЦТС/Co)₃, полученные методом ионно-лучевого напыления пленки кобальта на предварительно планаризованную поверхность сегнетоэлектрической керамики цирконата-титаната свинца (ЦТС) состава $\text{PbZr}_{0,2}\text{Ti}_{0,8}\text{O}_3$. Плоскопараллельность интерфейсов (рис.) была достигнута применением метода многократного ионно-лучевого напыления-распыления планаризирующего слоя из мишени сродного с керамикой материала. При этом исходную шероховатость субмикронного уровня порядка 0,1 мкм, удалось снизить до наноразмерного уровня.

Толщина пленки кобальта в гетероструктурах указанной топологии составляла 2-3 мкм, а пластин сегнетоэлектрика - 20 мкм для средней и 80 мкм для крайних.

Структуры характеризовались магнитоэлектрическим эффектом в 250 мВ/(см·Э) в магнитных полях до 0,25 Тл на частоте 100 Гц и комнатной температуре [2]. Метод ионно-лучевого напыления позволил исключить наличие органики в области интерфейсов и получить термостабильные структуры без отслоений на интерфейсах ферромагнетик/сегнетоэлектрик.

1. C.-W. Nan, M.I. Bichurin, S. Dong, D. Viehland, G. Srinivasan, Multiferroic magnetoelectric composites: Historical perspective, status, and future directions, *J. Appl. Phys.*, **103** (2008) 031101.
2. Stognij A.I., Novitskii N.N., Poddubnaya N.N., Sharco S.A., Szymczak H., and D'yakonov V.P. Magneto-electric effect and minimal layer thickness in PZT ($h > 20 \mu\text{m}$)/Co ($d < 6 \mu\text{m}$) multilayered heterostructures // *Moscow International Symposium on Magnetism, Proceedings of the MISM-2011, Moscow, Russia, 21-25 August 2011.*

Рентгеновские исследования материалов полупроводниковой и фотоэлектронной техники, углеродосодержащих и биологических соединений методами WAXS, SAXS и EXAFS

*М.Д. Шарков¹, А.В. Бобьль¹, М.Е. Бойко¹, Я.В. Зубавичус², С.Н. Ивашевская³,
С.Г. Конников¹*

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

² НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³ Институт геологии Карельского НЦ РАН, Петрозаводск, Россия

Неразрушающие методы анализа структуры вещества, основанные на применении рентгеновского излучения, позволяют исследовать материал образца в различных пространственных масштабах. Если спектроскопия EXAFS (дальней тонкой структуры рентгеновского поглощения) дает сведения об атомной структуре изучаемого образца в области межатомных расстояний (порядка 0.1 нм), то методика SAXS (малоуглового рассеяния рентгеновских лучей) позволяет анализировать размеры кластеров, пор, зерен, сверхрешеток в веществе (по порядку величин от 1 до 1000 нм). В свою очередь, метод WAXS (широкоуглового рассеяния рентгеновских лучей) дает кристаллографическое описание вещества образца.

В рамках экспериментов, проведенных в ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ООО «Буревестник», на источнике синхротронного излучения НИЦ «Курчатовский институт», а также в компании Samsung Inc. (Республика Корея) получены SAXS-, WAXS- и EXAFS-спектры различных материалов: полупроводников GaAs и SiC; ультрадисперсного алмаза (УДА); солей лития LiFePO₄ и Li₄Ti₅O₁₂, входящих в число основных материалов для литиевых аккумуляторов; белка церулоплазмينا Homo Sapiens, играющего важную роль в иммунной системе человеческого организма.

Анализ спектров EXAFS и SAXS проводится вновь усовершенствованными методиками, дополненными новыми деталями. В состав ранее разработанной процедуры анализа EXAFS [1] включен метод автоматического определения нижней и верхней границ окна Фурье-преобразования осцилляций спектра. Стандартная методика обработки данных SAXS [2] дополнена процедурой Фурье-фильтрации малоугловых брэгговских пиков, позволяющей выделять из сигнала SAXS компоненты, отвечающие отдельным сверхструктурным межплоскостным расстояниям в образце.

Анализ полученных WAXS-, SAXS- и EXAFS-спектров приводит к следующим результатам. Установлено, что в SiC при отжиге происходит разрежение сверхрешетки, разрушение малых и укрупнение больших зерен и пор. Показано, что легирование GaAs десятью процентами атомов Sb приводит к разрежению сверхструктуры в арсениде галлия. Определено присутствие в образцах УДА структурных компонент с фрактальной размерностью от 1 до 2, что согласуется с гипотезой о покрытии зерен УДА оболочкой наподобие луковой шелухи. Установлено, что образец LiFePO₄ может содержать до 10% примесей FePO₄ и маггемита. Показано, что образец Li₄Ti₅O₁₂ может содержать объемную долю до 40% TiO₂ в фазе анатаза. Сформулировано предположение, что атомы Си в матрице человеческого белка церулоплазмينا окружены анионами с заполненными внешними оболочками (O²⁻, N³⁻ и т.п.).

1. М.Д. Шарков, К.Ю. Погребницкий, М.Е. Бойко, ЖТФ **81**, №9, 134 (2011).

2. Т.Н. Василевская, Р.И. Захарченя, ФТТ **38**, №10, 3129 (1996).

Влияние отжига на структурные свойства многослойных систем на основе MgO

Е.М. Якунина, Л.И. Наумова, В.В. Пролядо, Е.А. Кравцов

Институт Физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Сверхрешётки Fe/MgO являются основой для создания нового поколения устройств микроэлектроники, использующих эффект гигантского туннельного магнитосопротивления. Этот эффект обусловлен туннелированием электронов между слоями Fe через диэлектрическую прослойку MgO. Величина туннельного магнитосопротивления в решающей степени определяется структурными свойствами сверхрешёток, в особенности степенью структурного совершенства слоя MgO. Целью работы было исследовать влияние отжига на структуру многослойных систем на основе Fe/MgO и найти способы оптимизации структурных параметров.

В работе были исследованы системы Fe/MgO и CoFe/MgO, выращенные с помощью установки высоковакуумного магнетронного распыления MPS-4000-C6 (Ulvac) на подложках из Si и стекла. Рост производился при базовом давлении остаточных газов $6 \cdot 10^{-7}$ Па, давлении аргона в камере металлов 0,1 Па, давлении аргона в камере MgO 1,144 Па. Отжиг производился в интервале температур 180°C-300°C, на протяжении 30 и 60 минут.

Для определения структурных параметров сверхрешёток и их эволюции во время отжига использовалась рентгеновская рефлектометрия. На рисунке 1 приведены рентгеновские спектры, полученные для системы подвергавшейся отжигу при $T=300^\circ\text{C}$ и неотожжённого образца. Установлено, что отжиг приводит к существенному улучшению структурных свойств и формированию высокосовершенных слоистых структур.

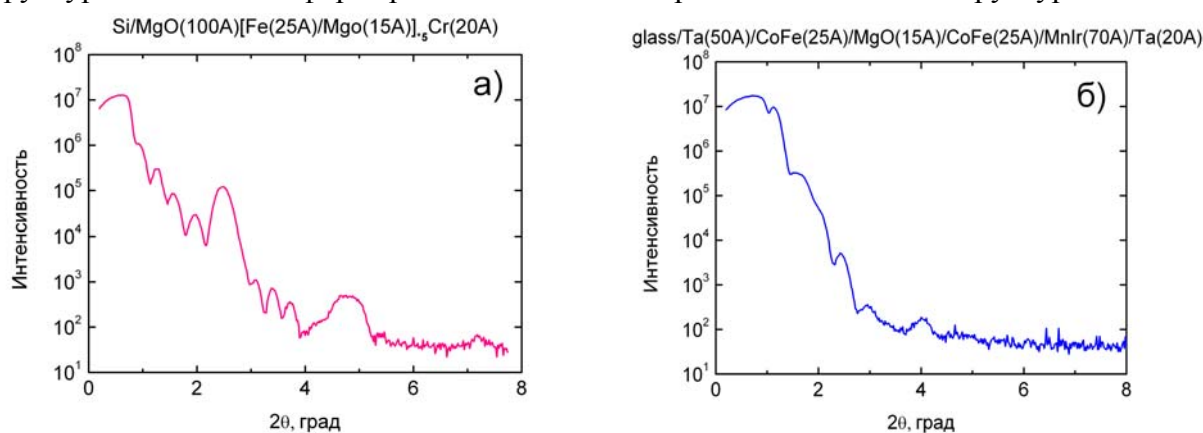


Рисунок 1. Рефлектометрические спектры, полученные от (а) сверхрешётки Fe/MgO, отожжённой при температуре 300°C на протяжении 1 часа (б) спинового клапана CoFe/MgO, выращенного при комнатной температуре и не подвергавшегося отжигу.

Работа выполнена при поддержке программы ОФН РАН (проект 12-Т-2-1011) и РФФИ.

Секция «Разное»

Влияние оксида меди на диэлектрическое «поведение» керамик на основе ниобатов натрия-лития в сильных смещающих электрических полях

А.Г. Абубакаров¹, Х.А. Садыков², И.А. Вербенко²

¹ Чеченский государственный университет, Грозный, Россия

² Научно-исследовательский институт физики Южного федерального университета, Ростов-на-Дону, Россия

В связи с переходом к экологически безопасным материалам и технологиям в электротехнической отрасли [1] возникла необходимость разработки новых экологически чистых сегнетопъезокерамических материалов (СПКМ), обладающих близкими или превосходящими свинецсодержащие аналоги электрофизическими параметрами. Наиболее перспективны для этой цели ниобаты щелочных металлов, например, твёрдые растворы (ТР) системы $(\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x)\text{NbO}_3$, которые, благодаря рекордной скорости звука и низкому удельному весу уже нашли применение в СВЧ-технике. Учитывая возможность их использования в высоковольтных пьезоэлектрических устройствах и датчиках тока, в настоящей работе изучается реверсивная нелинейность подобных ТР, модифицированных оксидными соединениями 3d-металлов (оксидом меди).

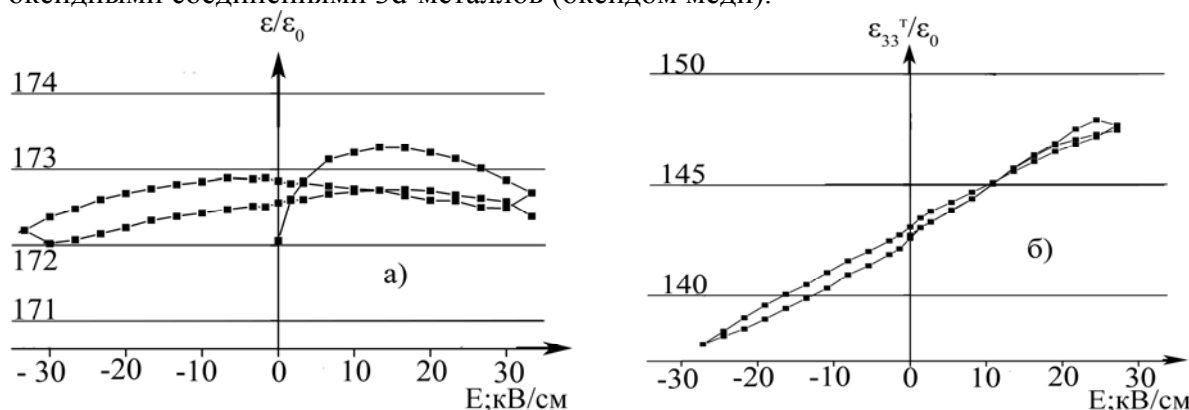


Рисунок. Зависимости относительной реверсивной диэлектрической проницаемости от напряжённости электрического поля неполяризованных (а) и поляризованных (б) керамик изученных составов.

На рисунке представлены зависимости относительной реверсивной диэлектрической проницаемости от напряжённости электрического поля неполяризованных (ϵ/ϵ_0) и поляризованных ($\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$) керамик изученных составов. Как видно из рис. а, эта зависимость в неполяризованном образце имеет форму „бабочки”, характерную для классических СПКМ. Относительно небольшие значения ϵ/ϵ_0 и её слабая зависимость от величины напряжённости электрического поля позволяют отнести исследованные керамики к группе сегнетожестких СПКМ. Эта же зависимость в поляризованных образцах (рис. б) резко отличается предыдущей: при приложении поля в направлении, противоположном направлению поляризации (левые полуциклы), $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$ резко снижается, а при ориентации поля вдоль направления поляризации $\epsilon_{33}^T/\epsilon_0$, напротив, возрастает.

Обращает на себя внимание тот факт, что при поляризации керамик чувствительность ϵ/ϵ_0 по отношению к воздействию внешнего смещающего электрического поля резко (более, чем в 3 раза) возрастает. Это явление может использоваться для создания адаптивных электромеханических преобразователей. Устойчивость же диэлектрических характеристик и низкая ϵ/ϵ_0 в неполяризованных керамиках делают также возможным их применение в качестве высокочастотных конденсаторов.

1. DIRECTIVE 2002/95/EC., Of. J. Euro. Union. **37**, 19 (2003).

Расчеты объемных и поверхностных центров окраски в кристаллах MgF_2

Ф.У.Абуова¹, А.Т.Акилбеков¹, А.Усеинов¹, А.У.Абуова²

¹ Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Алматинский технологический университет, Алмата, Казахстан

Известно, что линзы, стекла и другие оптически прозрачные материалы, изготовленные из MgF_2 пропускают электромагнитные излучения в широком интервале длин волн (от инфракрасного излучения до вакуумного ультрафиолета). Помимо этого, еще одним полезным свойством MgF_2 является его радиационная стойкость. Объективы и оптические окна из фтористого магния (MgF_2) прозрачны в чрезвычайно широком диапазоне энергий фотонов от вакуумного ультрафиолета до инфракрасного. Это также радиационно-стойкий материал, энергии, необходимой для формирования стабильной первичных радиационных дефектов известен как центр F (фтор вакансии с захваченного электрона) между 5К и комнатной температуре значительно выше, чем в других щелочных галогенидов. Это может быть связано с медленной диффузии контролируемых рекомбинации первичных радиационных дефектов в MgF_2 - дополнительный F и H центров (междоузельных ионов фтора), отчасти из-за дефекта распространения и взаимодействия особенностей. Эти два фактора делают MgF_2 важный материал для космических телескопов и других подобных приложениях. Для понимания многочисленных физических свойств очень важны знания атомарной и электронной структуры кристаллической решетки MgF_2 . Мы представляем и обсуждаем результаты расчетов основных центров окраски (F-, H-, дефектов Френкеля) в объеме и на поверхности. Это исследование основано на большом масштабе расчетов DFT с использованием гибридных ВЗРВ обменно-корреляционного функционала, реализованный в CRYSTAL код. Для того чтобы понять поведение материала в отношении облучения и его оптические свойства, мы проанализировали электронной структуры, атомной геометрий, распределение плотности заряда, а также дефекты поверхности и образование энергии с использованием нескольких типов суперячеек.

1.А. Ф. Васильева, Р. Эглитис, Е. А. Котомин, АК Даулетбекова, Physica B 2010, 405, 2125

Эстетический элемент предмета физики твёрдого тела

Д. Н. Габышев¹

¹ Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

Синтетический курс физики твёрдого тела является обширной, развитой областью физики, из которой берёт начало множество узких дисциплин и спецкурсов. Тем не менее, несмотря на основополагающую роль предмета, как правило, при его изучении эстетическому элементу уделяется мало внимания. Вместе с тем, обращение внимания и расстановка акцентов над источниками эстетизации в образовательном процессе помогает учащимся сформировать представление о красоте изучаемых объектов, усилить мотивацию к изучению дисциплины, упростить восприятие понятий и методов курса, ускорить изучение материала за счёт наглядности.

Для выделения потенциальных источников эстетизации положим за основу учебные курсы Н. Ашкрофта и Н. Мермина, Дж. Займана, Ф. Зейтца, Ч. Киттеля, С. В. Вонсовского и М. И. Кацнельсона. Все обнаруженные источники эстетизации в зависимости от формы их представления и сферы приложения могут быть условно поделены на 3 большие группы, образованные совокупностями меньших подгрупп:

1). *визуальные (графические)*:

а). *геометрические*: виды элементарных ячеек решёток Бравэ, виды кристаллических систем, атомные плоскости и их семейства, геометрия алломорфных модификаций углерода, симметрия и элементы симметрии (центры, оси, плоскости);

б). *методико-схематические*: поверхности зон Бриллюэна, колебания линейной одноатомной цепочки, полости поверхностей Ферми (изоэнергетических поверхностей), схемы энергетических зон, электронные орбиты, иллюстрирование дефектов в кристаллах, вектор Бюргера, диаграммы состояния бинарных сплавов, *TP*-диаграммы состояния веществ, графики зависимости температуры тел от подведённой теплоты, модели потенциалов межмолекулярного взаимодействия, диаграммы растяжений;

с). *организационно-символические*: индексы Миллера, обозначения Шенфлиса точечных групп, представление операторов групп матрицами, линейный или экспоненциальный вид формул, скобки Дирака;

д). *фотографические*: изображения ионной микрографии и электронной микроскопии, фотографии зёрен и субзёрен в твёрдых растворах;

2). *эмпирические*:

а). *феноменологические*: отражение рентгеновских лучей от атомных плоскостей, понятие об экранировании, концентрация носителей и потенциал вблизи *p-n*-перехода;

б). *экспериментальные*: тепло Томсона, эффект Зеебека, эффект Пельтье, эффект Холла, магнетосопротивление проводника с током в поперечном магнитном поле;

3). *лексические (языковые)*:

а). *формульные*: порождающие обратную решётку формулы, связь объёмов элементарной ячейки прямой и обратной решётки, условие Вульфа–Брэгга, закон Гука, законы тепло- и массопереноса в твёрдых телах, функции распределения;

б). *таксономические*: точечные и пространственные группы симметрий, классификация химических связей, классификация твёрдых тел;

с). *абстрактные*: обратная решётка, понятие фонона.

Осознание эстетического элемента, представленного обозначенными группами, в преподавании физики твёрдого тела поможет педагогу обогатить учебный процесс и продолжить реализацию воспитательной цели образования на этапе специализации.

Оценка знака конформного параметра на основе анализа стабильности круговых орбит в галактических гало

Г. М. Гарипова¹, К. К. Нанди^{2, 1}

¹ Стерлитамакская государственная педагогическая академия им. Зайнаб Бишеевой

² Северо-Бенгальский университет, г. Силигури, Индия

Проблема темной материи – один из наименее изученных вопросов в современной астрофизике. Из наблюдений следует, что для отдельных галактик невидимая масса возрастает с удалением от центра, однако для галактических скоплений это правило выполняется с точностью до наоборот. Вокруг некоторых объектов (в частности, DD0154) разброс значений массы темной материи достигает значительных масштабов. Если говорить об общей массе отдельной галактики, то величина эта определяется с известной степенью неточности, поскольку закон $v \propto r^{-1/2}$ нарушается на больших расстояниях. Но в целом темная материя, отвечающая за притяжение, играет роль в относительно маленьких по космологическим меркам масштабах, в отличие от темной энергии, обычно связываемой с ускоренным расширением Вселенной. Отсюда вытекает наше предположение о том, что максимальные радиусы стабильных материальных орбит лежат внутри значения деситтеровского радиуса Вселенной. А это, в свою очередь, избавляет от неопределенности касательно знака конформного параметра.

Воспользуемся тем, что, согласно наблюдениям, атомы нейтрального водорода внутри гало движутся по круговым орбитам вокруг центра галактики. Зная их релятивистское красное смещение, можно определить тангенциальные скорости. Заметим, что вследствие конформной инвариантности теории, геодезические линии для массивных частиц должны, в общем случае, зависеть от конформного фактора $\Omega^2(x)$, однако здесь в целях удобства рассмотрена фиксированная метрика.

Нашей задачей было при помощи гамильтоновых динамических систем найти максимальные радиусы, при которых в пределах гало еще могут существовать стабильные эллиптические орбиты. Анализ основывается на представлении уравнений геодезических в рамках решения Маннхайма-Казанаса-де Ситтера в виде системы Гамильтона [1]:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= X(x, y) = y, \\ \dot{y} &= Y(x, y) = a + bx + cx^2 + dx^{-2} + ex^{-3}.\end{aligned}$$

Здесь

$$a = \frac{M}{h^2} - \frac{\gamma}{2}, b = -1, c = 3M, d = \frac{\gamma}{2h^2}, e = -\frac{k}{h^2}.$$

Расчет показывает, что стабильные орбиты существуют лишь до значения радиуса $R = 4.25 \times 10^{27}$ см при $\gamma = -7 \times 10^{28} \text{ см}^{-1}$.

1. D.W. Jordan and P. Smith, Nonlinear ordinary differential equations, 3rd edition (Oxford University Press, Oxford, 1999)

The infrared spectra glass-like semiconductor of As_xSe_{1-x} system containing Sm impurity

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

Institute of Physics of the Azerbaijan NAS AZ, Baku, Azerbaijan

Glass-like semiconductor As-Se are more intensive investigated in comparison with other semiconductors [1,2,3]. This is connected with their as active layers application in the different optoelectronic and diffraction-devices, planar wave guides, DVD disks, etc. Chalcogenide glass-like semiconductors (CGS) attract investigations as perspective materials for use in IR technique, various switching, memory and also acoustooptical devices [4]. 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. Influence of samarium impurities on the infrared (IR) spectrum of system $Se_{95}As_5$ has been investigated in this work. In the system As_xSe_{1-x} existing as positive samarium ions influences on the concentration of charged defects, the neutral hypervalence and diamagnetic defects which sharply changes optical properties of the system.

Synthesis of $Se_{95}As_5$ 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 $900^\circ C$ in rotary furnace with subsequent cooling in OFF regime. Impurity is made in synthesis process, its concentration is within $0.01 \div 0.6$ at%.

In work investigated with method IR of spectroscopy of amorphous selenium and system $Se_{95}As_5$ containing impurity samarium. It is certain that, in IR a spectrum of amorphous selenium due to hyper-valence defects maxima with different intensity are observed in 230 and 270 cm^{-1} . Addition to selenium of arsenic (5 at %) leads to occurrence of two additional peaks in high-frequency area (613 and 790 cm^{-1}). It is established, that these facts are connected structural units $As(Se_{1/2})_3$ in glass. At increase in concentration of an impurity samarium in spectrum $Se_{95}As_5$, in frequency of 400 cm^{-1} the maximum which occurrences of structural fragments is observed.

1. A.Meden, M. Sho, Physics and use of amorphous semiconductors, Mir, M. pp. 670, (1991)
2. K.L.Bhatia, G.Parthasarathy G, E.S.Gopal, J.Non-Cryst. Sol. 69, 189, (1985)
3. M.A. Iovu, S.D. Shutov, A.M. Andriesh, E. I. Kamitsos, J. of Optoelectron Adv. Mater, 3(2001) 443.
4. Tanaka Keiji. Nonlinear Optics in Glasses: How can we analyze? // Book of Abstracts 7th Int.Conf. On Solid State Chemistry. Czech Rep., Pardubice, p. 60, (2006).

Новые возможности в использовании «умных» магнитоуправляемых материалов

И.В. Деменцова, М.Ф. Хайруллин, А.С. Семисалова, Н.С. Перов

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет), Москва, Россия

Магнитоэластики - это магнитоуправляемые композиционные материалы, способность которых изменять размеры и упругие свойства в магнитном поле создает большие возможности для их широкого применения.

Как правило, эластомер состоит из упругой матрицы, в которую встроены магнитные частицы. Размеры этих частиц, распределение их в матрице, а также упругие свойства самой матрицы определяют свойства самого магнитоэластика. Нами было обнаружено влияние магнитного поля не только на величину магнитной восприимчивости, но и на диэлектрическую проницаемость магнитоэластика. В настоящей работе представлены результаты исследований влияния свойств наполнителя магнитоуправляемого эластомера на его магнитную и диэлектрическую проницаемости.

Были исследованы магнитоэластики на основе частиц FeNdB, Fe, Fe₃O₄ различных размеров и концентраций. Измерения магнитных свойств частиц проводились на вибрационном магнитометре фирмы “Lake Shore” при комнатной температуре. Определение величин магнитной восприимчивости и диэлектрической проницаемости осуществлялось динамическими методами в диапазоне частот 50 Гц – 200 кГц, измерительная ячейка размещалась в зазоре электромагнита, который создавал постоянное магнитное поле до 8 кЭ.

Обнаружено существенное влияние намагниченности насыщения, коэрцитивной силы и проводимости наполнителя на полевые зависимости магнитной восприимчивости и диэлектрической проницаемости эластомера. Сравнение материалов с различными наполнителями показало, что большую роль в поведении магнитоэластиков в магнитном поле играют концентрация частиц и их размер.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке различных прикладных устройств с магнитоуправляемыми свойствами.

Исследования проведены в рамках грантов РФФИ 11-02-00906-а и 11-02-12170-офи-м-2011.

О конденсированных связях элементарных частиц

В.В. Дикусар¹, А.А. Тюняев¹

¹ Вычислительный центр имени Дородницына РАН, Москва, Россия

Связи системы элементарных частиц (ЭЧ) основаны на трёх фундаментальных физических константах – m_e (масса электрона, далее просто m), J (спин, равный $1/2$), e (электрический заряд электрона); остальные связи выводятся из указанных [1]. Единичная совокупность различных ЭЧ представляет собой квазичастицу, в которой каждая из ЭЧ является одним из граничных (стабильных) состояний этой системы, представленных в троичной логике (m ; J ; e). Каждая такая квазичастица описывается своей, частной системой координат, сложенной тройкой векторов m , J , e (рис. 1) и связанной с декартовым пространством XYZ посредством уравнений Максвелла [2].

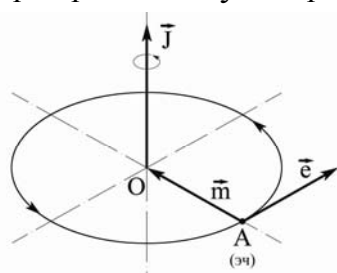


Рис. 1. Система координат mJe (одна полусфера).

Структура взаимодействий внутри квазичастицы между её состояниями (ЭЧ) определяется векторным произведением (1):

$$J = [e, m], \quad (1)$$

ЭЧ, как варианты существования (проявления) квазичастицы, описываются однострочной матрицей вида $(m; J; e)$, каждый кластер которой может принимать значения: «-1», «0», «+1» и обозначает «включенность» – «±1» или «выключенность» – «0»

соответствующего параметра из тройки $m; J; e$. Комбинаторика возможных состояний устанавливает существование 27 ЭЧ, оформленных в Периодическую систему элементарных частиц (ПСЭЧ) [3]. В первом периоде ПСЭЧ располагаются кванты зарядов – гравитон, фотон, электрический заряд. Во втором – кванты полей (рис. 2). В третьем – кванты токов.

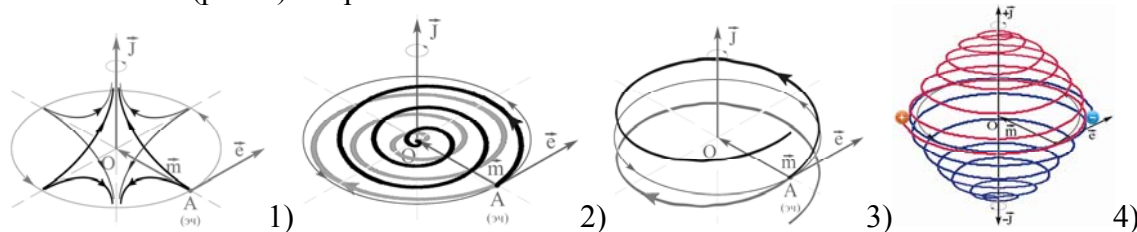


Рис. 2. Поля: 1) гравитационное, 2) электростатическое, 3) магнитное, 4) комплексное.

В нулевом периоде ПСЭЧ располагается квант вакуума – резон [4]. Как квазичастица, он имеет нулевые параметры mJe и является невозбуждённым состоянием системы. Обладает свойствами сверхтекучести и сверхпроводимости, сформирован куперовской парой [5], структурирован в виде метаматериала [6] и является объектом непрерывного взаимодействия со стороны всех других ЭЧ. Разрыв резона (путём перевозбуждения) переводит квазичастицу «квант вакуума» в другую квазичастицу «нейтрон», а процессы, реализуемые в «чёрных» дырах, нейтрон переводят в резон [2].

1. Л.Б. Окунь Фундаментальные константы физики // УФН. 161 (1991) 177 – 194.
2. В.В. Дикусар, А.А. Тюняев. Опыт создания модели нейтрона в пространстве констант mJe // Материалы семинара «Нейтроника». Обнинск, октябрь 2011.
3. А.А. Тюняев. Периодическая система элементарных частиц. Под редакцией д. ф.-м. н., проф., академика РАЕН О. А. Хачатуряна. – М.: Спутник+, 2009.
4. В.В. Дикусар, А.А. Тюняев. Резон – квант пространства: свойства, особенности, качества // Динамика неоднородных систем. ИСА РАН. 2010. № 50 (1). С. 72 – 79.
5. В.В. Дикусар, А.А. Тюняев. О сверхпроводимости в квантах вакуума // Материалы 1-й Нац. конференции по сверхпроводимости. НИЦ им. Курчатова. Москва. 2011.
6. I.I. Smolyaninov. Vacuum as a hyperbolic metamaterial. arXiv:1108.2203v1. 10.08.2011.

Люминесценция монодисперсного коллоидного оксида кремния активированного ионами Tb³⁺

А. Ж. Жанботин¹, Т. Н. Нурахметов¹

¹Евразийский Национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Как было показано авторами¹, спектр люминесценции мезопористого коллоидного кремния (ЛМКК) зависит от времени и температуры отжига, оптимальное для интенсивности люминесценции соотношение составило 6 часов при 200С, а так же массовое соотношение TEOS (C₈H₂₀O₄Si-tetraethyl orthosilicate) и APTES (CH₃(CH₂)₁₅N(CH₃)₃Br, cetylmethylammonium bromide) в силикагеле, 1:3 соответственно. При допировании полученного в результате силикагеля ионами Eu³⁺ наблюдалось увеличение собственной светимости лантанида². Нами было произведено допирование этой же вариации силикагеля ионами Tb³⁺. Трехвалентные ионы тербия обуславливают люминесценцию в видимом диапазоне благодаря оптическим переходам ⁵D₄ → ⁷F_j (j = 3, 4, 5, 6), наиболее интенсивный из которых ⁵D₄ → ⁷F₅ соответствует длине волны излучения 543 нм. Появляются четкие полосы, соответствующие оптическим переходам трехвалентных ионов тербия, при 490 нм (переход ⁵D₄ → ⁷F₆), 543нм (переход ⁵D₄ → ⁷F₅), 592 нм (переход ⁵D₄ → ⁷F₄), 628 нм (переход ⁵D₄ → ⁷F₃). Ион тербия (III) (Tb³⁺) проявляет долгоживущие возбужденные состояния ⁵D₄ и его спектр излучения состоит из нескольких узких полос. Это связано с тем, что ⁵D₄ излучающий возбужденный уровень и все ⁷F_J (J = 0, 1, ..., 6) уровни мультиплета основного состояния имеют одинаковую электронную конфигурацию; 4f₈ и 4f-электроны хорошо защищены от внешнего заряда внешними 5S² 5p⁶ и уровнями. Интенсивность люминесценции ионов Tb³⁺ при смешивании ТАР6 с Tb³⁺ не настолько высока, как для Eu³⁺ одинаковых масс². В случае увеличения массы тербия, интенсивность лантанида растет, однако интенсивность ЛМКК остается почти на том же уровне.

В случае ЛМКК частиц (ТАР48) с ионами Tb³⁺ наблюдается явное тушение люминесценции частиц и достаточно высокая интенсивность линий тербия (рисунок 1). Необходимо снова упомянуть о том, что низкоэнергетичная часть излучения в ТАР48 преобладает более чем в ТАР6 частицах¹. Отсюда и большая, по сравнению с ТАР6, "накачка" люминесценции тербия низкоэнергетичными переходами ТАР48.

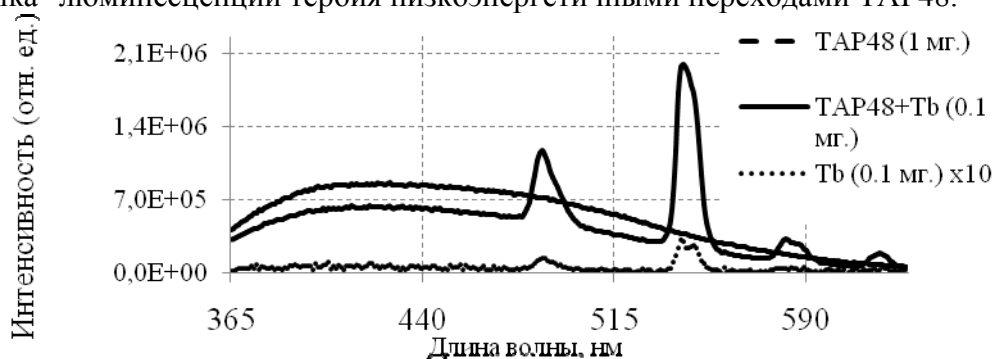


Рис. 1. Интенсивности люминесценции ЛМКК частиц (ТАР48+Тб) (для наглядности интенсивность Тб увеличена на порядок) ($\lambda_{возб.}=320$ нм)

1. A. Zhanbotin, T.N. Nurakhmetov, T.A. Schmedake, "Chemistry and optical properties of luminescent mesoporous colloidal silica", Russian Physics Journal, Vol. 52, No. 8/2, 2009, p.369-372.
2. Arman Zhanbotin, Ronald B. Soriano, Anita K. Ikonen, Turlybek N. Nurakhmetov, Thomas A. Schmedake, Luminescent mesoporous colloidal silica: A nanoporous substrate for photosensitization of lanthanide ions. Materials Letters V.65 (2010), P. 10–12. doi:10.1016/j.matlet.2010.08.080

Двенадцативершинная модифицированная модель Поттса с взаимодействием ближайших соседей в магнитном поле

Ф.А. Кассан-Оглы, Б.Н. Филиппов

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

В огромном классе монониктидов и монохалькогенидов редких земель и актинидов со структурой NaCl, обладающих очень сильной анизотропией, подавляющее большинство относится к ферромагнетикам и антиферромагнетикам с осями легкого намагничивания либо по направлениям типа (001), либо типа (111). Для их описания традиционная изотропная модель Гайзенберга неприменима, а наиболее подходящими являются модифицированные модели Поттса – 6-вершинная и 8-вершинная (см., например [1,2]), а также стандартная 4-вершинная модель Поттса. Но среди множества этих магнетиков два соединения, а именно, UR [3] и UAs [4] это антиферромагнетики с осями легкого намагничивания типа (110). Для их описания требуется 12-вершинная модифицированная модель Поттса, которую мы и рассматриваем в данной работе.

Методом трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье получено точное аналитическое решение для двенадцативершинной модифицированной модели Поттса. Выведены аналитические выражения для намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости и магнитокалорического эффекта, и численно проанализированы как функции температуры и магнитного поля в зависимости от знака обменного взаимодействия и величины и направления внешнего магнитного поля.

На Рис.1а изображена зависимость магнитной теплоемкости от магнитного поля по направлению (111) в 12-вершинной модели при фиксированной температуре. Положения двух острых минимумов на этой кривой соответствуют двум фрустрирующим полям, то есть тем значениям поля, при которых происходят скачки намагниченности или энтропия стремится к ненулевому значению при $T \rightarrow 0$. Соответственно возле этих фрустрирующих полей наблюдается резкий рост магнитокалорического эффекта при понижении температуры (см. Рис.1б).

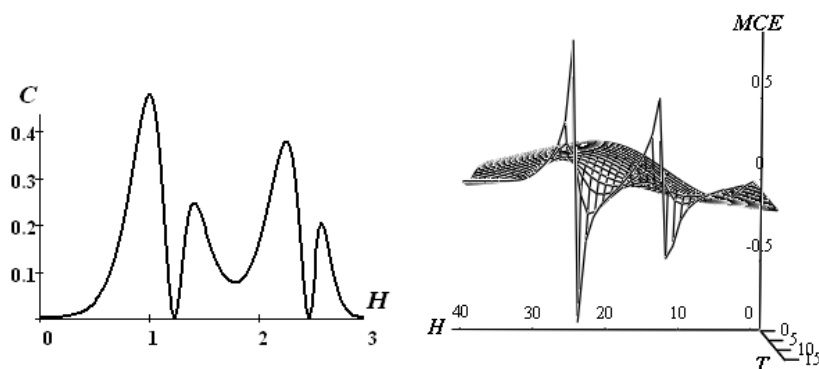


Рис.1. 12-вершинная модель Поттса. Поле – (111).
Теплоемкость (а), магнитокалорический эффект (б).

Работа поддержана проектом интеграционных фундаментальных исследований УрО РАН, № 12-И-2-2020 и проектом РФФИ, № 11-02-00931а.

1. F.A. Kassan-Ogly and B.N. Filippov, *JMMM* v. 300, no1, E559, (2006).
2. Ф.А. Кассан-Оглы, Б.Н. Филиппов, *ФММ*, т.109, с 1. (2009).
3. Vogt, O., Wachter, P., Bartholin, H., *Physica B*, v. 102, p. 226, (1980).
4. Rossat-Mignot, J., Burllet, P., Quézel, S., et al., *Physica B*, v. 130, p. 327, (1985).

Морфогенетический синтез бигексагональной квазикристаллической мозаики

Н.А. Ковалькова, Е.С. Старцев

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

Одной из задач классической кристаллографии является задача бездефектного замощения плитками пространства R_2 . Данная задача успешно решается в рамках кристаллографических паркетов. Однако не существует четко определённого алгоритма построения квазикристаллических мозаик. Ярким примером такого «нерекурсивного алгоритма» является алгоритм построения мозаики Пенроуза. Как отмечал сам Пенроуз, поочередное присоединение плиток требует некоторой перестройки предыдущего окружения; здесь он привлекает квантово-механическую парадигму для трактовки интегрального, целостного эффекта. Классические задачи замощения, разбиения решались на минимальном алфавите плиток, которые являются абсолютно твердыми. Мы отказываемся от этого положения. Плитки паркета не являются абсолютно твердыми, а их отношения метрических характеристик управляются золотыми и другими замечательными числами. Инвариантами при этом являются характерные форм-факторы трехуровневых дуальных алфавитов. Примером такого морфогенетического синтеза является синтез мозаики Пенроуза, показанный в работе [1]. Где в основе морфогенеза лежит Q-матрица Фибоначчи, а числа заполнения составляют замечательный ряд Фибоначчи.

Нами предложен аналогичный метод морфогенетического синтеза бигексагональной мозаики (рис 1).

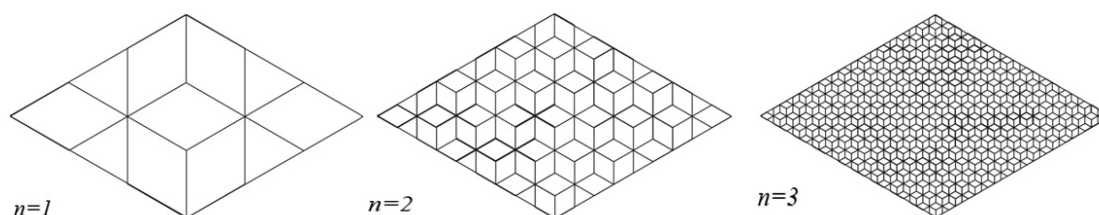


Рис. 1. Три поколения морфогенетического синтеза бигексагональной мозаики.

Алфавит данной мозаики предельно прост. Фактически, нижний уровень алфавита представлен единственным гексагоном, а высший – фразеологический, дается объединением с пересечением пары гексазвезд. Именно этим уровнем сработаны шаги $n=2,3$ на (рис.1). Если говорить в терминах порождающих матриц, то отличный от нуля матричный элемент равный 3 будет единственным. Несмотря на то, что определитель матрицы нулевой, для такой матрицы все равно можно образовать матричные орбиты по обычным правилам мультипликации. Также применим «квадратичный» прием получения генератора для самой бигексагональной мозаики. В результате мы получим траекторию, или соответствующий замечательный ряд на решеточном пространстве. Это будет показательная функция с основанием 3. Тангенс угла наклона траектории на фазовой плоскости $(n_{i+1}; n_i)$ составит $\sim 1,1$. Именно этот ряд управляет числом гексаромбов в итерациях (Рис.10).

1. В. В. Юдин, Ю. А. Карыгина, *Кристаллография*, **46** (2001), 1004.

Морфогенетический синтез квартетно-октагональной мозаики

А.А. Кондратьева, Е.С. Старцев

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

Есть работы «физического» направления, которые занимаются численным моделированием структуры квазикристаллов [1-3]. Один из них принадлежит к чистой математике, где ставится и решается задача о разбиении R_2 , R_3 минимальным числом плиток. Существует несколько подходов к пониманию синтеза квазикристаллических паркетов. В подходе Пенроуза этих плиток две – золотые ромбы, полученные объединением треугольников Робинсона по золотым сторонам. Как отмечает сам Пенроуз, даже если внести некоторые пометки на стороны ромбов, не удастся найти четкий алгоритм покрытия, разбиения. По его мнению, пентасимметричный паркет является примером нерекурсивной математики. В работе [4] предложен совсем иной, морфогенетический синтез квазикристаллических мозаик. Плитки паркета не являются абсолютно твердыми, а их отношения метрических характеристик управляются золотыми и другими замечательными числами. Инвариантами при этом являются характерные форм-факторы трехуровневых дуальных алфавитов.

На (рис.1) показан морфогенетический синтез квартетно-октагональной мозаики, где можно выделить трехуровневый дуальный алфавит. На первом уровне присутствуют два равнобедренных треугольника с вершинными углами в 45 и 90 градусов соответственно. Второй уровень образуется объединением по особой стороне. Тогда мы получаем ромб с острым углом 45 градусов и соответственно квадрат. Последний и был использован в качестве затравочного гена процесса редупликации. Третий уровень – фразеологический, представлен единственным восьмиугольником.

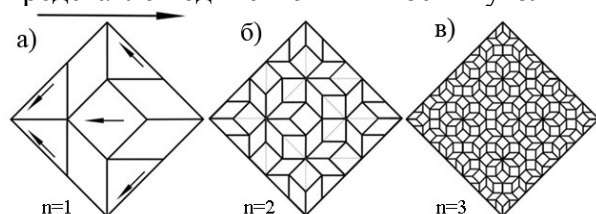


Рис.1. Три поколения морфогенетического синтеза квартетно-октагональной мозаики.

Аналогично мозаики Пенроуза здесь существует своя порождающая Q-матрица. Матричная орбита которой будет иметь следующий вид:

$$(\Delta_Q^{1+})^n \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^2 \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}^3 \Rightarrow \begin{pmatrix} 7 & 10 \\ 5 & 7 \end{pmatrix}^4 \Rightarrow \begin{pmatrix} 17 & 24 \\ 12 & 17 \end{pmatrix} \dots$$

Коэффициент подобия: $K_Q = \lambda_{MAX}^{1+} = 1 + \sqrt{2}$, где λ_{MAX}^{1+} - максимальное положительное собственное значение матрицы Δ_Q^{1+} . Матричная орбита матрицы даёт следующий замечательный ряд (или Q-ряд), лежащий в основе квартетно-октагональной мозаики: 1, 1, 2, 3, 4, 5, 7, 10, 12, 17, 24, 29, 41, 58, 70, 99, 140, 169, 239 ...

1. P. J. Steinhardt, *Nature*, **452**, (2008), 43-44.
2. A. S. Keys, S. C. Glotzer, *Phys. Rev. Lett.*, **99** (2007), 235503, 4 pp., arXiv:0705.0106v3
3. E. Abe, Y. F. Yan, S. J. Pennycook, *Nature Mat.*, **3** (2004), 759-767.
4. В. В. Юдин, Ю. А. Карыгина, *Кристаллография*, **46** (2001), 1004.

Фермион-фермионное взаимодействие в разбавленной бозе-конденсированной газовой смеси

Т.И. Могилюк

Московский Физико-Технический Институт (Государственный Университет), Москва, Россия

В работе исследовалось фермион-фермионное взаимодействие в разбавленной ферми-бозе газовой смеси при температурах ниже точки бозе-эйнштейновской конденсации, когда бозевская компонента находится в конденсированном состоянии. Наше рассмотрение мы начинаем с действия в представлении Мацубары, заданном на мнимом времени τ на отрезке $(0, 1/T)$. Действие для всей системы состоит из трех членов ($\hbar = 1$, объем $V = 1$):

$$S = S_B + S_F + S_i.$$

Здесь S_B - действие, связанное с бозе-подсистемой

$$S_B = \int dx \Phi^* \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\Delta}{2m} - \mu_B + g \Phi^* \Phi \right) \Phi,$$

где $x = (\mathbf{r}, \tau)$ и \mathbf{r} - пространственная координата. Как обычно, $g = 4\pi a_{BB}/m$ - константа взаимодействия между бозонами, a_{BB} - длина рассеяния и m - масса бозе-атома.

Действие S_F , ответственное за ферми-подсистему, дается выражением

$$S_F = \int dx \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^* \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\Delta}{2M} - \mu_F + g_f \Psi_{-\sigma}^* \Psi_{-\sigma} \right) \Psi_{\sigma},$$

где M -- масса фермионов.

Наконец, введем член, связанный со взаимодействием между фермионами и бозонами

$$S_i = \int dx dx' \sum_{\sigma} \Phi^*(x) \Psi_{\sigma}^*(x') u(x-x') \Psi_{\sigma}(x') \Phi(x).$$

Для удобства обозначим взаимодействие между ферми- и бозе-атомами как $u(x-x') = u(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\tau - \tau')$, для того чтобы сделать интегрирования по времени симметричным.

1. Могилюк Т.И., ЖЭТФ, **140**, вып. 5, 835 (2011)
2. Башкин Е.П., Меерович А.Э. Магнитные свойства квантовых жидкостей He-He. УФН **130**, 279 (1980)
3. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков and И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической механике*. - М.: Физматгиз, 1962.

Низкотемпературные рентгеноструктурные исследования монокристаллов лопарита

*E.A. Попова^{1,2,3}, S. Chillal¹, S. Katrych⁴, W. Lorenz¹, A. Zheludev¹, С.Г. Лушников³,
С.В. Кривовичев²*

¹Neutron Scattering and Magnetism group, Laboratory for Solid State Physics, Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETH), Zurich, Switzerland

²Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

³Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

⁴High Pressure Synthesis group, Laboratory for Solid State Physics, Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETH), Zurich, Switzerland

Минерал лопарит-Се, утвержденный ИМА относительно недавно, в 1983 году ($(\text{Ce,Ca,Na,M})(\text{Ti,Nb})\text{O}_3$ (где $M = \text{Sr,TR,Th}$ и т.д.)), был впервые обнаружен в породах Ловозерского щелочного комплекса в 1890 году, однако структура этого минерала до сих пор является предметом дискуссий [1]. Данное соединение относится к структурному типу перовскита (ABO_3) и состоит из BO_6 октаэдров, соединенных между собой через мостиковые атомы кислорода, межкаркасные полости заполнены катионами А позиции. Однако разнообразие катионов, входящих как в А, так и в В позицию, равно как и степень упорядочения в обеих подрешетках, определяют различные искажения в структуре. Это, в свою очередь, ведет к отклонениям от классической структуры перовскита. Проведенные ранее исследования температурной зависимости диэлектрического отклика лопарита выявили ряд аномалий в низкотемпературной области, что и инициировало подробное изучение этого соединения.

В данной работе представлены результаты исследований кристаллической структуры и теплоемкости монокристаллов лопарита из Хибинского массива Кольского полуострова в диапазоне от 2 до 400 К.

Рентгеноструктурные эксперименты выполнены на монокристалльном дифрактометре Bruker SMART APEX II. Параметры элементарной ячейки и матрица ориентации определялись по полученным отражениям и уточнялись по всему массиву рефлексов [2]. Расшифровка и уточнение структуры выполнены в программе SHELXL-97 [3]. Изменение температуры образца производилось при помощи приставки Oxford Cryosystems Cryostream 700 Plus. Температурная зависимость теплоемкости была получена с помощью PPMS (Quantum Design).

Анализ полученных дифракционных данных показал, что структура лопарита в исследуемом интервале температур (80К – 300К) не меняется. Поведение теплоемкости при изменении температуры (рис.1) подтверждает отсутствие фазовых переходов в монокристаллах лопарита.

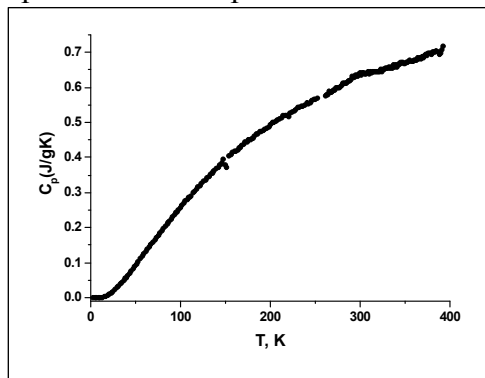


Рис.1 Температурная зависимость теплоемкости монокристалла лопарита

1. Mitchell R.H. Perovskites: Modern and Ancient. Thunder Bay: Almaz Press Inc., 2002, 318 p.
2. Bruker (2009). APEX II, SAINT. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA.
SHELXL-97, Sheldrick, G.M., University of Goettingen, Germany, 1997

Влияние электронного облучения на образование дефектов упаковки и механические свойства двух разных типов микроструктуры в сплаве 36НХТЮ

А. В. Русакова¹, А. Т. Акилбеков¹, Д.Л. Алонцева²

¹ Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

² Восточно-Казахстанский государственный технический университет, Усть Каменогорск, Казахстан

Модифицирование свойств сплавов путем воздействия на них ионных, электронных или лазерных пучков является одной из наиболее перспективных отраслей металловедения.

Облучение различного рода частицами приводит к расщеплению существующих дислокаций в облучаемом материале, что снижает их маневренность, понижает скорости динамического и обычного отдыха, способствуя, в свою очередь, повышению внутренних напряжений в металле при пластической деформации.

Исследовали образцы дисперсионно-твердеющего сплава 36НХТЮ, подвергнутого закалке от $T=970^{\circ}\text{C}$ (20 минут), соответствующей однофазному состоянию, после чего проводили холодную деформацию прокаткой со степенью обжатия 99% до толщины 0,3 мм, старение при $T=850^{\circ}\text{C}$ в вакууме в течении 10 мин и 1 часа и облучение в атмосфере на импульсном ускорителе ЭЛУ-6 ($E=2\text{МэВ}$, $\Phi=3\cdot 10^{19}$ е/см²). Проводили механические испытания, заключающиеся в одноосном растяжении до разрыва образцов сплава до и после облучения. Измеряли пределы прочности, текучести и относительное удлинение до разрыва.

Применение просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и метода обратно-рассеянных электронов (EBSD), позволило сделать выводы, что электронное облучение приводит к снижению энергии дефектов упаковки (ЭДУ) в закаленном сплаве 36НХТЮ, что проявляется в увеличении числа дефектов упаковки (ДУ) в облученном сплаве и в росте его пределов прочности и текучести с одновременным снижением относительного удлинения до разрыва.

Установлено, что старение при 850°C в течение разного времени прокатанного после закалки со степенями обжатия 99% сплава 36 НХТЮ приводит к формированию в нем 2-ух разных типов микроструктур: несовершенной структуры микродуплекс при старении в течение 10 минут и структуры из элементарных ячеек прерывистого распада (ЭЯПР) при старении в течение 1 часа. Сформированные микроструктуры имеют отличия в механических свойствах (пластичность выше у микроструктуры из ЭЯПР) и в числе ДУ (их больше у структуры микродуплекс), что говорит о том, что ЭДУ выше у структуры из ЭЯПР.

Электронное облучение приводит к увеличению пластичности обеих типов структур при сохранении их прочностных характеристик, что связано с увеличением объемной доли ЭЯПР в обоих типах микроструктуры и с относительным измельчением размеров зерен (по сравнению с размерами в сплаве с той же механико- термической обработкой до облучения).

Магнитоэлектрический сборщик сверхвысокочастотной энергии

И.Н. Соловьев¹

¹ *Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия*

Цель данной работы заключается в исследовании и разработке магнитоэлектрического (МЭ) сборщика сверхвысокочастотной энергии, работающем в диапазоне частот в пределах 1850-1990 МГц. Актуальность таких исследований в области энергетики и энергоэффективности, а именно в разработке автономных источников энергии для маломощных устройств электроники особенно велика, поскольку подобные устройства содержат в себе элемент питания, требующий периодической замены либо подзарядки.

Данный диапазон частот выбран не случайно, он соответствует наиболее распространенным цифровым стандартам CDMA/GSM для мобильной сотовой связи, в диапазонах которых происходит передача электромагнитной энергии от базовых станций.

МЭ сборщик СВЧ энергии способен преобразовывать энергию от внешних источников энергии: внешних электромагнитных полей и источников механических колебаний. В предлагаемом устройстве собранная из окружающей среды электромагнитная энергия преобразуется и усиливается за счет использования специфических явлений, присущих особой МЭ структуре, и за счет внутренних свойств материалов МЭ резонатора. В работе устройства используются сразу несколько эффектов: МЭ эффект в области электромеханического резонанса (ЭМР); МЭ эффект в области ферромагнитного резонанса (ФМР); МЭ эффект в области магнитоакустического резонанса (МАР).

Данное устройство представляет собой систему, состоящую из нескольких модулей: приемный модуль, который отвечает за сбор электромагнитной энергии из окружающего пространства; резонаторный модуль, выполняющий двойную функцию преобразования и усиления поступающей энергии; модуль управления, предназначенный для создания постоянных магнитных полей смещения и управления, а также дополнительных условий для осуществления усиления мощности; модуль выпрямления, отвечающий за конвертирование переменной СВЧ мощности в постоянный электрический ток; аккумулялирующий модуль, предназначенный для сбора, хранения и передачи поступающей электрической энергии к маломощным устройствам электроники.

На данном этапе работы были проведены математические расчеты МЭ эффекта с использованием компьютерной программы Maple, была разработана структурная схема МЭ сборщика сверхвысокочастотной энергии. Теоретическая модель, построенная в данной работе, основана на точном решении уравнений движения среды и использует материальные параметры исходных компонентов структуры, а также одновременное решение уравнений эластодинамики, электростатики, электродинамики и магнитостатики.

МАР наблюдается в том случае, когда частота ЭМР совпадает с частотой ФМР. При этом ЭМР происходит в электрической подсистеме, а ФМР – в магнитной. За счет совмещения ФМР и ЭМР величина МЭ эффекта увеличивается в десятки раз, при этом происходит передача энергии между фононами, спиновыми волнами, электрическим и магнитным полями.

На частоте ФМР из МЭ резонатора при определенной ориентации управляющих магнитных полей за счет особой конструкции резонаторного модуля реализуется магнитостатический ферритовый усилитель с непрерывной накачкой малой мощности. Если приложить постоянное магнитное поле в том же направлении, что и сигнал накачки, то в слое ЖИГ можно параметрически возбудить определенный тип спиновых волн на частоте, равной половине частоты накачки. Поскольку принцип работы устройства состоит в одновременном выполнении ряда явлений, то требуется прецизионность в настройке МЭ резонатора. Поэтому в будущем планируется проведение экспериментальных исследований МЭ резонатора и остальных модулей МЭ сборщика СВЧ энергии при различных условиях.

Роль атомов серебра с изменением ширины запрещенной зоны в теллуриде серебра

Е.Р. Гасанов, Р.А. Гасанова, Е.В. Сохбатов

*Бакинский Государственный Университет Баку, Азербайджан
Институт Физики НАН Азербайджана, Баку, Азербайджан*

Анализ электрофизических свойств Ag_2Te позволяет считать, что это соединение относится к группе нестехиометрических полупроводниковых фаз переменного состава, обладающей характерными особенностями; такими как структурный фазовый переход, сложная энергетическая структура и смешанный ионноковалентно-металлический характер химической связи. Одним из основных признаков теллурида серебра является собственная дефектность, которая обуславливает отклонения от стехиометрии и изменения энергетических и кинетические параметров носителей заряда. Неполное заполнение тетраэдрических и октаэдрических пустот приводит к кристаллизации соединений Ag_2Te в решетках собственного типа, а наличие ионизированных и вакансий атомов серебра в подрешетке влияет на механизм электрон-фононного процесса.

Сильная зависимость электрических и термоэлектрических свойств Ag_2Te при отклонениях от стехиометрии, обусловлена образованием и поведением собственных дефектов–вакансий по Ag (межузельных атомов) $Ag_{2-x}Te$ и связано с возникновением дополнительных носителей заряда (n_D). Расчеты показывают, что если выполняется условие $n_D \geq n_i$, то при этом изменяется ширина запрещенной зоны. Это условие удовлетворяется в случае $Ag_{2-x}Te$ при добавках 0.01 at.% Ag и 0.05 at.% Te.

Из анализа моделей образования собственных дефектов и их диффузии обуславливается движение вакансий междузельных атомов серебра. Среди членов семейства халькогенидов серебра Ag_2B (B-S, Se, Te) только Ag_2Te обладает *n*- и *p*- типом проводимости.

Как отмечалось выше, что физические свойства Ag_2Te определяются поведением собственных дефектов и, следовательно, отклонением от стехиометрии. Поэтому все основные параметры носителей заряда и их поведение закономерно изменяются при варьировании стехиометрии состава. Большая концентрация собственных дефектов, сравнимая с концентрацией основных носителей заряда, приводит к специфическим особенностям физических свойств. Увеличение концентрации электроотрицательных дефектов приводит к росту концентрации электронов, а также электропроводности *n*- Ag_2Te ; при этом уровень Ферми смещается в разрешенную энергетическую зону и наступает вырождение. При этом наоборот уменьшается, подвижность носителей заряда и термоэдс, изменяются ширина запрещенной зоны и эффективная масса носителей заряда на уровне Ферми. Степень дефектности количественно и качественно меняет характер зависимостей $\sigma(T)$ и $R(T)$ что подтверждается реализацией для Ag_2Te электронного фазового перехода типа упорядочения. Основной механизм рассеяния носителей заряда при низких температурах является на дефектах, а при высоких температурах- на тепловых колебаниях решетки.

Таким образом, с изменением концентрации дефектов существуют определенные и взаимосвязанные корреляции между кинетическими свойствами, зонной структурой и характером химической связи соединений Ag_2Te . Поведением $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ связаны положением атомов серебра в подрешетке элементарной ячейке. Таким образом, с помощью добавок серебра и теллура в Ag_2Te можно регулировать электрические и термоэлектрические свойства, что позволяет прогнозировать поведение носителей заряда в материалах электронной техники на основе теллуриде серебра.

Расчет эффективных парных потенциалов для системы железо-углерод

В.А. Старухин, А.А. Мирзоев

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

Сплавы на основе железа и углерода в современной промышленности имеют огромное практическое значение. Для предсказания свойств таких сплавов очень перспективным является метод компьютерного моделирования. Существует большое количество публикаций, посвященных полуэмпирическому моделированию сплавов железо-углерод. При этом наибольшим спросом в этой области пользуются эффективные потенциалы, задающие взаимодействие между атомами. Однако сама техника расчета такого потенциала пока не является законченной и однозначной.

В случае парных потенциалов известно, что существует взаимно-однозначная связь между структурой вещества и эффективным потенциалом. Это утверждение составляет теорему Хендерсона [1]. Поэтому, если научиться получать потенциал, опираясь на данные о структуре вещества, и при этом исключить неоднозначность, возникающую в ходе численного воспроизведения такого потенциала [2], то задача будет решена. В работе [3] мы предложили метод, позволяющий частично снимать такое вырождение, используя выводы работы [2]. Преимуществом предложенного метода является возможность получения потенциала, воспроизводящего с очень высокой точностью структуру исследуемой системы, а также плотность и, по крайней мере, еще один термодинамический параметр. Поэтому данный метод превосходит все известные схемы воспроизведения потенциала по данным структурного эксперимента, описанные в обзорной работе [4], поскольку дает согласие по структуре одновременно с еще несколькими термодинамическими характеристиками. И превосходит методы расчета эффективного потенциала, основанные на оптимизации по ряду необходимых физических свойств системы, поскольку относительно таких схем дает гораздо более высокое согласие по структуре вещества.

Для системы железо-углерод проблема состоит в отсутствии необходимых данных о структуре сплава. Поэтому адекватным решением является использование данных, получаемых методом первопринципной молекулярной динамики. В данной работе приводятся результаты расчета парных потенциалов для системы железо-углерод при температуре 1623 К, находящейся в жидком состоянии. Атомная концентрация углерода в модели составляла 19.5%. Необходимые структурные данные были взяты из работы [5]. Метод, предложенный в работе [3], позволил рассчитать эффективный парный потенциал для данной системы, воспроизводящий структуру вещества, а также плотность и коэффициент теплового объемного расширения. В следующей таблице приводятся расчетные значения атомной плотности n , коэффициентов диффузии D углерода и железа в растворе, потенциальной энергии системы U_{pot} и коэффициента теплового объемного расширения β в сравнении с экспериментом.

	$n, \text{\AA}^{-3}$	$D(C), 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$	$D(Fe), 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$	$U_{pot}, \text{ кДж/моль}$	$\beta, 10^{-5} \text{ К}^{-1}$
Эксперимент	0.0909 [6]	-	-	-	15.0 [7]
Расчет	0.0909 ± 0.0001	5.4 ± 0.2	4.2 ± 0.1	-125.5 ± 0.2	15.1 ± 0.2

1. Henderson R.L., Phys. Lett. A, **49**, 197, (1974)
2. Belashchenko D.K., Russian Journal of Physical Chemistry, **78**, 1621, (2004)
3. Старухин В.А., Белашенко Д.К., Мирзоев А.А., Воронцов А.Г., Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов», **1**, 23, (2011)
4. Toth G., J. Phys.: Condens. Matter, **19**, 1, (2007)
5. Соболев А.Н., Мирзоев А.А., Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов», **1**, 27, (2011)
6. Jimbo I., Cramb A.W., Metall. Trans. B, **24B**, 5, (1993)
7. Еланский Г.Н., Еланский Д.Г., Строение и свойства металлических расплавов. – М.: МГВМИ, (2006)

Магнитные свойства аморфных сплавов Al-Ni-Gd(Ho)

С.А. Упоров¹, Н.С. Упорова²

¹ *Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

² *Уральский государственный педагогический университет, Екатеринбург, Россия*

В работе проведены исследования магнитных свойств аморфных лент $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ и $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Ho}_6$ в широком интервале температур ($T = 4\text{-}900$ К) и магнитных полей до 30 кЭ. Низкотемпературные измерения выполнены на вибрационном магнитометре VSM CFS-9T Cryogenic Ltd, в диапазоне температур от 300 до 900 К исследования проведены на установке, работающей по методу Фарадея.

Для всех образцов аморфных лент температурные зависимости намагниченности, полученные при предварительном охлаждении в нулевом магнитном поле (ZFC) и в поле $H=500$ Э (FC), не выявили особенностей и гистерезиса свойства. Таким образом, следует, что эти объекты не претерпевают магнитного упорядочения при низких температурах вплоть до 4К. Однако при $T=4$ К зависимости намагниченности от напряженности магнитного поля $M(H)$ обладают существенной нелинейностью и не выходят на насыщение при полях в 30 кЭ, при этом $M(H)$ при $T>50$ К практически линейны. Зафиксированные особенности, скорее всего, свидетельствует о суперпарамагнитном характере поведения магнитных свойств этих объектов. Магнитная восприимчивость, рассчитанная из полученных данных, как $\chi = M/H$, для образцов $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Ho}_6$ пропорциональна $1/T$ т.е. следует классическому закону Кюри-Вейсса.

Измерения магнитной восприимчивости в области высоких температур до 900 К выявили, что зависимости $\chi(T)$ следуют закону Кюри-Вейсса во всем изученном температурном диапазоне. Для обоих исследованных объектов обнаружено, что в аморфном состоянии абсолютные значения магнитной восприимчивости выше на 5-7 %, чем в кристаллической фазе. При $T=580\text{-}585$ К зафиксирован гистерезис на температурных зависимостях восприимчивости для обеих аморфных лент, что соответствует началу процесса кристаллизации в этих материалах.

Определены параметры суперпарамагнитных включений, путем анализа изотерм намагниченности $M(H)$ при $T=4$ К функцией Ланжевена. Рассчитанные величины магнитных моментов m_c , приходящихся на суперпарамагнитные кластеры для обеих аморфных лент, имеют малые значения, $m_c = 4.1$ и 8.4 μ_B для $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Gd}_6$ и $\text{Al}_{86}\text{Ni}_8\text{Ho}_6$ соответственно. Подобный результат ранее был обнаружен авторами [1] на близких объектах. Небольшие величины m_c в изученных образцах лент могут быть обусловлены тем, что в суперпарамагнитных кластерах магнитные моменты гадолиния и никеля ориентированы антипараллельно. Антиферромагнитная связь между редкоземельными элементами и атомами никеля вполне ожидаема в алюминиевой матрице, т.к. известно, что ферромагнетизм является типичным для большинства бинарных, а также тройных соединений Gd-Ni, Ho-Ni и Gd-Ni-Al систем. Здесь также нужно отметить, что аппроксимация зависимостей $\chi(T)$ законом Кюри-Вейсса, дает отрицательные значения парамагнитной температуры Кюри в обеих конденсированных фазах, что указывает на антиферромагнитный обмен между «магнитными» атомами. Отсюда можно сделать вывод о том, что малые величины m_c , являются результатом компенсации магнитных моментов никеля и гадолиния, а не малости суперпарамагнитных кластеров. Таким образом, можно предположить, что сами кластеры являются достаточно крупными группировками, состоящими, не менее чем из нескольких десятков атомов.

Работа выполнена при финансовой поддержке УрО РАН (грант № 11-3-НП-226) и РФФИ (грант № 11-03-00469-а), с использованием оборудования центра коллективного пользования «УРАЛ-М» ИМЕТ УрО РАН.

1. Chrobak, B. Kotur, T. Mika, G. Haneczok, J. Mag. Mag. Mater. **321**, (2009).

Работа системы моделирования динамики макрообъектов на элементарном уровне с использованием высокопроизводительных вычислений на примере решения задач гидродинамики

Е.А. Шамо́в¹, А.Г. Шеин¹

¹ *Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия*

Компьютерное моделирование позволяет изучать сложные процессы, происходящие с макрообъектами, с высокой точностью, однако большинство методов используемые для моделирования динамики макрообъектов обладают весьма низкой точностью и большой вычислительной сложностью, тогда обычно применяют высокопроизводительные вычисления на кластерах, гридах и облаках. Однако подходы и методы, используемые для моделирования, оставляют желать лучшего, так как позволяют описать процессы, происходящие с макрообъектами, с большим набором допущений.

Рассмотрим небольшое направление по изучению динамики жидкости. Наиболее распространёнными при исследовании гидродинамики являются сеточные методы Эйлера, гидродинамика сглаженных частиц (smoothed particle hydrodynamics), методы, основанные на завихрениях, и метод решёточных уравнений Больцмана. Все эти методы используют различные подходы, но они не учитывают некоторые из таких макро эффектов, как турбулентность, вязкость, сжимаемость жидкости, волны давления внутри жидкости. Учет других более мелких и сложных эффектов естественно отсутствует, что отражает то, насколько модель далека от реальности. Также стоит отметить, что в макрообъектах число молекул может достигать 10^{30} и более. Численное моделирование такого количества объектов не возможно даже на мощнейших суперкомпьютерах мира.

Для решения данной проблемы был придуман и реализован метод миниатюризации пространства, при котором реальное пространство исследования заменяется моделью пространства наполненной «мини объектами», при этом линейные размеры пространства исследования уменьшаются до необходимого размера (необходимо, чтобы число «мини объектов» из которых оно состоит, было возможно моделировать за приемлемое время). Мини объекты – объекты, как правило, имеющие аналоги в реальном мире, которыми наполняется пространство исследования (в нашем случае молекулы). Также была создана специальная универсальная межмолекулярная структура для генерации корректной структуры вещества.

В области параллельного программирования в ходе исследования было придумано и модифицировано множество полезных методов касающихся оптимизации, надежности, точности моделирования. К примеру, был создан метод отсечения проверки не значимых взаимодействий, который позволяет свести проверку взаимодействия N объектов от N^2 проверок воздействий к $K*N$ проверкам, где $K \ll N$ (причем K не зависит от N). Что позволяет повысить количество молекул в модели на порядки.

В результате использования ряда методов, основными из которых являются метод моделирования динамики макрообъектов на молекулярном уровне, метод миниатюризации пространства и методы высокопроизводительных вычислений, стало возможным исследовать макрообъекты с высокой точностью за приемлемое время. При помощи созданной системы стало возможным исследовать гидродинамику с учетом макро эффектов турбулентности, вязкости, сжимаемости жидкости, движения слоев жидкости, волн давления внутри жидкости, разделения жидкости на части, также учета других более мелких и сложных эффектов.

1. Шамо́в Е.А. Проблемы, возникающие при моделировании динамики произвольных объектов на кластере центральных и графических процессорных устройств. // Барышникова С.С., Жариков Д.Н., Попов Д.С. – Пермь: Издательство ПГТУ, 2010.

Градиент поляризации в пьезоэлектрической керамике титаната-станната бария

О.В. Малышкина, М.С. Шапков

Тверской государственной университет, Тверь, Россия

В настоящее время значительный практический интерес представляют пьезокерамические преобразователи на основе изгибных колебаний, являющиеся элементами пассивных интеллектуальных конструкций, регистрирующих информацию о состоянии объекта. Как следует из общего теоретического рассмотрения, изгибные пьезоэлектрические колебания имеют место в материале, у которого пьезоэлектрические свойства изменяются по толщине образца независимо от того, создается ли градиент поляризации в образце непосредственно или за счет градиента других физических свойств [1,2]. В последнее время наблюдается тенденция к созданию градиентных функциональных материалов у которых концентрация химических составляющих изменяется непрерывно или пошагово по толщине образца. Примером такого материала является пьезокерамика на основе твердого раствора титаната-станната бария (BTS) [3]. Градиент пьезоэлектрических свойств в нем реализуется за счет слоев с разной концентрацией олова.

В работе проведен расчет распределения поляризации по толщине образцов функциональной керамики $BaTi_{1-x}Sn_xO_3$ (BTS) с градиентом олова с использованием значений остаточной поляризации, полученных по петлям диэлектрического гистерезиса однородных по химическому составу образцов ($x = 0,075; 0,1; 0,125$ и $0,15$). Измерения проводились при температуре $T=25^\circ\text{C}$. На рис.1а представлена зависимость остаточной поляризации от концентрации олова. Точками отмечены экспериментальные кривые, пунктирной прямой – экстраполяция с использованием линейной регрессии программы Mathcad. Профиль поляризации (рис.1б) восстанавливался путем объединения экспериментальных данных по распределению концентрации олова в четырехслойной керамике BTS [3] и рис.1а. Показано хорошее согласие профиля поляризации рассчитанного теоретически по петлям диэлектрического гистерезиса и полученного из анализа пиротклика TSW методом [4].

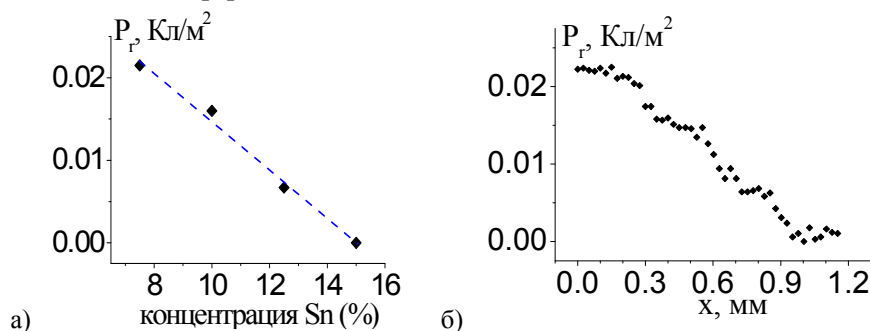


Рис. 1 Зависимость остаточной поляризации, измеренной по петле диэлектрического гистерезиса, от концентрации олова (а) и профиль поляризации четырехслойного образца, рассчитанный по значениям остаточной поляризации (б) керамики BTS, при $T=25^\circ\text{C}$.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы.

1. S. Zhong, Z.-G. Ban, S. P. Alpay, J. V. Mantese. Appl. Phys. Lett. **89**, 142913 (2006).
2. Z.-G. Ban, S. P. Alpay, J. V. Mantese. Phys. Rev. B. **67**, 184104 (2003).
3. R. Steinhausen, C. Pientzsche, A.Z. Kuvatov, H.T. Langhammer, H. Beige, A.A. Movchikova, O.V. Malyschkina. J. Electroceram. **20**, 47 (2008).
4. О.В. Малышкина, А.А. Мовчикова, К.Н. Пензов, R. Steinhausen, H.T. Langhammer, H. Beige. Изв. РАН. Серия Физическая. **74**, 1337 (2010).

Лекция

Эффект Кондо в наноструктурах и сильно-коррелированных системах

М. Киселев

International centre for theoretical physics, Trieste, Italy

Учебная лекция посвящена обзору ключевых экспериментов по транспортным свойствам немагнитных металлов (Au, Ag, Cu), легированных магнитными примесями (Fe, Mn, Cr, Co, Ce), а также теоретическому объяснению наблюдаемой аномалии в сопротивлении (эффект Кондо). По теории возмущений будет рассмотрено простое решение, отвечающее первой поправке к обратному транспортному времени рассеяния по константе спинового обмена (предел слабой связи, реализуемый при высоких температурах). Режим сильной связи (низкие температуры) обсуждается в рамках феноменологической теории Ферми-жидкости. На наглядных примерах будет предложена простая физическая интерпретация наблюдаемой аномалии в сопротивлении, а также эффекты спиновой экранировки, коренным образом меняющие свойства намагниченности и восприимчивости Кондо-систем. На примерах сильно-коррелированных систем (тяжелые фермионы) дано объяснение природы резонанса Абрикосова-Сула, а также наличия однопараметрической масштабной инвариантности (скейлинга) задачи Кондо.

В последние годы быстрое развитие нанотехнологий сделало возможным не только наблюдение эффекта Кондо, но и его контролируемое применение в спинтронике ("одноэлектронный транзистор"). Роль квантовых примесей с резонансным рассеянием, зависящим от спина примесного атома, в данных системах играют квантовые точки - "искусственные атомы" содержащие малое количество электронов, локализованных во внешнем потенциале (Кулоновская блокада). Поведение таких атомов существенно отличается при четном и нечетном количестве электронов. В частности, эффект Кондо возникает при нечетном заполнении и проявляется в росте кондактанса при понижении температуры. Экзотические модификации эффекта Кондо, например, Кондо-аномалии в квантовом транспорте через двойную квантовую точку, молекулярный транзистор или наноэлектромеханический резонатор служат подтверждением возможности тонкой подстройки параметров модели в рамках экспериментов с наноструктурами и возможность контролируемого использования резонансных эффектов в полупроводниковых устройствах.

Список участников школы

ФИО	Место работы/ учебы	e-mail	стр.
Dubrovinskaia Natalia	University of Bayreuth	Natalia.Dubrovinskaia@uni-bayreuth.de	20
Dubrovinsky Leonid	University of Bayreuth	Leonid.Dubrovinsky@uni-bayreuth.de	20
Gukasov Arsen	LLB	arsen.goukassov@cea.fr	22
Smekhova Alevtina	МГУ им. М.В. Ломоносова	smeal@physics.msu.ru	36
Абасзаде Рашад Габил оглы	НАНА	Abaszade@rambler.ru	82
Абубакаров Абу Геланиевич	НИИФ ЮФУ	fallenart@bk.ru	134
Абуова Айсулу Усенова	АГУ	aisulu_us@mail.ru	135
Абуова Фатима Усенова	ЕНУ им Л.Н.Гумилева	Fatika_82@mail.ru	135
Авакян Леон Александрович	ЮФУ	lavakyan@rambler.ru	64
Авдеев Михаил Васильевич	ОИЯИ	avd@nf.jinr.ru	25
Аксенов Виктор Лазаревич	НИЦ "Курчатовский институт"	aksenov@rrcki.ru	
Аксенов Сергей Николаевич	ИЯИ РАН	serg.asd@rambler.ru	
Алешников Александр Александрович	ВГТУ	A.A.Aleshnikov@mail.ru	83
Алисултанов Заур Замирович	ИОФ им. А.М. Прохорова РАН	zaur0102@gmail.com	84
Амренова Асем Уахитовна	КазНУ им. аль-Фараби	amrenova_assem@mail.ru	
Андреев Всеволод Владимирович	ФГБОУ ВПО "ЧГУ имени И.Н. Ульянова"	andreev_vsevolod@mail.ru	85
Андроникова Дарья Александровна	СПбГПУ	r-r-r-@mail.ru	39
Андрюшкин Константин Петрович	НИИФ ЮФУ	vortexblow@gmail.com	40
Арефьев Михаил Игоревич	СПбГУ	arefievm@mail.ru	86
Аристов Дмитрий Николаевич	ФГБУ "ПИЯФ"	aristov@thd.pnpi.spb.ru	14
Арифуллин Марсель Равшанович	ОГУ	arifullinm@mail.ru	27
Астрцов Артем Александрович	СПбАУ и НОЦ ИТ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН	a.a.astretsov@gmail.com	87
Баймуратов Анвар Саматович	НИУ ИТМО	baimuratov.anvar@gmail.com	88
Батурин Владимир Сергеевич	ИОФАН	baturin@lpi.ru	89
Белобров Петр Иванович	СФУ, Институт биофизики СО РАН	peter.belobrov@gmail.com	

Белушкин Александр Владиславович	ОИЯИ	belushk@nf.jinr.ru	21
Бельтюков Ярослав Михайлович	СПбГПУ	ybeltukov@gmail.com	41
Белякова Наталья Сергеевна	СПбГПУ	pro100pro100@rambler.ru	
Боднарчук Виктория Викторовна	ИК РАН	deuten_wink@mail.ru	
Боднарчук Ядвига Викторовна	ИК РАН	deuten@mail.ru	
Бойко Михаил Евгеньевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	m.e.boiko@mail.ioffe.ru	65
Бондарев Алексей Владимирович	ВГТУ	bondarev_a_v@mail.ru	28
Бондаренко Виктория Петровна	СПбГУ	lotos_77@bk.ru	
Борисов Сергей Аркадьевич	ФГБУ "ПИЯФ"	sborisov@pnpi.spb.ru	
Борисова Полина Алексеевна	НИЦ "Курчатовский институт"	borisovapa@mail.ru	90
Босак Алексей Алексеевич	ESRF	bossak@esrf.fr	18
Быстрова Анна Владимировна	ИТЭБ	aniria2003@mail.ru	91
Валиев Дамир Тагатович	ТПУ	dtdamir@sibmail.com	
Васильева Людмила Анатольевна	ФГБОУ ВПО "ЧГУ им. И.Н. Ульянова"	ask_lyuda@mail.ru	92
Васильева Ниёле Станиславовна	ПетрГУ	nielik@mail.ru	66
Васин Михаил Геннадьевич	ФТИ УрО РАН	dr_vasin@mail.ru	42
Васин Роман Николаевич	ОИЯИ	olddragon@mail.ru	67
Величко Евгений Владимирович	ФГБУ "ПИЯФ"	vasia171@yandex.ru	68
Вербенко Илья Александрович	НИИФ ЮФУ	ilich001@yandex.ru	43
Волков Василий Владимирович	ФГБОУ ВПО "СамГУ"	volvvv@mail.ru	69
Вомпе Татьяна Алексеевна	ИМЕТ РАН	tvompe@gmail.com	93
Воробьев Алексей Александрович	ESRF	vorobiev@esrf.fr	
Воронин Владимир Владимирович	ФГБУ "ПИЯФ"	vvv@pnpi.spb.ru	26
Габдуллина Асылгуль	КазНУ им. аль-Фараби	a_gabdullina@mail.ru	
Габышев Дмитрий Николаевич	ТюмГУ	gabyshev-dmitrij@rambler.ru	136
Гаврилов Сергей Викторович	ФГБУ "ПИЯФ"	gavrilov@pnpi.spb.ru	
Галимзянов Руслан Равильевич	НИТУ МИСиС	gal_ruslan@yahoo.com	

Гарипова Гузель Миннизиевна	ФГБОУ ВПО СГПА	goldberg144@gmail.com	137
Гинзбург Саул Лейбович	ФГБУ "ПИЯФ"	ginzbsl@mail.ru	
Голосовский Игорь Викторович	ФГБУ "ПИЯФ"	golosov@mail.pnpi.spb.ru	
Горьков Дмитрий Владимирович	Ruhr Universität Bochum	dmitry.gorkov@rub.de	
Гощицкий Юорис Николаевич	ИФМ УрО РАН	bng@imp.uran.ru	
Григорьев Сергей Валентинович	ФГБУ "ПИЯФ"	grigor@lns.pnpi.spb.ru	
Григорьева Наталья Анатольевна	СПбГУ	natali@lns.pnpi.spb.ru	
Григорькин Алексей Александрович	ФГБУ "ПИЯФ"	ale-grig@yandex.ru	29
Губанова Надежда Николаевна	ФГБУ "ПИЯФ"	gubnn@lns.pnpi.spb.ru	
Гусейнов Гусейн Джалил	Институт Физики НАН РА	huseyn-1978@mail.ru	138
Дамбуева Альбина Борисовна	БГУ	abain76@list.ru	
Данг Нгок Тоан	ОИЯИ	dangtoan2107@jinr.ru	44
Данилов Сергей Владимирович	ПетрГУ	sdanilov@psu.karelia.ru	94
Деменцова Ирина Владиславовна	МГУ им. М.В. Ломоносова	demencova_i@mail.ru	139
Джабаров Сакин Гамид оглы	ОИЯИ	sakin@jinr.ru	45
Джафаров Рагим Малик оглы	НГУ	Raqim-1981@mail.ru	95
Дикусар Василий Васильевич	ВЦ РАН	dazzle@ropnet.ru	140
Дмитриев Алексей Иванович	ИПХФ РАН	aid@icp.ac.ru	96
Дмитриев Владимир Петрович	ESRF	dmitriev@esrf.fr	9
Дмитриенко Владимир Евгеньевич	Институт кристаллографии РАН	dmitrien@crys.ras.ru	6,19
Драбкин Гильяри Моисеевич	ФГБУ "ПИЯФ"	okorokov@pnpi.spb.ru	
Дубицкий Илья Семенович	СПбГУ	32167i@mail.ru	30
Дядькин Вадим Александрович	ФГБУ "ПИЯФ"	dyadkin@lns.pnpi.spb.ru	
Дядькина Екатерина Анатольевна	ФГБУ "ПИЯФ"	katy@lns.pnpi.spb.ru	
Евстигнеева Надежда Викторовна	Новгу им.Ярослава Мудрого	Nadya1203.89@mail.ru	
Ежов Виктор Федорович	ФГБУ "ПИЯФ"	ezhov@pnpi.spb.ru	
Екимова Татьяна Анатольевна	ПетрГУ	dery77@mail.ru	

Екомасов Андрей	БашГУ	fean0r0@mail.ru	
Елисеев Андрей Анатольевич	МГУ им. М.В.Ломоносова	eliseev@inorg.chem.msu.ru	
Жанботин Арман Жексембайвич	ИЯФ НЯЦ РК	g.armani@mail.ru	141
Жогин Иван Львович	ИХТТМ СО РАН	zhogin@mail.ru	31,70
Забенкин Владимир Николаевич	ФГБУ "ПИЯФ"	zabenkin@pnpi.spb.ru	
Зайцева Наталья Игоревна	СПбГУ	natashazaitseva@yandex.ru	97
Залуцкий Александр Альбертович	ЯГТУ	zalutskii@mail.ru	
Зель Иван Юрьевич	ОИЯИ	ivangreat2009@gmail.com	
Зобкало Игорь Александрович	ФГБУ "ПИЯФ"	zobkalo@pnpi.spb.ru	
Зубавичус Ян Витаутасович	НИЦ "Курчатовский институт"	yzubav@gmail.com	11
Иванов Владимир Константинович	ИОНХ РАН	van@igic.ras.ru	
Иванов Дмитрий Иванович	СФУ	idi86@inbox.ru	
Иванова Анна Александровна	НИ ТПУ	metallurg_annet@mail.ru	
Иванова Наталья Анатольевна	НИЯУ (МИФИ)	uran-o2@yandex.ru	98
Иванова Ольга Сергеевна	ИОНХ РАН	runetta05@mail.ru	99
Иванчик Александр Владимирович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	iav@astro.ioffe.ru	5
Иваньков Олександр Игоревич	ОИЯИ	ivankov@jinr.ru	46
Ивашеская Светлана Николаевна	Институт геологии КарНЦ РАН	ivashevskaja@yahoo.com	71
Ильин Дмитрий Сергеевич	ФГБУ "ПИЯФ"	digatchi@list.ru	
Казимиров Вячеслав Юрьевич	ОИЯИ	vkazimir@yahoo.com	
Канюкаева Рамиля Рафаильевна	СГУ	Ramilush@mail.ru	
Каплунова Елена Ивановна	ТьГУ	lenaaa555@mail.ru	100
Кассан-Оглы Феликс Александрович	ИФМ УрО РАН	felix.kassan-ogly@imp.uran.ru	142
Киселев Игорь Анатольевич	ФГБУ "ПИЯФ"	kisselev@omrb.pnpi.spb.ru	
Киселев Михаил	ИСТР	mkiselev@ictp.it	154
Клементьев Евгений Станиславович	ИЯИ РАН	clement@inr.ru	23
Клюева Мария Вячеславовна	НИТУ МИСиС	mariya.v.klyueva@gmail.com	101
Кобьянская Екатерина Геннадьевна	ФГБУ "ПИЯФ"	cathie@lns.pnpi.spb.ru	

Коваленко Екатерина	НИЦ "Курчатовский институт"	kovalenko_es@mail.ru	72
Ковалькова Надежда Андреевна	ДВФУ	chess--15@mail.ru	143
Козинкина Елена Александровна	ЮФУ	y_kozinkina@mail.ru	
Козлов Владислав Евгеньевич	ИФТТ РАН	vlad.kv.2002@gmail.com	
Кондратьева Анна Андреевна	ДВФУ	roker-13@mail.ru	144
Коновалов Олег Вениаминович	ESRF	konovalo@esrf.fr	7
Копица Геннадий Петрович	ФГБУ "ПИЯФ"	kopitsa@pnpi.spb.ru	
Коплак Оксана	НОЦ ФХМ КНУ и НАН Украины	o.koplak@gmail.com	32
Кошкидько Юрий Сергеевич	ТвГУ	yurec@mail.ru	
Крутикова Екатерина Владимировна	УрФУ	Ekaterina.Krutikova@usu.ru	102
Крючкова Дина Михайловна	ОИЯИ	din-din-86@mail.ru	
Кудряшев Валерий Алексеевич	ФГБУ "ПИЯФ"	vkudryashov@pnpi.spb.ru	
Кулик Наталья Владимировна	КарНЦ РАН	nadiet11@rambler.ru	103
Курбаков Александр Иванович	ФГБУ ПИЯФ	kurbakov@pnpi.spb.ru	
Кутовая Полина Ивановна	НАН Украины	kutpolina@gmail.com	
Кушнир Сергей Евгеньевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	kushnirsergey@gmail.com	104
Лазута Александр Васильевич	ФГБУ "ПИЯФ"	alexandr@VL9467.spb.edu	
Ларионова Настасья Сергеевна	ФТИ УрО РАН	Nastasya2601@mail.ru	105
Леонидов Иван	ИХТТ	ivanleonidov@ihim.uran.ru	
Леонов Михаил Юрьевич	НИУ ИТМО	m.yu.leonov@gmail.com	106
Леонтьев Игорь Николаевич	ЮФУ	i.leontiev@rambler.ru	107
Лепешкин Сергей Владимирович	ФИАН	lepehkin@lpi.ru	47
Литвин Василий Сергеевич	ИЯИ РАН	vlitvin@inr.ru	
Логинов Дмитрий Владимирович	ПетрГУ	logindm@mail.ru	73
Ломаев Степан Леонидович	Физико-технический институт УрО РАН	lomayevst@bk.ru	
Лошак Наталия Васильевна	ОИЯИ	natalialoshak@gmail.com	48
Лысова Ирина Владимировна	ЧГПУ им. И.Я. Яковлева	arinia@mail.ru	108
Львов Дмитрий Владимирович	ГНЦ РФ ИТЭФ	lvov@itep.ru	74

Максимов Вениамин Игоревич	Институт физики металлов УрО РАН	kokailo@rambler.ru	75
Малеев Сергей Владимирович	ФГБУ "ПИЯФ"	maleyevsv@mail.ru	13
Марчевский Андрей Викторович	ИОНХ РАН	a-marchevsky@yandex.ru	
Матасов Максим Дмитриевич	СГУ	pooryork86@gmail.com	
Матвеев Василий Александрович	ФГБУ "ПИЯФ"	matveev@lns.pnpi.spb.ru	109
Махмудов Хайрулло Файзуллаевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	h.machmoudov@mail.ioffe.ru	76
Мацко Никита Леонидович	ФИАН	matsko@lpi.ru	49
Машенко Матвей Сергеевич	ОИЯИ	matvej.mashenko@gmail.com	
Медведев Михаил Владимирович	Институт электрофизики УрО РАН	medvedev@iep.uran.ru	33
Меньшикова Светлана Геннадьевна	ФТИ УрО РАН	svetlmensh@mail.ru	
Миллер Александр Иванович	НИИФ ЮФУ	milleriada@mail.ru	50
Мистонов Александр Андреевич	СПбГУ	mistonov@lns.pnpi.spb.ru	110
Михайловская Зоя Алексеевна	УрФУ	zozoikina@mail.ru	77
Могилук Тарас Игоревич	НИЦ "Курчатовский институт"	5taras@mail.ru	145
Морозов Максим Сергеевич	СГУ	maxymor@mail.ru	
Москвин Евгений	ФГБУ "ПИЯФ"	mosqueen@pnpi.spb.ru	
Муругова Татьяна Николаевна	ОИЯИ	murugova@jinr.ru	111
Мушенок Федор Борисович	ИПХФ РАН	mushenokf@gmail.com	51
Набережнов Александр Алексеевич	ФТИ им. Иоффе РАН	alex.nabereznov@mail.ioffe.ru	
Накин Андрей Валерьевич	ФГБУ "ПИЯФ"	andrey.nakin@gmail.com	
Напольский Кирилл Сергеевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	knapolsky@gmail.com	112
Никифорова Дина Константиновна	УГНТУ	dinan.88@mail.ru	
Нухов Азим Кадимович	ДГУ	abduazim1@mail.ru	113
Окороков Алексей Иванович	ФГБУ "ПИЯФ"	okorokov@pnpi.spb.ru	
Орешко Алексей Павлович	МГУ им. М.В. Ломоносова	oreshko@mail.ru	78
Осинская Юлия Владимировна	СГУ	ojv@ssu.samara.ru	52
Павелко Алексей Александрович	НИИФ ЮФУ	dipoleglass@gmail.com	53

Павленко Анатолий Владимирович	НИИФ ЮФУ	tolik_260686@mail.ru	54
Павлов Никита Сергеевич	Институт электрофизики УрО РАН	pavlovns@gmail.com	34
Парамонова Екатерина Владимировна	ИМПБ РАН	ekatp@yandex.ru	114
Петров Сергей Николаевич	СПбГУ	sergeypspb@mail.ru	115
Петров Сергей Степанович	СГУ	serpet1@yandex.ru	52
Петрунин Анатолий Алексеевич	ФГБУ "ПИЯФ"	petrunin@pnpi.spb.ru	
Пивоварова Юлия Владимировна	ФТИ им. Иоффе РАН	juliapivovarova_@mail.ru	
Пикин Сергей Алексеевич	Институт кристаллографии РАН	pikin@crys.ras.ru	16
Пиядов Василий	ФГБУ "ПИЯФ"	piyadov@lns.pnpi.spb.ru	
Покоев Александр Владимирович	СГУ	pokoev@ssu.samara.ru	52
Пономарева Алина Александровна	ЛЭТИ	ap_k@inbox.ru	
Попова Елена Алексеевна	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	elena.popova566@gmail.com	146
Попова Светлана Владимировна	УГНТУ	svetpv2007@ya.ru	
Посадова Елена Максимова	ТвГУ	milkiwayka@gmail.com	
Потапова Надежда Михайловна	ФГБУ "ПИЯФ"	potapova@lns.pnpi.spb.ru	
Проскурина Екатерина Павловна	УрГУ	EPBarakovskaya@yandex.ru	
Прошкин Алексей Игоревич	ИФМ УрО РАН	al.pro@list.ru	35
Пряничников Степан Викторович	Институт металлургии УрО РАН	stepian@yandex.ru	
Редьков Алексей Викторович	СПбГПУ	red-alex@mail.ru	
Родионов Игорь	МГУ им. М.В. Ломоносова		
Рунов Владимир Владимирович	ФГБУ "ПИЯФ"	runov@pnpi.spb.ru	
Рунова Маина Константиновна	ФГБУ "ПИЯФ"	runova@pnpi.spb.ru	
Русакова Алена	ИЯФ НЯЦ РК	arussakova@gmail.com	147
Руцкая Викотрия Владимировна	СПб АУ НОЦНТ РАН	rutskaj@mail.ru	116
Рябова Наталия Юрьевна	ОИЯИ	rny03@nf.jinr.ru	79
Савицкая Наталья Евгеньевна	ФГБУ "ПИЯФ"	savitska@inbox.ru	17
Садьков Хизир Амирович	НИИФ ЮФУ	orthoferrite@gmail.com	55
Самойленко Сергей Александрович	ОИЯИ	samoilenko_pp@mail.ru	117

Саполетова Нина Александровна	ФНМ МГУ	nsapoletova@gmail.com	118
Северюхин Юрий Сергеевич	ОИЯИ	yucucumber@mail.ru	
Сидорова Ольга Владимировна	ПетрГУ	solvak@yandex.ru	
Сизанов Алексей Владимирович	ФГБУ "ПИЯФ"	alexey.sizanov@gmail.com	
Сийдра Олег Иоханнесович	СПбГУ	siidra@mail.ru	
Сиколенко Вадим Витальевич	ОИЯИ	vadim.sikolenko@jinr.ru	56
Сметюхова Татьяна Николаевна	НИТУ МИСиС	smetyukhova.t.n@yandex.ru	119
Снигирев Анатолий	ESRF	snigirev@esrf.fr	
Солдатов Александр Владимирович	ЮФУ	soldatov@sfedu.ru	8
Соловьев Александр Николаевич	НовГУ им. Ярослава Мудрого	cah.zuljin@gmail.com	80
Соловьев Дмитрий Владимирович	ОИЯИ	DimkaupmL@gmail.com	
Соловьев Иван Николаевич	НовГУ им. Ярослава Мудрого	ivan.solessi@gmail.com	148
Сорокин Александр Олегович	ФГБУ "ПИЯФ"	aosorokin@gmail.com	57
Сохбатов Елнур Вакил	Гянджинский Государственный Университет	esohbetov@mail.ru	149
Старовойтов Антон Андреевич	НИУ ИТМО	anton.starovoytov@gmail.com	120
Старухин Виктор Андреевич	ЮУрГУ	victor_staruhin@mail.ru	150
Степанов Антон Викторович	ЧГПУ им. И.Я. Яковлева	for.antonstep@gmail.com	121
Столяров Андрей Андреевич	МГУ им. М.В. Ломоносова	feryazkino@rambler.ru	
Строков Сергей Владимирович	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	s.strocov@gmail.com	58
Сыромятников Арсений Владиславович	ФГБУ "ПИЯФ"	asyromyatnikov@yandex.ru	
Сыромятников Владислав Генрихович	ФГБУ "ПИЯФ"	svg@pnpi.spb.ru	
Таланов Михаил Валерьевич	ЮФУ	tmikle-man@mail.ru	59
Тарнавич Владислав Валерьевич	ФГБУ "ПИЯФ"	tarnavich@lns.pnpi.spb.ru	37
Таровик Эрнест Григорьевич	ФГБУ "ПИЯФ"	yurka@lns.pnpi.spb.ru	
Ташпулатов Тимур Рустамович	НИТУ МИСиС	planque@rambler.ru	
Тен Константин Алексеевич	Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН	ten@hydro.nsc.ru	122

Тимченко Николай Алексеевич	НИ ТПУ	timchenko@tpu.ru	
Титенкова Анна Васильевна	СГУ	titenkova-anna@mail.ru	
Ткаленко Дарья Сергеевна	ОИЯИ	1987dashulik@mail.ru	
Толстых Никита Александрович	ВГТУ	mad_nik@bk.ru	
Томчук Александр Васильевич	ОИЯИ	tomchuk@jinr.ru	123
Топерверг Борис Павлович	ФГБУ "ПИЯФ"	boristop@thd.pnpi.spb.ru	24
Торопов Никита Александрович	НИУ ИТМО	NikitaTor@gmail.com	124
Тропин Тимур Васильевич	ОИЯИ	ttv@nf.jinr.ru	15
Трунов Дмитрий Николаевич	ИЯИ РАН	redmitr@yandex.ru	
Труханов Алексей Валентинович	Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению	truhanov86@mail.ru	60
Турков Вадим Константинович	НИУ ИТМО	vadim.turkov@gmail.com	
Тюлюсов Антон Николаевич	ГНЦ РФ ИТЭФ	tyulyusov@itep.ru	
Тюняев Андрей Александрович	ВЦ РАН	dazzle@ropnet.ru	140
Уклеев Виктор Алексеевич	СПб АУ НОЦНТ РАН	ukleev@lns.pnpi.spb.ru	125
Ульянов Владимир Александрович	ФГБУ "ПИЯФ"	ulyanov@pnpi.spb.ru	
Упоров Сергей Александрович	Институт металлургии УрО РАН	segga@bk.ru	151
Упорова Наталья Сергеевна	УрГПУ	fominans@rambler.ru	
Усков Артем Васильевич	ВГТУ	a_uskov@mail.ru	
Утесов Олег Игоревич	СПб АУ НОЦНТ РАН	utiosov@gmail.com	
Фальковский Леонид Александрович	ИТФ им. Ландау РАН	falk@itp.ac.ru	4
Фёдорова Анна Александровна	МГУ им. М.В. Ломоносова	fedorova@inorg.chem.msu.ru	126
Федотов Андрей Александрович	СГУ	andrew.f.box@mail.ru	61
Хайрулин Марат Фаизович	МГУ им. М.В. Ломоносова	khajrullin@gmail.com	139
Хамова Татьяна Владимировна	ИХС РАН	LTPP@rambler.ru	127
Хоменко Любовь Григорьевна	ПНПУ им. В.Г.Короленка	ljudv.dzjuba@rambler.ru	
Цвященко Анатолий Васильевич	ИФВД РАН	tsvyash@hppi.troitsk.ru	62
Чернышов Дмитрий Юрьевич	SNBL at ESRF	dmitry.chernyshov@esrf.fr	10

Черняк Кирилл Григорьевич	СПбГУ	studphys@yandex.ru	
Чиглинцева Ангелина Сергеевна	БирГСПА	changelina@rambler.ru	
Чижиков Вячеслав Анатольевич	Институт кристаллографии РАН	chizhikov@ns.crys.ras.ru	38
Чувашова Ирина Геннадьевна	МГУ им. М.В. Ломоносова	irina.chuvashova@gmail.com	128
Чумаков Андрей Петрович	ФГБУ "ПИЯФ"	chumakov@lns.pnpi.spb.ru	129
Чумакова Александра Владимировна	ФГБУ "ПИЯФ"	vasilieva@lns.pnpi.spb.ru	130
Шамов Евгений Александрович	ВолгГТУ	neuro_mind@mail.ru	152
Шарко Сергей Александрович	ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению"	sharko@physics.by	131
Шарков Михаил Дмитриевич	ФТИ им. А.Ф. Иоффе	mischar@mail.ioffe.ru	132
Шашков Максим Сергеевич	ТвГУ	Luparb@yandex.ru	153
Швецова Наталья Юрьевна	ФГБУ "ПИЯФ"	nafanya_9888@mail.ru	
Шеврев Станислав Геннадьевич	ОИЯИ	fontorque@mail.ru	
Шестаков Александр Евгеньевич	РФЯЦ-ВНИИТФ	a.e.shestakov@list.ru	81
Шнайдер Анна Александровна	НовГУ	schneider@mail.natm.ru	63
Шустова Оксана Валерьевна	СПбГПУ	haveforgotten@yandex.ru	
Яковенко Екатерина Владимировна	НИЦ "Курчатовский институт"	eyakovenko@list.ru	12
Якунина Елена Михайлона	ИФМ УрО РАН	eyakuninaart@gmail.com	133
Япрынцев Алексей Дмитриевич	МГУ им. М.В.Ломоносова	yaprynsev@mail.ru	