

2. Теория твердого тела

Берилло Антон Владимирович, 5 курс

Кемеровский Государственный Университет, физический

Электронное строение галогенидов серебра

Научный руководитель: Журавлев Юрий Николаевич, к. ф. - м. н., Декан, Кемеровский Государственный Университет

Адрес: 650066 г. Кемерово ул. Спортивная д. 18А кв. 89

Телефон: 384 -2 35-39-11

E-Mail: sevostyanov@phys.kemsu.ru стр. 99

Векессер Наталья Александровна, аспирант

Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический

Плазмоны в карбине

Научный руководитель: Байтингер Е.М., д. ф. - м. н., профессор, кафедра общей и теоретической физики ЧГПУ

Адрес: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 69

Телефон: (8-3512) 65-09-24

E-Mail: wekesser@cspi.urfu.ac.ru стр. 100

Виноградов Василий Владимирович, магистрант 2-ого года обучения

Таганрогский Государственный Радиотехнический Университет, Электроники и приборостроения

Исследование электронного энергетического спектра дислокационного кремния

Научный руководитель: Колпачев Алексей Борисович, к. ф. - м. н., доцент, кафедра физики ТРТУ

Адрес: 347904, Россия, г. Таганрог, ул. Фрунзе, 79/4, кв. 8

Телефон: /86344/ 5-74-67

E-Mail: basil777@mail.ru стр. 101

Ефимова Ирина Евгеньевна, 5 курс

Сибирский Государственный Индустриальный Университет, Технологический

Модель изменения скорости ультразвука в материале с усталостными дефектами

Научный руководитель: Громов Виктор Евгеньевич, д. ф. - м. н., зав. каф. физики, Сибирский государственный индустриальный университет

Адрес: 654007, Новокузнецк, ул. Кирова, 42

Телефон: (3843) 78-43-67

E-Mail: step@sibgiu.kemerovo.su стр. 103

Задорожный Вячеслав Викторович, аспирант

Воронежский Государственный Университет, физический

Влияние давления на электронную структуру тонкой пленки $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$

Научный руководитель: Дубровский О.И., к. ф. - м. н., доцент, ВГУ

Адрес: 394693 г. Воронеж Университетская пл. 1 ВГУ

E-Mail: phssd18@main.vsu.ru стр. 105

Иванов Денис Александрович, 4 курс

Витебский Государственный Университет, физический

Исследование фазовых переходов в спин-фононных системах

Научный руководитель: Буйнов Николай Сергеевич, к. ф. - м. н., Доцент, Витебский государственный университет
Адрес: 210038, пр-т.Победы, 12-37.
Телефон: (375212)63-61-44
E-Mail: buinov@mail.ru стр. 108

Иванов Павел Сергеевич, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, Физический
Электронная структура галогенидов таллия
Научный руководитель: Журавлев Ю.Н, к. ф. - м. н., Декан, КемГУ, Декан
Адрес: 650070 г.Кемерово.ул.Свободы д.27б кв13
Телефон: 384-2 379283
E-Mail: sevostynov@phys.kemsu.ru стр. 110

Кашежев Аслан Зарифович, 1 курс магистратуры
Кабардино-Балкарский Государственный Университет, физический
Влияние электрического поля на анизотропию поверхностной энергии сплавов щелочных металлов
Научный руководитель: Созаев В.А., д. ф. - м. н., профессор, КБГУ
Адрес: 360000, КБР, г. Нальчик, ул. Пушкина 29/17
Телефон: (8662) 441747
E-Mail: Lion_kashezh@rambler.ru стр. 111

Клиндухов Николай Александрович, 5 курс
Витебский Государственный Университет, физический
Исследование влияния внешних воздействий на сегнетоэлектрики типа порядок беспорядок
Научный руководитель: Буинов Николай Сергеевич, к. ф. - м. н., доцент, Витебский Государственный Университет
Адрес: 210015, Беларусь, Витебск, ул. Леонова д.1
Телефон: (375212)37-47-47
E-Mail: buin@mail.ru стр. 112

Козорезова Валерия Вячеславовна, 2 курс аспирантуры
Ростовский Государственный Университет, физический
Моделирование строения и анализ рентгеновского спектра поглощения Eu@C60
Научный руководитель: Солдатов Александр Владимирович, д. ф. - м. н., профессор, Физ. факультет РГУ
Адрес: 344090 Ростов-на-Дону, ул. Зорге 28/2
E-Mail: Zulkarneev@mail.ru стр. 114

Козырев Владимир Эдуардович, 2 курс магистратуры
Ростовский Государственный Университет, физический
Теория динамического рассеяния рентгеновского излучения в околороговой области спектра
Научный руководитель: Ведринский Ростислав Викторович, д. ф. - м. н., профессор, Ростовский Государственный Университет
Адрес: 344038 г. Ростов -на-Дону, ул. Погодина, д.3, кв. 18
Телефон: (8632)454944
E-Mail: kv@aaanet.ru стр. 116

Колотева Наталья Александровна, 5 курс, магистрант

Волгоградский Государственный Педагогический Университет, Физический

Особенности светозлектрического эффекта в квантовом цилиндре.

Научный руководитель: Сыродоев Г.А., к. ф. - м. н., доцент, ВГПУ, кафедра общей физики

Адрес: 400013, Волгоград, пр. Ленина, 27

E-Mail: belgen@avtlg.ru стр. 118

Коршунов Максим Михайлович, аспирант

Институт Физики СО РАН, лаборатория Физики Магнитных Явлений

Электронные свойства синглет-триплетной модели

Научный руководитель: нет, нет, нет, нет

Адрес: 660049, г.Красноярск, ул. Маркса, д.88, кв. 42

Телефон: (3912)271708

E-Mail: lambda-soft@narod.ru стр. 119

Кособуцкий Алексей Владимирович, 5 курс

Кемеровский Государственный Университет, физический

Электрон-фононное взаимодействие в кристалле NaClO₄

Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф. - м. н., зав. кафедрой теор.

физики КГУ, Кемеровский государственный университет

Адрес: 650036, г. Кемерово, ул.Терешковой, д. 25а, кв. 96

Телефон: 35-44-06

E-Mail: sevostyanov@phys.kemsu.ru стр. 121

Кравченко Наталья Гергиевна, аспирант 3-го года обучения

Кемеровский Государственный Университет, физический

Расчет электронной структуры продуктов разложения солей нитратов щелочных металлов.

Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф. - м. н., зав. каф. теор.физики,

КемГУ, каф. теор.физики

Адрес: 650066 г. Кемерово пр. Октябрьский д. 20Б кв. 33

Телефон: (384)52-07-11

E-Mail: nshome@mail.ru стр. 123

Левицкая Елена Владимировна, 5 курс

Воронежский Государственный Университет, физический

Поверхность Ферми и электрофизические характеристики MoSi₂

Научный руководитель: Курганский Сергей Иванович, д. ф. - м. н., профессор, Воронежский государственный университет

Адрес: 394693 Воронеж, Университетская пл., 1

Телефон: (0732)789-363

E-Mail: phssd18@main.vsu.ru стр. 124

Мазниченко Игорь Владимирович, аспирант

Ростовский Государственный Университет, Физический

Расчеты рентгеновских спектров поглощения в оксидах Mn - кристаллах с сильно скоррелированными электронами

Научный руководитель: Крайзман Виктор Львович, д. ф. - м. н., профессор, Физический факультет РГУ

Адрес: 344090, Ростов-на-Дону, ул. Р.Зорге, 28/2, общ. 5А

Телефон: (8632) 22-34-14

E-Mail: imaznich@mail.ru стр. 127

Макуренков Александр Михайлович, 5 курс
Московский Государственный Университет, Физический
Учет сильного электрон-фононного взаимодействия при объяснении сверхпроводящих свойств MgB₂

Научный руководитель: Ржевский В.В., к. ф. - м. н., доцент, МГУ имени М.В. Ломоносова
Адрес: 123557 г.Москва, Средний тишинский пер., д. 16., кв. 24
E-Mail: makurenkov@mail.ru стр. 129

Мещерякова Наталья Евгеньевна, 5 курс
Волгоградский Государственный Педагогический Университет, Физический

Поглощение нелинейных волн электронами сверхрешетки
Научный руководитель: Крючков С.В., д. ф. - м. н., Профессор, Кафедра общей физики ВГПУ
Адрес: 400064, Волгоград, ул. Р.Зорге, 42-95
E-Mail: sed@fizmat.vspu.ru стр. 131

Мызникова Оксана Александровна, Соискатель на степень кандидата физ.-мат. наук
Орловский Государственный Университет, Физико - математический
Изменение термоэлектрической эффективности вещества при различных законах распределения носителей заряда.

Научный руководитель: Марков Олег Иванович, к. ф. - м. н., Доцент кафедры теоретической физики, Орловский государственный университет
Адрес: 302026, г. Орел, ул. Нормандия-Неман, д. 101, кв. 347
Телефон: (0862)77-74-48
E-Mail: rbv@fromru.com стр. 133

Одинцов Дмитрий Сергеевич, 3 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический

Нелинейные упругие колебания в кристаллах
Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф. - м. н., профессор, завед. кафедрой теоретической физики, Кемеровский государственный университет
Адрес: 650003, г.Кемерово, пр.Химиков, д.43 - кв.87
Телефон: (3842) 731649
E-Mail: foxytail@omen.ru стр. 135

Орешко Алексей Павлович, аспирант 1-го года обучения
Московский Государственный Университет, Физический
Теория зеркального отражения рентгеновских лучей в условиях скользящей дифракции от многослойных поверхностных структур

Научный руководитель: Бушуев Владимир Алексеевич, д. ф. - м. н., профессор, МГУ им. М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела
Адрес: 123458 Россия, Москва, Твардовского 5-3-474
Телефон: (095) 756-21-04
E-Mail: oreshko@mail.ru стр. 136

Переславцева Наталья Сергеевна, аспирантка 2 г/о
Воронежский Государственный Университет, физический

Закономерности строения валентной зоны дисилицидов группы железа
Научный руководитель: Юраков Юрий Алексеевич, д. ф. - м. н., Ведущий научный сотрудник, Воронежский государственный университет
Адрес: 394693 Воронеж, Университетская пл., 1
Телефон: (0732) 789-363
E-Mail: phssd18@main.vsu.ru стр. 139

Полянский Дмитрий Александрович, аспирант 1-го года обучения
Дальневосточный Государственный Университет. Институт физики и информационных технологий, Физико - технический

Информодинамические и фрактальные характеристики квазикристаллических структур

Научный руководитель: Юдин Виталий Витальевич, д. ф. - м. н., Профессор, Дальневосточный госуниверситет

Адрес: 690600, г. Владивосток, ул. Суханова, 8. ИФИТ ДВГУ

Телефон: (4232) 27-65-71

E-Mail: tata@ifit.phys.dvgu.ru стр. 140

Силинин Антон Владимирович, 4 курс

Кемеровский Государственный Университет, Физический

Термодинамика кристаллов с учетом ангармонизма

Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф. - м. н., профессор, зав. кафедрой теоретич. физики КемГУ, кафедра теоретической физики КемГУ

Адрес: 650023, г. Кемерово, пр-т Октябрьский, д. 69а, кв. 55

Телефон: (3842) 53-75-21

E-Mail: wanderer81@mail.ru стр. 143

Старцев Евгений Сергеевич, аспирант 2-го года обучения

Дальневосточный Государственный Университет. Институт физики и информационных технологий, Физико - технический

Задача Изинга на древесно-графовых решетках

Научный руководитель: Юдин Виталий Витальевич, д. ф. - м. н., Профессор, Дальневосточный госуниверситет

Адрес: 690600, Владивосток, ГСП, ул. Суханова, 8. ИФИТ ДВГУ.

Телефон: (4232)26-07-06

E-Mail: tata@ifit.phys.dvgu.ru стр. 145

Стрельцов Сергей Владимирович, 5 курс

Уральский Государственный Технический Университет, Физико - технический

Влияние изменений локальной симметрии на электронную структуру высоко- и низкотемпературной фаз Ca_2RuO_4 .

Научный руководитель: Анисимов В.И., д. т. н., Зав. лаб. оптики металлов, Институт Физики Металлов

Адрес: г. Екатеринбург ул. Коминтерна 11А-32, 18, Sofia Kovalevskaya St.GSP-170 Ekaterinburg 620219

Телефон: (0000)49-93-14

E-Mail: Streltsov@optics.imp.uran.ru стр. 147

Фёдоров Дмитрий Георгиевич, 4 курс

Кемеровский Государственный Университет, Физический

Электронная структура атома в модели псевдопотенциала

Научный руководитель: Журавлёв Юрий Николаевич, к. ф. - м. н., доцент, Кафедра теоретической физики

Адрес: 650055, г. Кемерово, ул. Мичурина 55А-54

E-Mail: Mitya00@rambler.ru стр. 149

Хакимов Константин Юнусович, аспирант 2-го года обучения

Казанский Государственный Энергетический Университет, ЭТАФ

Оценки ГЭП на ядрах меди в клокманните CuSe .

Научный руководитель: Матухин Вадим Леонидович, д. ф. - м. н., Зав.каф. Физики, декан факультета ЭТАФ, КГЭУ

Адрес: 420103 г. Казань ул. Ямашева д. 48, кв. 9

Телефон: 56-41-01м д., 38-70-65 р.

E-Mail: stenci@mail.ru стр. 151

Чуднов Павел Сергеевич, аспирант 3 года обучения

Дальневосточный Государственный Университет, Институт физики и информационных технологий

Фрактальные свойства квазикристаллических симметрий

Научный руководитель: Юдин Виталий Витальевич, д. ф. - м. н., Зав. кафедрой ФОТИС ИФИТ ДВГУ, ИФИТ ДВГУ

Адрес: 690048, г.Владивосток, ул. Шошина, д.5, кв.10

E-Mail: olechka@ifit.phys.dvgu.ru стр. 152

Электронное строение галогенидов серебра

Берилло Антон Владимирович

Кемеровский Государственный Университет

Журавлев Юрий Николаевич, к.ф-м.н

sevostyanov@phys.kemsu.ru

Галогениды серебра исследовались во многих работах с применением различных методов расчетов, но получить результаты совпадающие с экспериментальными данными пока не удастся. В частности, в вычислениях производимых методом псевдопотенциала, это связано с адекватным заданием параметров d - состояний металла. В фотографических системах используются смешанные кристаллы галогенидов серебра, но теоретические работы по исследованию их электронной структуры отсутствуют.

Вычисления проводились в рамках теории функционала локальной электронной плотности, методом неэмпирического псевдопотенциала в базисе разложенным по плоским волнам численных локализованных атомных sp^3d^5 псевдоорбиталей. Атомные функции находились из решения уравнения Шредингера с теми же псевдопотенциалами, путем подгонки чисел заполнения под известные диаграммы энергетических уровней. Для корректного учета d – состояний серебра в гамильтониан системы вводилась дополнительная поправка. Метод расчета реализован в программном варианте в [1].

В данной работе представлены результаты расчета зонного электронного спектра $E(\vec{k})$, плотности электронных состояний $N(E)$, распределения валентной электронной плотности $\rho(\vec{r})$ и зависимость энергии оптических переходов, $L_3 - \Gamma_1$, $L_3 - L_2$ и $L_1 - L_3$ от параметра x смешенного кристалла $AgCl_xBr_{1-x}$.

Сравнение электронного спектра $AgCl_xBr_{1-x}$ при различных x показало, что топология зон не меняется. Ширина переходов $L_3 - \Gamma_1$ и $L_3 - L_2$ принимает значения в интервале от 0.4 эв до 0.7 эв и от 4.1 эв до 4.8 эв соответственно. Интересной особенностью является то, что при $x=0.3$ ширина запрещенной зоны имеет минимальное значение, а ширина валентной зоны равна 15.4 эв, что соответствует максимуму.

Список публикаций:

[1]. Журавлев Ю.Н., Басалаев Ю.М., Поплавной А.С. Известия вузов. Физика, 2000, №3, с. 96

Плазмоны в карбине

Векессер Наталья Александровна

Байтингер Евгений Михайлович

Челябинский государственный педагогический университет

Байтингер Евгений Михайлович, д.ф.-м.н., профессор

Wekesser@cspi.urf.ac.ru

Энергия плазмонов определяется следующим выражением:

$$(\hbar\omega)^2 = \alpha \cdot \rho = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\epsilon_0 m_e m_0} \cdot \rho, \quad (1)$$

где ρ – плотность вещества, e – заряд электрона, \hbar – постоянная Планка, m_0 – масса атома углерода, m_e – масса электрона, ϵ_0 – диэлектрическая постоянная.

Исследовалась зависимость квадрата энергии плазмонов от плотности конденсированного углерода: карбина, графита, алмаза. Экспериментальные значения плотности и энергии плазмонов для алмаза и графита были взяты из литературы [1], а данные для карбина были посчитаны в ходе нашего эксперимента. Обнаружилась линейная зависимость квадрата энергии плазмонов от плотности вещества. Определен угол наклона этой прямой:

$\alpha = 0.9 \cdot 10^{-40} \left(\frac{\text{Дж}^2 \cdot \text{м}^3}{\text{кг}} \right)$ Определяя коэффициент α в формуле (1) получаем

следующее значение: $\alpha' = 0.6 \cdot 10^{-40} \left(\frac{\text{Дж}^2 \cdot \text{м}^3}{\text{кг}} \right)$ Значение, рассчитанное теоретически

и полученное экспериментально, отличаются лишь на 30 %.

По методике, описанной в [2, 3], определялась энергия σ -плазмонов в карбиноидах, отличающихся временем синтеза. Для этой цели использовались сателлитные спектры, существующие вблизи $C1s$ основной линии углерода. Сателлиты возникают вследствие потери энергии $1s$ -электронов на возбуждение плазмонов и оптических переходов. Область, соответствующая этим потерям 285-340 эВ, включает: собственно $C1s$ -пик широкий сателлит. После вычитания собственно $C1s$ -пика и нормировки основного сателлитного спектра была методом Крамерса-Кронига определена действительная (ϵ_1) и мнимая (ϵ_2) части комплексной диэлектрической функции. Нуль действительной части диэлектрической функции как раз соответствует плазменной энергии. Погрешность определения положения нулевого значения ϵ_1 совпадает с погрешностью опыта и колеблется для различных образцов от 0.4 до 0.8 эВ.

На *рис. 1* представлена зависимость энергии плазмонов от времени синтеза с вычисленной погрешностью.

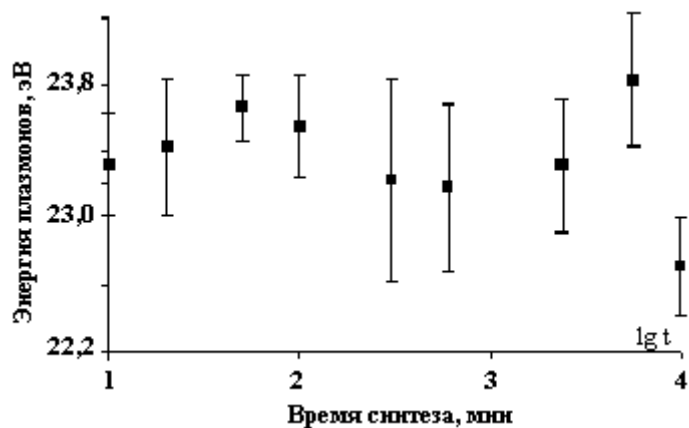


рис.1

Для образцов карбиноидов величина энергии плазмона с разным временем синтеза колеблется от 22.7 до 23.8 эВ. С течением времени синтеза энергия плазмона остается приблизительно одинаковой. Следовательно, согласно (1) и плотность также не существенно изменяется при синтезе. Полученные результаты возможно интерпретировать по-иному, что и является предметом дальнейших наших исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 01-02-96475).

Список публикаций:

- [1] Raether H. *Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons*. – Springer – Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1980.
- [2] Yu. P. Kudryavtsev, E. M. Baytinger, F. F. Kugeev, Yu. V. Korshak, S. E. Evsyukov // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 1990. – P. 295-307.
- [3] Байтингер Е. М. *Электронная структура конденсированного углерода*. – Свердловск: Изд-во Урал. ун-та, 1988.

Исследование электронного энергетического спектра дислокационного кремния

Виноградов Василий Владимирович

Колпачев Алексей Борисович

Арзуманян Грайр Вагаршакович

Таганрогский Государственный Радиотехнический Университет

Колпачев Алексей Борисович, к.ф-м.н

basil777@mail.ru

Рост степени интеграции микросхем, а также требований к их надежности и экономичности составляет основную закономерность развития современной микроэлектроники. Одним из путей увеличения степени интеграции является уменьшение размеров элементов ИС, например, за счет применения в качестве элементов ИС гетероструктур, содержащих тонкие слои атомов переходных металлов. Однако, отсутствие достоверной информации об электронном

энергетическом спектре (ЭЭС) кремния, содержащего различные кристаллографические дефекты, в частности дислокации, препятствует созданию адекватных физических моделей элементов ИС на основе таких структур. Поэтому данная работа посвящена исследованию локальных изменений в ЭЭС кремния, вызванных присутствием в нем краевых дислокаций как одного из наиболее распространенных кристаллографических дефектов полупроводников.

Для решения поставленной задачи был выбран кластерный метод расчета ЭЭС в рамках теории многократного рассеяния электронной волны на системе МТ-потенциалов. В качестве модели краевой дислокации было выбрано приближение, в котором не учитываются локальные искажения кристаллической структуры, вызванные присутствием в ней дислокационной экстраполуплоскости. Атомы кремния, расположенные ниже плоскости скольжения дислокации и лежащие на продолжении дислокационной полуплоскости заменялись вакансиями. Атомы, расположенные выше плоскости скольжения считались атомами бездефектного кремния и в вычислениях не рассматривались. Для расчета локальных парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС) в рамках данной модели рассматривались кластеры из 489 атомов с центрами на:

1. вакансиях (тип V);
2. атомах кремния, ближайших к вакансионной полуплоскости (тип Si1);
3. атомах кремния – вторых соседях по отношению к вакансионной полуплоскости (тип Si2) и т.д.

Для атомов каждого типа строился «кристаллический» потенциал с учетом реального распределения атомов в кремнии по методике, близкой к изложенной в [1]. Обменно-корреляционный потенциал вычислялся в приближении локального функционала электронной плотности [2]. «Объемные» характеристики кристалла (потенциал Маделунга, МТ-ноль) вычислялись по соотношениям, справедливым для случая идеального кристалла. Все расчеты проводились в несамосогласованном варианте.

Затем вычислялись фазы рассеяния и t-матрицы рассеяния электронов на потенциалах атомов, входящих в состав кластера. Локальные ПЭС атома в центре кластера определялись по формуле [3]:

$$n_l^A(E) = -\frac{\sqrt{E}}{\pi} \int_0^{r_{ws}} \left\{ R_l^A(r, E) r \right\}^2 dr \frac{\text{Im Tr } T_{lml'm'}^{AA'}}{\text{Im } t_l^A(E)},$$

где l – орбитальное квантовое число;

E – энергия;

$R_1^A(r, E)$ - радиальная часть решения уравнения Шредингера в потенциале атома типа А в кристалле;

$T_{lml'm'}^{AA'}$, - t-матрица рассеяния электрона на кластере.

В результате расчетов ЭЭС кремния, содержащего краевую дислокацию с направлением оси $[1\bar{1}0]$ и плоскостью скольжения (001) , было установлено, что при приближении к полуплоскости вакансий запрещенная зона атомов соответствующего типа сужается, в ней возникает энергетический уровень, лежащий на 0.4 эВ ниже дна зоны проводимости и обусловленный изменением энергетического спектра электронов вблизи полуплоскости вакансий. При удалении от вакансионной полуплоскости ПЭС в этом пике уменьшается, и запрещенная зона расширяется до 1.12 эВ. Приведенные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [4].

Дальнейшее совершенствование рассмотренной модели в расчетах позволит уточнить положение данного уровня и построить физическую модель ядра краевой дислокации в кремнии с учетом наличия вокруг него атомов примесей и искажений кристаллической решетки.

Список публикаций:

- [1] Вольф Г.В., Дякин В.В., Широковский В.П. Кристаллический потенциал для кристаллов с базисом // Физика металлов и металловедения, 1974, **38**, №5, С.949-956.
- [2] Hedin L., Lundquist B.I. Explicit local exchange correlation potentials, *J.Phys.C.*, 1971, **4**, №14, p.2064-2084.
- [3] Gyorffy B.L., Stott M.J. A one-electron theory of soft X-ray emission from random alloys // *Band structure spectroscopy of metals and alloys/* Ed. By Fabian D. Academic Press. Ld., N.Y. 1973, p.385-403.
- [4] Гражулис В.А., Кведер В. В., Мухина В.Ю., Осипьян Ю.А. Эффект электронной неустойчивости, обусловленной дислокациями в кремнии // Физика твердого тела, 1980, **22**, № 2, С. 512-522.

Модель изменения скорости ультразвука в материале с усталостными дефектами

Ефимова Ирина Евгеньевна

Коновалов Сергей Валерьевич, Сарычев Владимир Дмитриевич, Громов Виктор Евгеньевич

Сибирский государственный индустриальный университет

Громов Виктор Евгеньевич, д. ф-м.н.

konovalov@physics.sibsiu.ru

На основе ультразвуковой дефектоскопии была построена кривая относительного изменения скорости ультразвука от числа циклов нагружения для стали 45 при испытании на многоцикловую усталость (рис.1). Кривая качественно показывает накопление усталостных повреждений (внутренние напряжения, нарушение сплошности, разрушение). Скорость ультразвука

фиксировалась на приборе ИСП-12, который работает на основе метода автоциркуляции импульсов. Суть этого метода заключается в том, что прошедший по образцу ультразвуковой импульс преобразуется в приемном пьезопреобразователе в электрический сигнал, формирующий следующий вводимый в образец импульс.

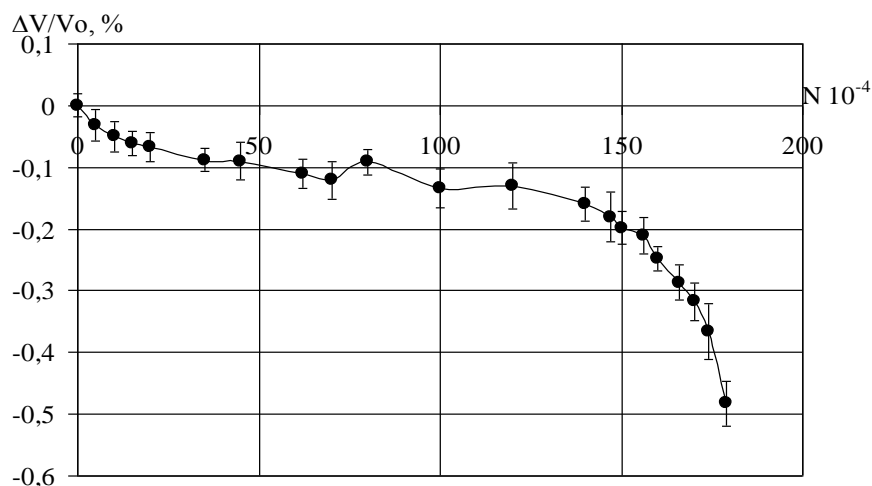


Рис.1.

Обработка импульсами тока определенной частоты и амплитуды в начале третьей стадии позволяет увеличить общее число циклов до разрушения, модифицировать физико-механические свойства, приводит к релаксации напряжений I и II рода и измельчению зерен [1-3], позволяет увеличить скорость ультразвука.

В настоящей работе предлагается теоретическая модель прохождения ультразвука по материалу с усталостными трещинами. Ультразвуковой тракт представляется в виде трех слоев: бездефектный материал – дефектная прослойка - бездефектный материал.

Обратимся к теории прохождения ультразвука через три слоя с целью получения определяющего уравнения для резонансной частоты [4,5]. Пусть имеются следующие характеристики трех слоев: координаты, волновые числа и модули Юнга.

Тогда решение волнового уравнения можно представить в виде:

$$U_1(x;t) = (A_1 \cdot e^{-i \cdot x \cdot k_1} + B_1 \cdot e^{+i \cdot x \cdot k_1}) \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

$$U_2(x;t) = (A_2 \cdot e^{-i \cdot x \cdot k_2} + B_2 \cdot e^{+i \cdot x \cdot k_2}) \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

$$U_3(x;t) = (A_3 \cdot e^{-i \cdot x \cdot k_3} + B_3 \cdot e^{+i \cdot x \cdot k_3}) \cdot e^{i \cdot \omega \cdot t}$$

где x_n – координата; $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\omega}{c_n}$ – волновое число; c_n – скорость звука; $\omega = 2\pi f$ – частота; A_n, B_n – комплексные амплитуды; $n=1, 2, 3$.

Далее амплитудные значения определяют из граничных условий и условий непрерывности и смещений.

В результате получают, что размеры одноименных слоев не входят по отдельности в определяющее уравнение для резонансной частоты. Из этого делается вывод, что роль здесь играет расстояние между излучателем и приёмником минус ширина дефектной прослойки. Это обстоятельство позволяет выдвинуть гипотезу о суммарном влиянии размеров микротрещин на изменение частоты ультразвука. Данная гипотеза оправдывает использование данной модели для описания прохождения звука через среду с усталостными трещинами.

Сравнение рассчитанных и экспериментальных значений позволяет утверждать об адекватности модели прохождения ультразвука по усталостному материалу. При этом воздействие электрическим током снижает объемную долю второй дефектной среды и это приводит к повышению скорости ультразвука.

Список публикаций:

- [1] Громов В.Е., Зуев Л.Б., Козлов Э.В., Целлермаер В.Я. *Электростимулированная пластичность металлов и сплавов*. М.: Недра, 1996, 290с.
- [2] Зуев Л.Б., Соснин О.В., Чиракадзе Д.З., Громов В.Е. *Акустический контроль долговечности стальных образцов и восстановление их ресурса*. // *Прикладная механика и техническая физика*, 1998. т.39. № 4. с.180-183.
- [3] *Электростимулированная малоцикловая усталость*. Под ред. Соснина О.В., Громова В.Е., Козлова Э.В. М.: «Недра Коммуникаций ЛТД», 2000. 208с.
- [4] Ботаки А.М., Воробьев А.А., Глебов А.И., Ульянов В.Л. *Радиационная физика ионных кристаллов*. М.: Атомиздат, 1980. 208с.
- [5] А.А. Ботаки, В.Л. Ульянов, А.В. Шарко. *Ультразвуковой контроль прочностных свойств конструкционных материалов*, М.: Машиностроение, 1981, 80с.

Влияние давления на электронную структуру пленки $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$.

Задорожный Вячеслав Викторович

Борщ Надежда Алексеевна

Воронежский государственный университет

Дубровский Олег Игоревич, к. ф.-м. н.

phssd18@main.vsu.ru

Проблемы, связанные с теоретическим изучением электронного строения высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и сопоставлением результатов этих исследований с экспериментальными данными до настоящего времени остаются актуальными. Наиболее значительный интерес представляют

соединения ВТСП купратов на основе ртути - $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2}$, а особенно фаза $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ ($n=3$). Во-первых, для этого соединения характерна на данный момент самая высокая в отсутствие внешнего давления температура сверхпроводящего перехода $T_c=135$ К, во-вторых, существует возможность значительно увеличить T_c под высоким гидростатическим давлением (до 165 К под давлением 31 ГПа). Кроме того, различные экспериментальные исследования дают значение барической производной dT_c/dp до 4.6 К/ГПа, что является самым большим значением среди всех ВТСП материалов.

Понимание явления сверхпроводимости, и, тем более, механизма повышения температуры сверхпроводящего перехода под высоким внешним давлением, невозможно без детального изучения электронного строения. Поэтому в настоящей работе проведено теоретическое исследование электронной структуры тонкой пленки ВТСП соединения $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ и анализ влияния на нее внешнего гидростатического давления. Для расчета зонной структуры использовался пленочный метод линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ). Зонная структура рассчитывалась для пленки в отсутствие внешнего давления, а также под влиянием внешнего гидростатического давления величиной 3.5, 6.0 и 8.5 ГПа. На основе результатов зонного расчета были вычислены следующие спектральные характеристики:

1. полная плотность электронных состояний (ПЭС);
2. локальные ПЭС для всех неэквивалентных атомов;
3. рентгеновские эмиссионные K_α -спектр кислорода и L_α -спектр меди, а также вклады в эти спектры от всех неэквивалентных атомов.

Анализ локальных ПЭС показал, что валентная зона пленки сформирована, главным образом, $\text{Cu}3d$ - и $\text{O}2p$ -состояниями. Энергетическое положение максимума в плотности d -состояний меди совпадает с положением минимума в плотности p -состояний кислорода, что свидетельствует о сильном d - p -взаимодействии атомов меди и кислорода из одной плоскости. Кроме того, положение особенностей парциальных ПЭС указывает на то, что апикальные атомы кислорода (лежащие в слое Ва-О, соседнем со сверхпроводящим медь-кислородным слоем) достаточно сильно взаимодействуют с атомами ртути.

Положение основных особенностей в локальных ПЭС атомов кислорода зависит от их кристаллографической позиции. В полную плотность состояний на уровне Ферми основной вклад вносят $\text{Cu}d$ -состояния и $\text{O}p$ -состояния, причем суммарный вклад атомов кислорода преобладает. Среди вкладов атомов кислорода самым значительным является вклад апикальных атомов кислорода.

С ростом давления происходит усиление взаимодействия d -состояний ртути и p -состояний апикального кислорода, которое приводит к смещению в область более низких энергий ПЭС атомов кислорода.

Анализ изменений положения основных особенностей локальных ПЭС атомов с ростом давления показал сильное влияние гибридованных d -состояний ртути и p -состояний апикального кислорода на энергетические уровни ближайшей к поверхности медь-кислородной плоскости. Оно проявляется в смещении от уровня Ферми ПЭС атомов меди и кислорода, лежащих в одной плоскости, при усилении взаимодействия между атомами ртути и атомами апикального кислорода.

Анализ полученных в работе на основе зонного ЛППВ расчета рентгеновских CuL_{α} и OK_{α} -спектров пленки $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$ в отсутствие внешнего давления (рис.1) выявил следующие особенности. CuL_{α} -спектр бесструктурен, а OK_{α} -спектр имеет тонкую структуру с двумя максимумами: главным - A , который образован вкладами всех атомов кислорода, и побочным B , образованным вкладами атомов кислорода из медь-кислородных плоскостей. Энергетическое положение основных особенностей CuL_{α} - и OK_{α} -спектров свидетельствует о сильном резонансном d - p -взаимодействии в пределах слоев CuO_2 , которое проявляется в виде расщепления OK_{α} -полосы на две компоненты в области локализации главного максимума CuL_{α} -спектра.

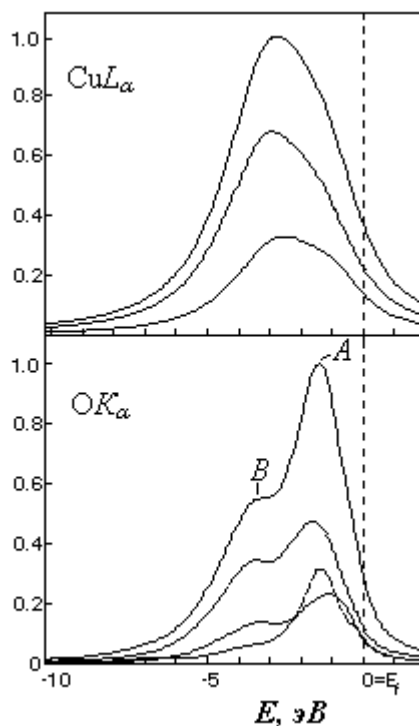


рис.1

С ростом давления сохраняются все эти закономерности, а также происходят следующие изменения. Увеличивается расщепление OK_{α} -спектра, т.к. усиливается взаимодействие в медь-кислородных слоях. Это приводит к уширению полного OK_{α} -спектра. Растет интенсивность побочного максимума B в OK_{α} -спектре атомов кислорода. За счет смещения CuL_{α} -спектра к уровню Ферми

происходит сближение максимумов L_α -спектра атомов меди и K_α -спектров атомов кислорода.

Исследование фазовых переходов в спин-фононных системах

Иванов Денис Александрович

Витебский государственный университет

Буйнов Николай Сергеевич, к.ф.-м.н

buin@mail.ru

Рассмотрена система парамагнитных примесных центров с эффективным спином S , помещенная в сильное магнитное поле \vec{H}_0 параллельное оси z . Образец представляет собой акустический резонатор для звуковых частот $\omega_{\vec{k}}$. Взаимодействие между примесными центрами мало. Оно осуществляется через общее поле фононов частоты $\omega_{\vec{k}}$.

Гамильтониан системы [1] может быть записан следующим образом:

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (1)$$

где H_0 гамильтониан системы спинов во внешнем магнитном поле \vec{H}_0 имеет вид:

$$H_0 = \sum_{j=1}^N \hbar \omega_0 S_z^j, \quad (2)$$

гамильтониан поля фононов -

$$H_1 = \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

гамильтониан спин-фононного взаимодействия -

$$H_2 = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \xi} \left(\beta_0 H_\alpha F_{\alpha\beta\gamma\xi} S_\beta^j + \mathfrak{T}_{\alpha\beta\gamma\xi} S_\alpha^j S_\beta^j \right) u_{\gamma\xi}^j, \quad (4)$$

$F_{\alpha\beta\gamma\xi}$ и $\mathfrak{T}_{\alpha\beta\gamma\xi}$ - компоненты тензоров спин-фононного взаимодействия дипольного и квадрупольного типа, $\omega_0 = -\gamma |\vec{H}_0|$, β_0 - магнетон Бора. Компоненты тензора деформации в представлении вторичного квантования

$$u_{\gamma\xi}^j = \frac{i}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\vec{k}} c_0}{8 \rho V_0 v^2}} \left(a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} - a_{\vec{k}}^j e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \right) P_{\gamma\xi}^0, \quad (5)$$

где

$$P_{\gamma\xi}^0 = \Phi_\gamma k_\xi^0 + \Phi_\xi k_\gamma^0, \quad \vec{k}_0 = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}, \quad (6)$$

Φ_γ - компоненты единичного вектора поляризации фононной моды частоты $\omega_{\vec{k}}$ с волновым вектором \vec{k} , v - скорость звука, ρ - плотность кристалла, c_0 - атомная концентрация парамагнитной примеси, v_0 - объем элементарной ячейки.

В случае примесных центров с эффективным спином $S = \frac{1}{2}$ в гамильтониане H_2 останутся только члены, ответственные за дипольное спин - фононное взаимодействие, т.е. $\mathfrak{S}_{\alpha\beta\gamma\xi} = 0$. Будем считать, что резонатор настроен на частоту зеемановского расщепления примесных центров ($\omega_{\vec{k}} \approx \omega_0$).

Тогда гамильтониан системы принимает следующий вид:

$$H = \hbar\omega_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \sum_j \left(\hbar\omega_0 s_z^j + \frac{F}{\sqrt{N}} s_+^j a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} + \frac{F^*}{\sqrt{N}} s_-^j a_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} \right), \quad (7)$$

где

$$F = i\beta_0 H_0 \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}} c_0}{8\rho V_0 v^2}} \sum_{\gamma,\xi} F_{\gamma\xi} P_{\gamma\xi}^0. \quad (8)$$

Для исследования системы воспользуемся методом двухвременных температурных запаздывающих функций Грина [2], для которых получим цепочку зацепляющихся уравнений. Для упрощения этих уравнения воспользуемся методом самосогласованного поля. При этом в систему уравнений войдут две функции Грина:

$$G(j-j', t) = \langle\langle S_+^j(t) | S_-^{j'}(0) \rangle\rangle = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_+^j(t), S_-^{j'}(0)] \rangle, \quad (9)$$

$$D(j-j', t) = \langle\langle a_{\vec{k}}^+(t) S_+^j(t) | S_-^{j'}(0) \rangle\rangle. \quad (10)$$

Воспользовавшись спектральным представлением функций Грина, найдем энергетический спектр элементарных возбуждений системы:

$$E = \hbar\omega_0 \sqrt{1 + \frac{4|F|^2 \langle a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \rangle}{\hbar^2 \omega_0^2 N}}, \quad (11)$$

где

$$y = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}}{N} \right\rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{|F|^2}{\hbar^2 \omega_0^2} - \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{|F|^2} \right) \quad (12)$$

имеет смысл плотности фононов резонансной моды. Значение критической температуры фазового перехода

$$T_c = \frac{\hbar\omega_0}{k \ln \left(\frac{|F|^2 + \hbar^2\omega_0^2}{|F|^2 - \hbar^2\omega_0^2} \right)}. \quad (12)$$

В работе также обсуждается влияние внешних электромагнитных и гиперзвуковых полей на термодинамические и спектральные характеристики спин - фононой системы.

Список публикаций:

[1] Такер Э. Физическая акустика, под ред. Мезона, т.4А // М., Мир. – 1969.

[2] Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма // М., Наука. – 1975.

Электронная структура галогенидов таллия

Иванов Павел Сергеевич

Кемеровский Государственный Университет

Журавлев Юрий Николаевич, к.ф.-м.н.

sevastynov@phys.kemsu.ru

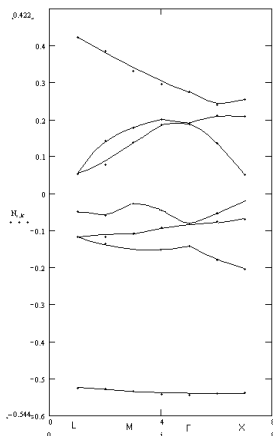
Бромид и хлорид таллия кристаллизуются в решетке типа CsCl с координационным числом 8. Пространственная группа симметрии O_h^1

Такую же структуру имеет и ряд щелочно-галлоидных кристаллов (ЩГК). Но собственные энергетические уровни галогенидов таллия и ЩГК принципиально отличаются из-за качественных различий в конфигурации электронных оболочек таллия и щелочного металла ионов.

Экспериментально известно что TlBr сильно ионный кристалл.

Расчет зонной структуры проводился в рамках теории функционала локальной электронной плотности, методом псевдопотенциала в базисе разложенных по плоским волнам локализованных sp^3d^5 атомных псевдоорбиталей.

В представленной работе проведены вычисления зонной структуры и плотности электронных состояний TlCl и TlBr.



Плотность электронных состояний $N(E)$ рассчитывалась методом интерполирования энергетических зон симметризованными рядами Фурье.

Расчеты показывают что зоны TlCl и TlBr весьма сходны. Максимум верхней валентной зоны расположен в точке зоны Бриллюэна X с координатами $(0,0,1/2)$ в единицах векторов обратной решетки, а минимум зоны проводимости в $R(0,1/2,1/2)$ и X ширина запрещенной зона составила 2,4 эВ- TlCl и 2,3- TlBr. Самая нижняя

валентная зона образована практически полностью s-состояниями брома и имеет ширину порядка 1 эВ, ширина же валентной зоны составляет порядка 5,5- TlCl и 5,6-TlBr . Что значительно больше чем в ЩГК ,поскольку s-зоны таллия перекрываются по энергии с p-зоной галлогена.

Минимум зоны проводимости реализуется в точке X. Этим галогены также принципиально отличаются от ЩГК. Ширина запрещенной зоны TlCl-2,54эВ и TlBr –2,40 эВ. Последние значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Влияние электрического поля на анизотропию поверхностной энергии сплавов щелочных металлов

Кашежев Аслан Зарифович

Мамбетов Альберт Хасанбиевич

Кабардино–Балкарский госуниверситет им. Х.М. Бербекова

Созаев Виктор Адыгеевич, проф., д.ф.-м.н.

Lion_kashezh@rambler.ru

Влияние электрического поля на поверхностные свойства чистых металлов изучалось во многих работах. В меньшей степени исследовалось влияние электрического поля на поверхностную энергию и поверхностную сегрегацию металлических сплавов. При этом показано, что заметное изменение поверхностных свойств: поверхностной сегрегации, электронного распределения на межфазной границе, поверхностной энергии и т.д. наблюдается в полях со значительной напряженностью поля $E \sim 10^8$ В/см.

В настоящей работе в рамках метода функционала электронной плотности изучается влияние электрического поля на анизотропию поверхностной энергии сплавов A_xB_{1-x} щелочных металлов. Модель сплава рассматривалась в приближении виртуального кристалла. Полную поверхностную энергию определяли по формуле: $\sigma = \sigma_j + \delta\sigma_{ps} + \delta\sigma_{cl}$, где

$$\sigma_j = \int_{-\infty}^{\infty} \{w[n_-(z)] - w[n_+(z)]\} dz + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(z)[n_-(z) - n_+(z)] dz - \text{вклад однородного фона};$$

$w[n(z)]$ – плотность кинетической энергии невзаимодействующего газа с поправкой на неоднородность поля (в приближении Вайцекера – Киржница), энергии обменно – корреляционного взаимодействия с поправками на нелокальность (в приближении Гелдарта – Разолта). Слагаемое $\delta\sigma_{ps}$ – поправка к модели «желе», связанная с электрон – ионным взаимодействием. Третье слагаемое – $\delta\sigma_{cl}$ – поверхностная энергия Маделунга, обусловленная ион – ионным взаимодействием.

На (рис.1) представлено вычисленное нами [1] относительное изменение поверхностной энергии сплава $Na_{0.5}K_{0.5}$ в положительном электрическом поле (1 – грань (100), 2 – грань (110)). Из (рис.1) видно, что с увеличением поля

различие в эффекте влияния поля на поверхностную энергию граней увеличивается. Это указывает на влияние электрического поля на анизотропию ПЭ граней металлических сплавов.

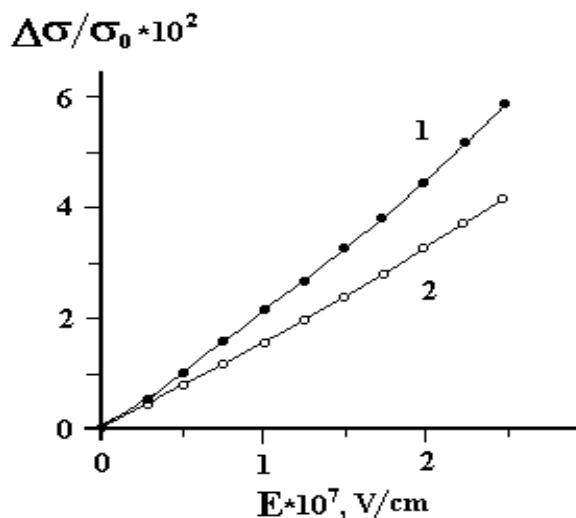


Рис. 1.

Список публикаций:

[1] Канчукоев В.З., Кашежев А.З., Мамбетов А.Х., Созаев В.А. // Письма в ЖТФ, Т. 27, В. 20, С. 89–94. (2001.)

Исследование влияния внешних воздействий на сегнетоэлектрики типа порядок беспорядок

Клиндухов Николай Александрович
Витебский Государственный Университет
Буйнов Николай Сергеевич, к.ф-м.н
buin@mail.ru

В данной работе было проведено исследование резонансного воздействия сильной электромагнитной волны на сегнетоэлектрики типа порядок-беспорядок.

Предположим, что поле включается адиабатически, т. е. пренебрегаем процессами релаксации и считаем систему “кристалл-поле” квазиравновесной. Гамильтониан с учётом тунеллирования будет иметь вид [1]:

$$H(t) = -\hbar \sum_r \Omega \sigma_r^x - \frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r-r') \sigma_r^z \sigma_{r'}^z - pE(t) \sum_r \sigma_r^z, \quad (1)$$

здесь $E(t) = E_0 \cos \omega_0 t$ пространственно-однородное внешнее электромагнитное поле. В гамильтониане (1) сделаем унитарное преобразование

с помощью матрицы $U_1 = \frac{1+i\sigma^y}{2}$. Тогда вместо (1) будем иметь следующее выражение:

$$H'(t) = \hbar \sum_r \Omega \sigma_r^z - \frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r-r') \sigma_r^x \sigma_{r'}^x - pE(t) \sum_r \sigma_r^x. \quad (2)$$

В приближении “вращающейся” волны наш гамильтониан будет иметь следующий вид:

$$H'(t) = \hbar \sum_r \Omega \sigma_r^z - \frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r-r') (\sigma_r^+ \sigma_{r'}^+ + \sigma_r^+ \sigma_{r'}^- + \sigma_r^- \sigma_{r'}^+ + \sigma_r^- \sigma_{r'}^-) - \frac{pE_0}{2} \sum_r (\sigma_r^- e^{i\omega t} + \sigma_r^+ e^{-i\omega t}), \quad (3)$$

где введены новые операторы $2\sigma^\pm = \sigma^x \pm i\sigma^y$. Сделаем унитарное преобразование зависящим от времени оператором

$$U_2(t) = \exp\left(-\frac{i\omega t}{2} \sum_r \sigma_r^z\right) \text{ и отбросим члены с двойными осцилляциями.}$$

Потом сделаем ещё одно преобразование, обратное первому и получим не зависящий явно от времени гамильтониан:

$$H = \hbar \sum_r \left(\Omega - \frac{\omega_0}{2} \right) \sigma_r^x - \frac{1}{4} \sum_{r,r'} J(r-r') (\sigma_r^z \sigma_{r'}^z + \sigma_r^y \sigma_{r'}^y) - \frac{pE_0}{2} \sum_r \sigma_r^z. \quad (4)$$

При точном резонансе $2\Omega = \omega_0$, первый член в (4) обращается в ноль, и мы приходим к гамильтониану, по форме подобному гамильтониану в модели поперечных ферромагнетиков теории анизотропных ферромагнитных кристаллов. Используя метод функций Грина, получим в приближении Тябликова (приближение случайных фаз) [2] энергетический спектр элементарных возбуждений:

$$E_k = \sqrt{(pE_0 + \sigma J(0))(pE_0 + \sigma(J(0) - J(k)))}. \quad (5)$$

Отметим, что в спектре сегнетоэлектрического кристалла появляется энергетическая “щель”

$$\Delta = \sqrt{(pE_0 + \sigma J(0))pE_0}, \quad (6)$$

что вообще характерно для систем, взаимодействующих с внешним полем, как, например, у полупроводников, находящихся во внешнем резонансном электромагнитном поле [3].

Выражение для средней безразмерной поляризации $\langle \sigma^z \rangle = \sigma$ может быть найдено из уравнения:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{2pE_0 + \sigma(2J(0) - J(k))}{2E_k} \text{cth} \frac{E_k}{2\Theta}. \quad (7)$$

Решая уравнение (7) для конкретных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок (например кристалл KDP), получим температурную зависимость поляризации. Анализ показывает, что фазовый переход в таких сегнетоэлектриках размывается.

Отметим, что приведённые выше результаты получены без предположения о слабости внешнего поля.

Список публикаций:

- [1] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков // М., Наука. – 1973.
 [2] Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма // М., Наука. – 1975.
 [3] Галицкий В.М., Елесин В.Ф. Резонансное взаимодействие электромагнитных полей с полупроводниками // М., Энергоатомиздат. – 1986.

Моделирование строения и анализ рентгеновского спектра поглощения $\text{Eu}@C_{60}$

Козорезова Валерия Вячеславовна

Ростовский Государственный Университет

Солдатов Александр Владимирович, д.ф-м.н

zulkarneev@mail.ru

Построены и проанализированы теоретические L_3 - спектры рентгеновского поглощения возможных моделей структуры $\text{Eu}@C_{60}$. Рассматриваемая структура состоит из высокосимметричной решетки C_{60} с радиусом 3,6 А, которая состоит из 20 гексагонов и 12 пентагонов и внедренного внутрь атома Eu. Наибольшая С-С связь 1,446 А между гексагоном и пентагоном и наименее короткая С-С 1,402 А между двумя пентагонами. Данное соединение представляет интерес как пример внедрения металла во внутрь решетки C_{60} , такие соединения $M@C_{60}$ (где М- щелочной, щелочно - земельный металл, лантанид) изучаются особенно пристально, как сверхпроводники с температурой фазового перехода выше 40 К. Ожидается что $\text{Eu}@C_{60}$ имеет заряд, как результат электронного перехода из атома внедренного металла на решетку C_{60} . Известно что электронный переход играет важную роль в явлении

сверхпроводимости интеркалированных в C_{60} металлов, например такие как K_3C_{60} и Rb_3C_{60} . Однако физические и химические свойства $M@C_{60}$ остаются еще плохо изученными.

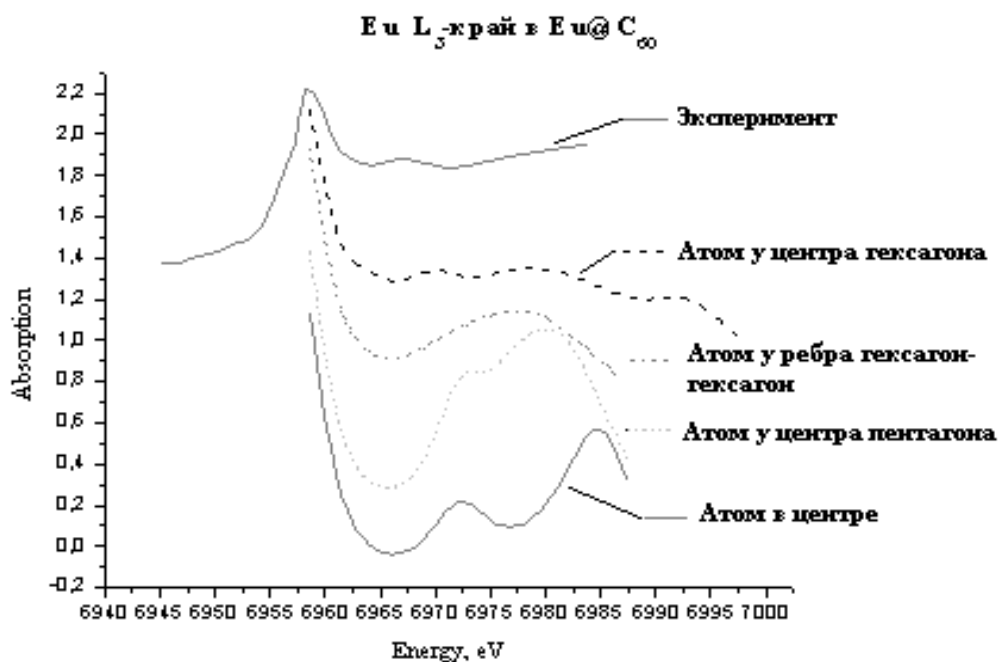


рис.1

В данной работе были получены теоретические рентгеновские L_3 спектры поглощения Eu в $Eu@C_{60}$. Моделировались 4 возможные положения атома металла – Eu интеркалированного во внутрь решетки C_{60} :

1. Атом решетки в центре решетки C_{60} ;
2. Возможное положение атома Eu у центра пентагона на расстоянии 3,5 А от центра решетки C_{60} ;
3. Возможное положение атома Eu у центра гексагона на расстоянии 3,5 А от центра решетки C_{60} ;
4. Возможное положение атома Eu у центра ребра шестиугольни-к-шестиугольни-к решетки C_{60} на расстоянии 2,5 А от центра.

По итогам работы можно сделать следующие выводы (*рис.1*):

Наибольшее соответствие теоретического спектра с экспериментальным спектром [1] достигнуто в модели когда атом Eu находится у центра гексагона на расстоянии 3,5 А от центра решетки.

Список публикаций:

[1] T.Inoue, Y.Kubozono, S. Kashinio, Y. Takabayashi, K.Fujitaka, M.Hida, M.Inoue, T.Kanbara, S.Emura, T.Urga, *Chemical Physics Letters*, 2000, p.381

Теория динамического рассеяния рентгеновского излучения в околопороговой области спектра.

Козырев Владимир Эдуардович

Ростовский Государственный Университет

Ведринский Ростислав Викторович, д.ф.-м.н.

kv@aanet.ru

Обычно при изучении дифракции в кристаллах используют РИ с длинами волн, далекими от какого-нибудь края поглощения. За последние годы появилось большое число работ, в которых дифракционное рассеяние изучается в области аномального рассеяния, т.е. в области длин волн излучения, близких к какому-либо краю поглощения. Зависимость интенсивности брэгговских пиков от частоты падающего излучения называют дифракционной аномальной тонкой структурой (DAFS). Традиционная теория динамической дифракции — теория Эвольда-Лауэ основана на введении диэлектрической проницаемости кристалла, периодически зависящей от координат. Такой подход применим при описании нормального рассеяния. Описание аномального рассеяния в таком подходе требует введения не вполне очевидных обобщений для диэлектрической проницаемости кристалла.

Задача данной работы — получить уравнения динамической теории дифракции, основанные на использовании амплитуд рассеяния РИ атомами. Когда падающая волна удовлетворяет или почти удовлетворяет брэгговским условиям, возникает вторичная интенсивная волна, распространяющаяся в направлении вектора $\mathbf{p} = \mathbf{k} + \mathbf{b}_n$, где \mathbf{b}_n — вектор обратной решетки, ответственный за возникновение данного пика. Эта волна, как и первичная, испытывает многократное рассеяние вперед и брэгговское рассеяние в направлении вектора \mathbf{k} .

Рассмотрим полубесконечный кристалл и направим ось z перпендикулярно его поверхности в глубину кристалла. Поле результирующей волны $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ представим в виде суперпозиции падающей и брэгговской отраженной волны:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}^{(1)}(z)e^{i\vec{k}\vec{r}} + \vec{E}^{(2)}(z)e^{i\vec{p}\vec{r}} \quad (1)$$

Амплитудные функции $E^{(1)}(z)$ и $E^{(2)}(z)$ зависят только от переменной z и являются медленно меняющимися функциями этой переменной. Падающая волна $E^{(1)}$ формируется за счет исходной плоской волны и вторичных сферических волн, возникающих за счет процессов многократного рассеяния падающей волны в направлении вперед и процессов многократного рассеяния отраженной волны на двойной брэгговский угол 2θ . В этом случае разность фаз волн, пришедших в точку наблюдения и возникших в результате рассеяния РИ мала, что приводит к интерференции и усилению результирующей волны в окрестности точки наблюдения. Волны, рассеянные атомами на углы отличные от 0 и 2θ , имеют большую разность хода и гасят друг друга.

$$E_{\alpha}^{(1)}(\vec{r}) = e_{\alpha}^{(0)}(\vec{r}) + \sum_{n,\beta} f_{\alpha\beta}^{(n)}(0) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_n|}}{|\vec{r}-\vec{r}_n|} E_{\beta}^{(1)}(\vec{r}_n) + \sum_{n,\beta} f_{\alpha\beta}^{(n)}(2\theta) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_n|}}{|\vec{r}-\vec{r}_n|} E_{\beta}^{(2)}(\vec{r}_n) \quad (2)$$

Отраженная волна $E^{(2)}$ будет формироваться за счет процессов многократного рассеяния отраженной волны в направлении вперед и процессов многократного рассеяния падающей волны на двойной брэгговский угол 2θ .

$$E_{\alpha}^{(2)}(\vec{r}) = \sum_{n,\beta} f_{\alpha\beta}^{(n)}(2\theta) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_n|}}{|\vec{r}-\vec{r}_n|} E_{\beta}^{(1)}(\vec{r}_n) + \sum_{n,\beta} f_{\alpha\beta}^{(n)}(0) \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_n|}}{|\vec{r}-\vec{r}_n|} E_{\beta}^{(2)}(\vec{r}_n) \quad (3)$$

Принимая во внимание, что разность фаз волн, рассеянных в направлении вперед и на угол 2θ мала, пренебрегаем дискретной атомной структурой кристалла и применяем континуальное приближение для вычисления сумм. Геометрия кристалла сказывается на распространение в нем РИ через амплитуды рассеяния атомами РИ вперед и на угол 2θ . Поскольку волна РИ поперечна, эти амплитуды являются тензорами второго ранга, заданными на плоскости перпендикулярной волновому вектору \mathbf{k} падающей волны и плоскости перпендикулярной волновому вектору \mathbf{p} отраженной волны. Заменяя суммы на эквивалентные интегралы и проводя интегрирование по области кристалла, окончательно получим систему уравнений:

$$E_{\alpha}^{(1)}(z) = e_{\alpha}^{(0)} + \frac{2\pi i F_{\alpha\beta}^{(1)}}{k_z} \int_0^z E_{\beta}^{(1)}(z') dz' + \frac{2\pi i F_{\alpha\beta}^{(2)}}{k_z} \int_0^z E_{\beta}^{(2)}(z') dz' \quad (4)$$

$$E_{\alpha}^{(2)}(z) = \frac{2\pi i F_{\alpha\beta}^{(3)}}{p_{\perp}} \int_z^{\infty} e^{-i(p_{\perp}+p_z)(z-z')} E_{\beta}^{(1)}(z') dz' + \frac{2\pi i F_{\alpha\beta}^{(4)}}{p_{\perp}} \int_z^{\infty} e^{-i(p_{\perp}+p_z)(z-z')} E_{\beta}^{(2)}(z') dz' \quad (5)$$

$$\text{где } \vec{p}_{\perp} = \sqrt{k^2 - p_x^2 - p_y^2} \succ 0 \quad (6)$$

$$p_{\perp} \approx -p_z \quad (7)$$

$$|\vec{p}| \neq |\vec{k}| \quad (8)$$

$$F_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{n \in \text{и.с.}} f_{\alpha\beta}^{(n)} \quad (9)$$

Суммирование в (9) ведется по всем атомам в элементарной ячейке.

Список публикаций:

[1] Mahavariani V.Sh. 1995 J. Phys.: Condens. Matter 7 5151

Особенности светоэлектрического эффекта в квантовом цилиндре

Колотева Наталья Александровна

Волгоградский Государственный Педагогический Университет

Сыродоев Геннадий Алексеевич, к.ф.-м.н

belgen@avtlg.ru

В настоящей работе рассматривается увлечение носителей заряда при внутризонном поглощении электромагнитной волны (ЭМВ), распространяющейся вдоль оси симметрии слоя конечной толщины, свернутого в цилиндр. Для невзаимодействующих электронов потенциал конфайнмента квантового цилиндра выбран параболическим. В этом случае в соответствии с обобщенной теоремой Кона электрон-электронное взаимодействие, как правило, не влияет на оптические свойства системы. Что упрощает описание электронных процессов в таких структурах. В настоящее время развитие нанотехнологий сделало возможным изготовление из слоев напряженного GaAs/GaAlAs поверхностей различной кривизны, и в частности цилиндрических поверхностей, физические свойства которых проявляют интересные особенности.

Для электронов, движущихся свободно вдоль оси z , энергетический спектр квантового цилиндра [1] есть

$$\varepsilon_{\sigma} = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) + \lambda m^2 + \hbar^2 k_z^2 / 2\mu, \quad (1)$$

где ω_0 - частота потенциала конфайнмента, λ - энергия размерного конфайнмента, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $n = 0, 1, 2, \dots$; $\sigma = (m, n, k_z)$, μ - эффективная масса электрона. Волновые функции можно записать в следующем виде

$\Psi_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L_z}} \exp(ik_z z) \frac{1}{2\pi R} \exp\left(\frac{imx}{R}\right) \Phi_n\left(\frac{y}{l}\right)$, где $l = \sqrt{\hbar/(\mu\omega_0)}$ - эффективная ширина

канала, $2\pi R$ - длина канала, $\Phi_n\left(\frac{y}{l}\right)$ - осцилляторные функции, L_z - длина цилиндра, предполагается много больше его поперечного размера.

При поглощении линейно поляризованной волны, распространяющейся вдоль оси z с вектор-потенциалом $A_y = A_0 \cos(\omega t - kz)$, электрон получает импульс в направлении распространения волны. Это приводит к появлению в закороченном цилиндре тока увлечения, а в разомкнутом - светоэлектрического поля. Ток увлечения определяется соотношением

$$j_z = -e \frac{\hbar v^{-1}}{\mu V} (1 - \exp(-\frac{\hbar\omega}{\Theta})) \sum_{\sigma, \sigma'} k'_z w_{\sigma', \sigma} N_{\sigma}, \quad (2)$$

где учтено вынужденное испускание,

$$w_{\sigma', \sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar^2}{4l^2} \left(\frac{eA_0}{\mu c}\right)^2 \delta_{m, m'} \left(\frac{n+1}{2} \delta_{n, n'-1} - \frac{n}{2} \delta_{n, n'+1}\right) \delta_{k'_z, k_z + \kappa} \delta(\hbar\omega_{\sigma', \sigma} - \hbar\omega) \quad (3)$$

вероятность перехода $\sigma \rightarrow \sigma'$, N_{σ} - числа заполнения электронов, κ - волновой вектор фотона, $\delta_{m, m'}$ - символ Кронекера, $\hbar\omega_{\sigma', \sigma} = \varepsilon_{\sigma'} - \varepsilon_{\sigma}$, Θ - температура в единицах энергии.

В результате вычисления получаем выражение для тока увлечения

$$j_z = -\frac{\hbar v^{-1} N \kappa \Pi}{2\pi^2 c \omega^2 \sqrt{\varepsilon(\omega)}} \left(\frac{\pi e}{\mu l}\right)^3 \frac{(1 - \exp(-\frac{\hbar\omega}{\Theta}))}{\text{sh}(\frac{\hbar\omega}{2\Theta})} \exp(\frac{\hbar\omega_0}{2\Theta}) \frac{\tau}{(\omega - \omega_0)^2 \tau^2 + 1}, \quad (4)$$

где I - интенсивность ЭМВ, N - концентрация электронов, v^{-1} - характерное время релаксации импульса электрона, τ - характерное время, определяющее уширение дискретных уровней и, соответственно. Ток увлечения пропорционален интенсивности и волновому вектору ЭМВ, а также зависит от параметров полупроводниковой структуры. Светозлектрический эффект может быть использован в качестве эффективного метода исследования структурных и кинетических характеристик низкоразмерных структур, а также положен в основу работы детектора электромагнитного излучения.

Список публикаций:

[1] Галкин Н.Г., Маргулис В.А., Шорохов А.В. ФТТ, 43, 511 (2001)

Электронные свойства синглет-триплетной модели

Коришунов Максим Михайлович

Институт Физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Овчинников Сергей Геннадиевич, д.ф.м.н., проф.

lambda-soft@narod.ru

Количественное описание сверхпроводящего состояния ВТСП-купратов не может быть получено без рассмотрения их электронной структуры и ее эволюции с допированием. Нами построен эффективный гамильтониан синглет-триплетной модели для оксидов меди, являющийся низкоэнергетическим пределом реалистичной многозонной p-d модели сильно коррелированных электронов CuO_2 -слоя. Полученный гамильтониан является обобщением t-t'-J модели на случай наличия в системе помимо синглета Жанга-Райса еще и

двухчастичного триплета, о необходимости учета которого свидетельствует ненулевая заселенность d_{z^2} -орбиталей, выявленная в экспериментах по поляризационной зависимости CuL_3 - спектров рентгеновского поглощения (XAS), а также в спектрах электронных потерь (EELS) во всех ВТСП р-типа. Гамильтониан эффективной синглет-триплетной модели по сравнению с t-t'-J моделью обладает несколькими важными свойствами. Во-первых, появился член $X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma\sigma}$, который может давать ненулевой вклад в сверхпроводящее спаривание. Во-вторых, учет триплета привел к перенормировке обменного интеграла. И, в-третьих, синглет-триплетная модель асимметрична относительно систем n- и р-типа: для систем n-типа имеет место обычная t-J модель, а для сверхпроводников р-типа со сложной структурой зон на потолке валентной зоны играют важную роль синглет-триплетные переходы. Как показал анализ возможных процессов в нашей модели, помимо спин-флуктуационного механизма сверхпроводящего спаривания и имеющего место в t-J модели, присутствует спаривание за счет синглет-триплетных переходов. При этом промежуточным бозоном является спиновый экситон, дающий вклад в параметр порядка.

В рамках обобщенного приближения среднего поля в представлении операторов Хаббарда для сверхпроводящей фазы получены нормальные и аномальные функции Грина. Симметричная классификация параметра порядка показала, что в квадратной решетке не реализуются ни синглетные спаривания s-типа, ни триплетные спаривания p-типа, в то время как синглетные спаривания $d_{x^2-y^2}$ - и d_{xy} -типа могут существовать и конкурировать. В последние годы были найдены доказательства доминирования $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии в купратах n-типа, что совпадает с нашими результатами, так как в пределе большой величины щели с переносом заряда наши уравнения принимают вид уравнений t-J модели и также имеет место $d_{x^2-y^2}$ -тип симметрии параметра порядка.

Для нормальной парамагнитной фазы получена дисперсия энергии по зоне Бриллюэна и найдена плотность состояний. Также найдена эволюция уровня Ферми с допированием. Синглет, как и триплет, дает вклад в плотность состояний, что приводит к появлению двух различных особенностей Ван-Хова. Первую особенность, соответствующую синглетной подзоне, уровень Ферми пересекает при концентрации дырок $x=0.43$. И при концентрации $x=0.64$ уровень Ферми пересекает вторую особенность, соответствующую триплетной подзоне.

Электрон-фононное взаимодействие в кристалле NaClO_4

Кособуцкий Алексей Владимирович

Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.

sevostyanov@phys.kemsu.ru

Интерес, проявляемый к изучению перхлоратов щелочных металлов, обусловлен их термодинамической лабильностью: с повышением температуры данные соединения разлагаются с выделением свободного кислорода. Этим и определяется их использование в качестве окислителей в пиротехнике, компонентов взрывчатых веществ.

Кристалл NaClO_4 имеет пространственную группу симметрии D_{2h}^{16} . В элементарной ячейке находятся 2 иона натрия и 2 перхлорат-иона с симметрией C_{2v} . В данной работе в рамках ТФЛП (теории функционала локальной электронной плотности) методом неэмпирического нелокального псевдопотенциала в базисе разложенных по плоским волнам локализованных sp^3d^5 атомных псевдоорбиталей определен количественный состав кристаллических орбиталей и найдены их энергии для равновесного и смещенного положений атомов в элементарной ячейке. Под смещенными

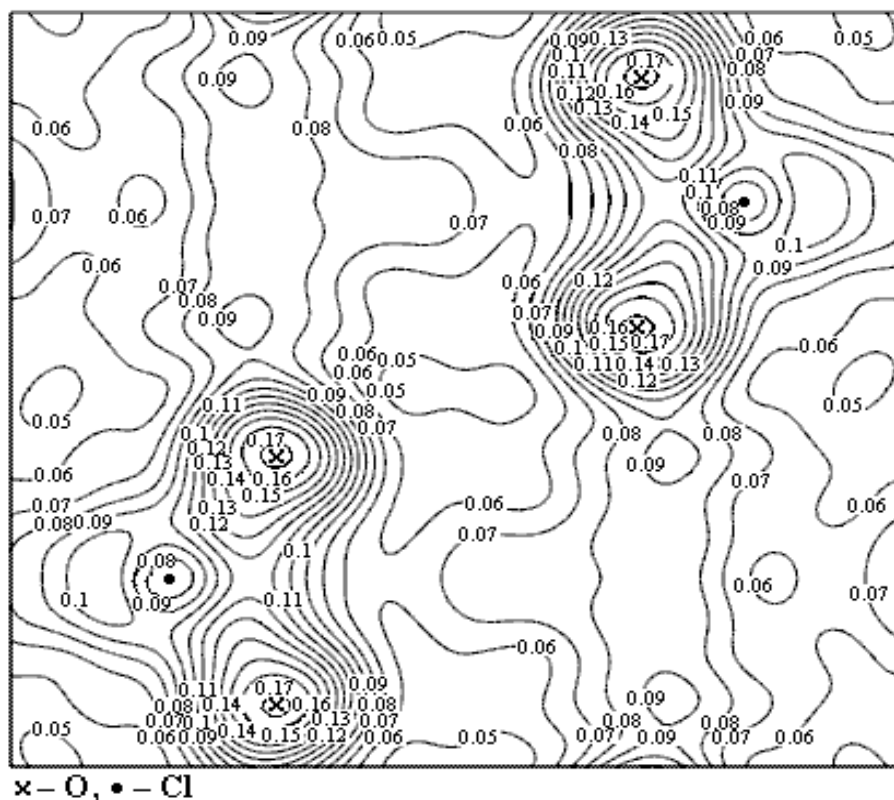


рис 1.

положениями имеются в виду 6 симметризованных смещений атомов в элементарной ячейке кристалла NaClO_4 , преобразующихся по тождественному неприводимому представлению. Из них можно выделить 3 (b,c,d) с наибольшим изменением ширины запрещенной зоны. На рисунках 1 и 2 представлены карты распределения электронной плотности в ед. $\text{e}/\text{\AA}^3$ для смещений b и c в сечении, проходящем через центры ионов Na^+ и ClO_4^- , расположенных в плоскости (1,0,0).

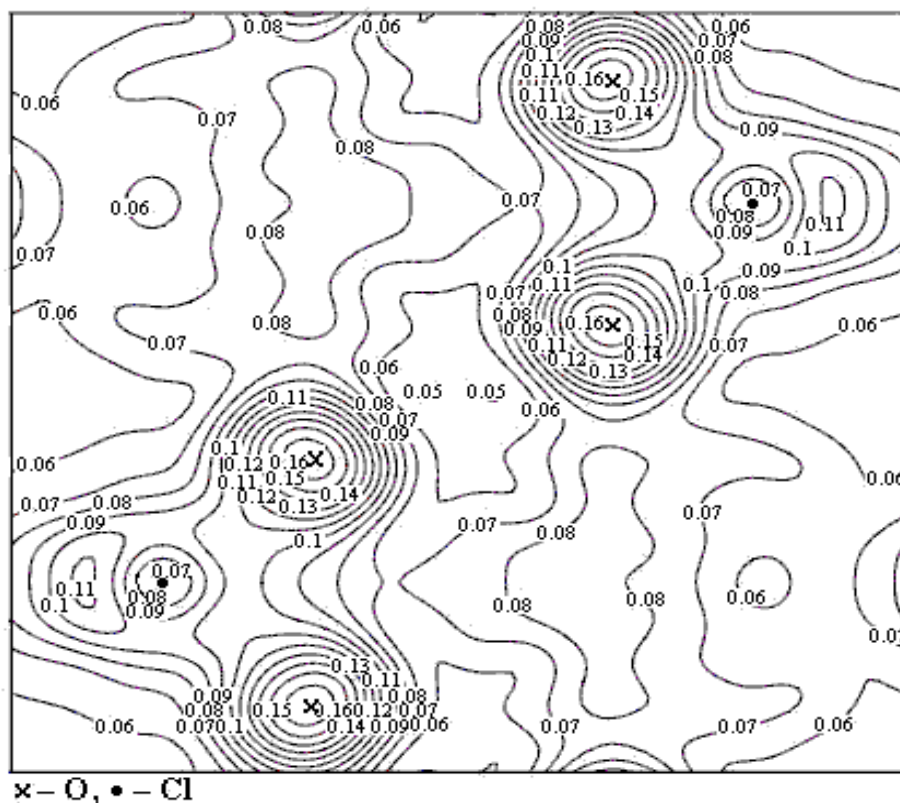


рис.2

Смещение b (рис.1) состоит в приближении атомов хлора к атомам кислорода на $0,1 \text{ \AA}$. Изменение ширины запрещенной зоны для этого случая $\Delta E_g = 0,56 \text{ эВ}$, при этом изменение энергии вершины валентной зоны $\Delta E_v = -0,25 \text{ эВ}$, изменение энергии дна зоны проводимости $\Delta E_c = 0,31 \text{ эВ}$ по сравнению с равновесным положением. Смещением c (рис.2) обозначено удаление 2 атомов кислорода внутри перхлорат-ионов от атомов хлора на $0,2 \text{ \AA}$. Ему соответствует $\Delta E_g = 0,32 \text{ эВ}$, при этом $\Delta E_v = -0,06 \text{ эВ}$, $\Delta E_c = 0,26 \text{ эВ}$. Смещение d, здесь на рисунке не представленное, состоит в сближении 2 атомов кислорода внутри перхлорат-ионов на $0,2 \text{ \AA}$, $\Delta E_g = 0,2 \text{ эВ}$, $\Delta E_v = 0,12 \text{ эВ}$, $\Delta E_c = 0,32 \text{ эВ}$. Вычислены соответствующие константы деформационного потенциала.

Наибольшие различия в распределении электронной плотности наблюдаются при рассмотрении смещений b и c. Как видно из рисунков, во всех случаях значение электронной плотности на атоме кислорода более чем в два

раза превышает ее значение на атоме хлора. В случае смещения с значение электронной плотности на атомах кислорода и хлора уменьшается по сравнению со смещениями *b* и *d* с 0.17 до 0.16 ед. на атоме кислорода и с 0,08 до 0,07 ед. на атоме хлора. В случае *b* перхлорат-ионы связаны в цепочки вдоль кристаллографической оси \bar{b} посредством двух максимумов с величинами 0,09 ед. (что соответствует и равновесному положению). В случае *c* эти максимумы сливаются в один большой расплывчатый максимум с плотностью 0,08 ед. При смещении *b* между атомами кислорода в различных перхлорат-ионах наблюдается один вытянутый минимум электронной плотности с величиной 0,05 ед. В случае *c* он превращается в два каплевидных минимума такой же величины. Таким образом, рассмотренные смещения атомов приводят к изменениям электронной плотности между перхлорат-ионами.

Расчет электронной структуры продуктов разложения солей нитратов щелочных металлов.

Кравченко Наталья Георгиевна

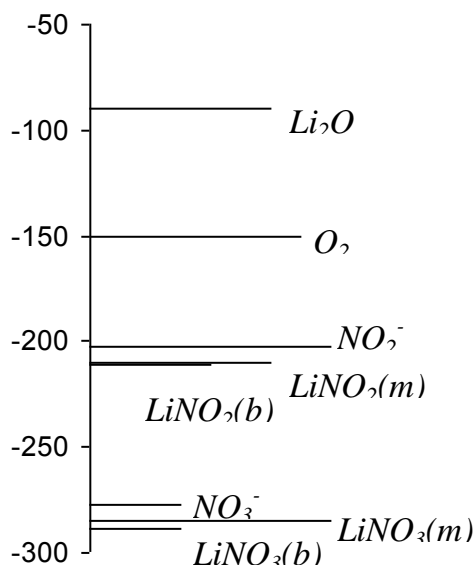
Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.н.

nshome@kemt.ru

Целью данной работы явилось вычисление возможной равновесной конфигурации молекул продуктов разложения солей нитратов щелочных металлов.

Нитраты щелочных металлов подвергаются радиационному, фотолитическому и термическому разложению. В случае радиационного разложения главными прямыми продуктами разложения являются *NO* и *O*, а главными непрямыми *NO₂* и *O₂*. Проведенные в [1] исследования на облученном кристалле *LiNO₃* позволили выявить такие продукты разложения, как *LiNO₂* и *Li₂O*.



В данной работе нами были получены возможные равновесные геометрии, полные энергии и карты электронной плотности для следующих молекул: *LiNO₃* и *LiNO₂* в бидентатной и монодентатной конфигурациях, *NO₃⁻*, *NO₂⁻*, *Li₂O* и *O₂*. Расчет электронной структуры проводился методом функционала плотности с использованием процедуры дискретного варьирования. В качестве базисных функций использовались аппроксимированные с помощью слейтеровских орбиталей численные Хартри-Фоковские атомные функции. Равновесные

расстояния (в Å) и полные энергии (в а.е.) приведены в таблице. Равновесное расстояние $O-O$ в молекуле O_2 составляет 2,2 Å, $E_t = -150,5685$ а.е., для Li_2O равновесное расстояние $R(Li-O) = 1,29$ Å, $\angle ONO = 89^\circ$, $E_t = -89,7126$ а.е. Из таблицы видно, что как для $LiNO_3$, так и для $LiNO_2$ более предпочтительной является бидентатная структура. На *рис. 1* показано относительное расположение полных энергий соответствующих молекул.

	$LiNO_3(b)$	$LiNO_3(m)$	NO_3^-	$LiNO_2(b)$	$LiNO_2(m)$	NO_2^-
$Me-N$	1,46	2,90	-	1,92	1,40	-
$N-O_b$	1,64	1,23	1,22	1,72	1,25	1,25
$\angle O_bNO_b$	100	152	120	59	110	65
$N-O_t$	1,10	1,70	1,22	-	-	-
E_t (a.e.)	-288,3463	-285,0877	-277,4195	-210,8081	-210,4116	-202,3796

Из анализа карт электронной плотности можно сделать вывод, что для всех соединений характерна ковалентная связь. В $LiNO_3$ и $LiNO_2$ выделяются связи $Li-NO_3$ и $Li-NO_2$ соответственно, как для бидентатных, так и для монодентатных структур.

Список публикаций:

[1] Sasaki T., Williams R.S., Wong J.S., Shirley D.A. *J. Chem. Phys.*, 1978, v.68, № 6, p. 2718-2724.

Поверхность Ферми и электрофизические характеристики $MoSi_2$

Левицкая Елена Владимировна

Переславцева Наталья Сергеевна

Воронежский Государственный Университет

Курганский Сергей Иванович, д.ф.-м.н

phssd18@main.vsu.ru

Дисилицид молибдена обладает большой микротвердостью, значительной стойкостью к окислению при нагревании как на воздухе, так и в токе кислорода, высокой температурной устойчивостью, малым сопротивлением, технологичностью. Он широко используется в микроэлектронике в качестве высокотемпературных припоев, напыления на электроды высокотемпературных термопар, в технологии изготовления диффузионных барьеров. Активное применение $MoSi_2$ в микроэлектронике вызвало необходимость досконального изучения как электрофизических, так и электронных свойств этого материала.

В данной работе представлены результаты самосогласованного расчета объемноцентрированной тетрагональной фазы $MoSi_2$, проведенного методом линейризованных присоединенных плоских волн в скалярном релятивистском

приближении, которое учитывает все релятивистские эффекты, кроме спин-орбитального расщепления. Рассчитаны зонная структура, поверхность Ферми и некоторые электрофизические характеристики, такие как эффективные циклотронные массы, коэффициент анизотропии проводимости, длина свободного пробега и коэффициент γ при линейном по температуре члене теплоемкости.

Ширина валентной зоны MoSi_2 составляет 13.4 эВ. Плотность состояний на уровне Ферми (E_F) достаточно низкая ($N(E_F)=0.28$ сост./эВ эл.яч.), что говорит о стабильности соединения. Уровень Ферми пересекают две энергетические зоны: седьмая и восьмая по счету от дна валентной зоны. Седьмая зона проходит через E_F в окрестности точки Γ зоны Бриллюэна и отражает незанятые состояния. Восьмая зона пересекает уровень Ферми в области точки Z и является зоной заполненных состояний. Эти зоны формируют поверхность Ферми MoSi_2 . Седьмая зона образует дырочную часть поверхности Ферми и имеет форму близкую к цилиндру, сужающемуся в основаниях по направлению ΓZ . Восьмая зона формирует электронную часть поверхности и имеет форму розетки, находящуюся в окрестности точки Z . Сопоставление полученной зонной структуры с более ранними расчетами [1–3] и рассчитанной поверхности Ферми с данными теоретического исследования [3] и экспериментом по изучению эффекта де Гааза – ван Альфена [4] показало хорошее совпадение результатов. Однако существуют некоторые различия. Так, согласно нашему расчету седьмая и восьмая зоны в направлении ΓZ вырождены, поэтому электронный и дырочный листы поверхности Ферми в направлении ΓZ в одной точке касаются друг друга, тогда как в работе [1] между ними имеется щель. Это отличие обусловлено пренебрежением в нашем расчете спин-орбитальным расщеплением, снимающим вырождение этих уровней. Тем не менее, согласно полученным данным и исследованию [2] спин-орбитальное расщепление достаточно малая величина (0.007 атомных единиц). Поэтому вносимая этим пренебрежением погрешность мала по сравнению с вкладами других факторов и не меняет общую топологию рассчитанной поверхности Ферми. Для более полного исследования топологии поверхности Ферми и сравнения с экспериментом [4] по исследованию эффекта де Гааза – ван Альфена была рассчитана зависимость площади экстремального сечения поверхности Ферми от направления напряженности магнитного поля. Обнаружено четыре экстремальных сечения, обусловленных особенностями строения электронной и дырочной частей поверхности Ферми. Однако в эксперименте [4] получили только три экстремальных сечения. Отсутствие разделения экстремального сечения электронного листа поверхности Ферми на максимальную и минимальную ветви авторы [4] объясняют проявлением интерференционных эффектов. Зависимость экстремальные сечения от угла Θ (угол между направлением напряженности магнитного поля и осью z) достаточно хорошо аппроксимируется законом $1/\cos\Theta$, вследствие чего поверхность Ферми можно считать близкой к цилиндрической.

Большинство значений эффективных циклотронных масс

$$m^*(E, k_z) = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(E, k_z)}{\partial E} \quad (1)$$

(где $A(E, k_z)$ – площадь экстремального сечения поверхности Ферми), рассчитанных для четырех кристаллографических направлений [100], [110], [001], [102], меньше 1. Полученная анизотропия проводимости $\sigma_z/\sigma_x=1.28$ хорошо согласуется с экспериментальным значением 1.3 [4]. Оценка длины свободного пробега ℓ_0 проводилась для нескольких экспериментальных данных по изучению удельного электрического сопротивления [5–9]. Полученное значение ℓ_0 в MoSi₂ близко к ее величине в щелочных металлах. Теплоемкость твердого тела при низких температурах включает в себя электронный и решеточный вклады:

$$c_v = \gamma T + AT^3 \quad (2)$$

При низких температурах коэффициент γ электронной составляющей теплоемкости определяется плотностью состояний на уровне Ферми:

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 N(E_F) \quad (3)$$

где k_B – постоянная Больцмана. Таким образом подставляя в выражение (3) рассчитанное значение $N(E_F)=0.28$ сост./эВ эл.яч. мы получили коэффициент $\gamma=0.66$ мкДж/моль К², что хорошо согласуется с экспериментальными данными 0.57 мкДж/моль К² [10] и 0.71 мкДж/моль К² [4].

Список публикаций:

- [1] Andersen O.K., Jepsen O., Antonov V.N., Antonov V.N., Yavorsky B.Yu., Perlov A.Yu. and Shpak A.P., *Physica* **B 204**, 65–82, (1995).
- [2] Shaoping Tang and Zhang Kaiming, *J. Phys. C* **21**, 1496, (1988).
- [3] Bhattacharyya B.K., Bylander D.M., Kleinman L., *Phys. Rev. B* **32**, 7973, (1985).
- [4] van Ruitenbeek J.M., Joss W., Pauthenet R., Thomas O., Senateur J.P. and Madar R., *Phys. Rev. B* **35**, 7936, (1987).
- [5] Machizuki T., Shibata K., Inoue T., and Ohuchi K., *Jpn. J. Appl. Phys. Suppl.*, **17-1**, 37, (1978).
- [6] Crowder B.L., Zirinsky S., *IEEE J. Solid State Cir.*, **sc-14**, 291, (1979).
- [7] Murarka S.P., Fraser D.B., Retajczyk T.F., Sheng T.T., *J. Appl., Phys.*, **51**, 5380, (1980).
- [8] Crow T.P., Steckl A.J., *IEEE-IEDM 1979, "Technical Digest"* p. 458, IEEE, New York (1979).
- [9] Saraswat K.C., *IEEE-IEDM 1979, "Technical Digest"* p. 462, IEEE, New York (1979).
- [10] Lasjaunias J.C., Saint-Paul M., Laborde O., Thomas O., Senateur P. and Madar R. *Phys. Rev. B* **37**, 10364, (1988).

Расчеты рентгеновских спектров поглощения в оксидах Mn - кристаллах с сильно скоррелированными электронами

Мазниченко Игорь Владимирович

Ростовский государственный университет

Крайзман Виктор Львович, д.ф.-м.н.

imaznich@ip.rsu.ru

В твердых растворах $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ при различной степени допирования наблюдаются различные виды магнитного порядка, зарядовое и орбитальное упорядочения, фазовые переходы металл-диэлектрик, явление “колоссального магнетосопротивления”, Ян-Теллеровское искажение. Богатство физических свойств этих твердых растворов обусловлено сложной электронной структурой соединений с сильно скоррелированным электронным газом. Несмотря на интенсивные экспериментальные и теоретические исследования, не существует единой точки зрения на электронную структуру этих твердых растворов.

Рентгеновская абсорбционная спектроскопия и резонансное рассеяние рентгеновских лучей применялись для исследования указанных соединений с целью выяснить валентность атомов Mn и окончательно ответить на вопрос о существовании орбитального упорядочения. Однако интерпретации результатов измерений, проведенная различными группами, зачастую противоречат друг другу. Причина этого на наш взгляд в первую очередь состоит в том, что до настоящего времени нет однозначной интерпретации особенностей в предкраевой тонкой структуре Mn K края поглощения, соответствующей возбуждению Mn 1s электрона в состоянии полосы проводимости, построенные в основном из Mn 3d орбиталей. Сложность задачи состоит в том, что необходимо одновременно учитывать эффекты многократного рассеяния фотоэлектрона атомами окружения, занимающими значительную пространственную область, электрон-электронное взаимодействие на поглощающем центре и динамическую экранировку основной вакансии. Для соединений переходных металлов (ПМ) в $3d^0$ состоянии в Ростовском университете была разработана схема расчета K спектров поглощения металла, позволившая впервые количественно описать такие спектры, включая предкраевую структуру.

В настоящей работе предпринята попытка обобщения этой схемы на случай соединений с парамагнитными ионами ПМ. При расчете спектров поглощения был использован метод полного многократного рассеяния в формализме функций Грина. При этом была учтена спиновая зависимость парциальных сдвигов фаз рассеяния фотоэлектрона на парамагнитных ионах Mn и проведено усреднение по ориентациям спиновых моментов этих ионов, соответствующее парамагнитному состоянию образцов. Расщепление d уровней кристаллическим полем и их гибридизация с уровнями других атомов, приводящая к образованию зон, автоматически, учитывается в методе многократного рассеяния. Влияние

потенциала остовой дырки на спектры учтено в модели частичной экранировки. Учтен также принцип Паули.

В спин-поляризованном расчете положения пиков в Mn K спектрах поглощения зависят от относительных направлений спиновых моментов фотоэлектрона, ионизируемого атома и соседних атомов Mn. В каждом расчете принималось, что направления спиновых моментов всех атомов Mn в кластере, исключая ионизируемый, совпадают. Упрощенная схема переходов, формирующих предкраевую часть Mn K спектра поглощения для четырех возможных относительных ориентаций спиновых моментов, приведена на рис. 1. Под влиянием потенциала остовой дырки d уровни ионизируемого атома Mn отщепляются от полосы проводимости, превращаясь в экситонные состояния. Переходы в эти состояния обусловлены квадрупольной частью оператора электрон-фотонного взаимодействия, а также механизмом p-d смешивания вследствие термических нарушений центральной симметрии MnO₆ октаэдра. Переходы в d состояния соседних атомов, или иными словами в d полосы проводимости дипольно разрешены, но имеют малую интенсивность. В одноэлектронном подходе в расчете присутствуют пики, соответствующие переходам как в свободные так и в занятые состояния, поэтому их необходимо “искусственно” устранять или уменьшать их интенсивность.

Как показали расчеты, интенсивности пиков, обусловленных разными механизмами сопоставимы по величине. Приведенная схема доказывает, что попытки простой интерпретации “двухпиковой” предкраевой структуры в кристалле LaMnO₃ и “трехпиковой” в CaMnO₃ обречены на неудачу. Эти структуры, образованы в результате суперпозиции большого числа особенностей и количественное согласие с экспериментом достигается лишь при правильном соотношении параметра обменного взаимодействия, $e_g - t_{2g}$ расщепления и сдвига уровней под влиянием потенциала остовой дырки. Результаты расчетов Mn K спектров поглощения для кристаллов LaMnO₃ и CaMnO₃ приведены на рис 2.

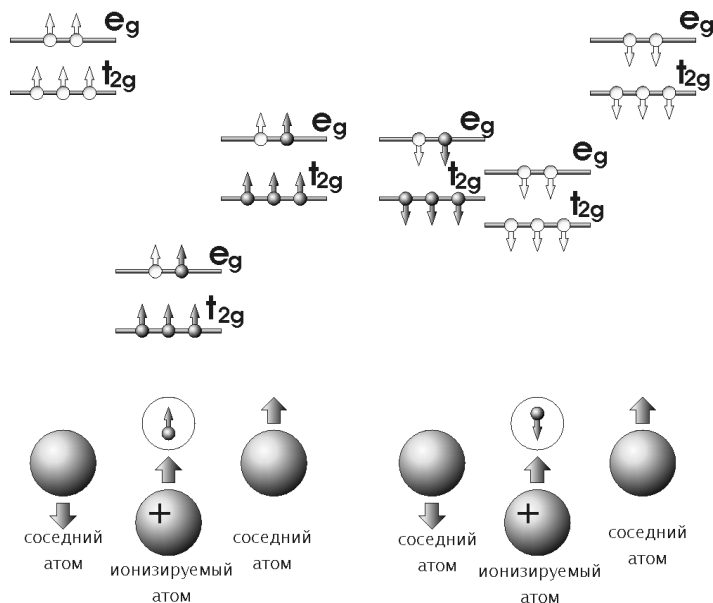


Рис. 1. Упрощенная схема переходов, формирующих предкраевую часть Mn K спектра поглощения в кристалле $LaMnO_3$. Левая панель: направление спина фотоэлектрона совпадает с направлением спинового момента ионизируемого атома. Правая панель: противоположное направление. Светлые кружки: свободные электронные состояния, темные кружки: занятые.

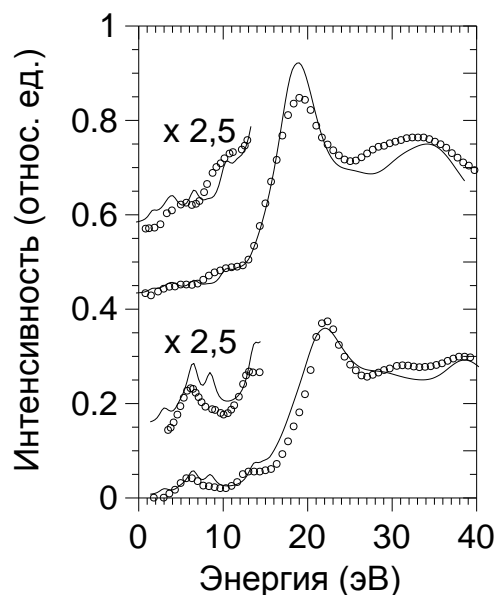


Рис. 2. Mn K спектры поглощения для кристаллов $LaMnO_3$ (вверху) и $CaMnO_3$ (внизу). Точки – эксперимент, сплошные линии – расчет. На вкладках в увеличенном масштабе показаны предкраевые тонкие структуры спектров.

Исследования поддержаны грантами РФФИ 00-02-17683 и МАС 01-02-06475.

Учет сильного электрон-фононного взаимодействия при объяснении сверхпроводящих свойств MgB_2

Макуренков Александр Михайлович

Московский Государственный университет имени М.В. Ломоносова

Ржевский Владимир Васильевич, к.ф.-м.н.

makurenkov@mail.ru

Сильное электрон-фононное взаимодействие (ЭВФ) рассматривается в работе как один из возможных факторов, определяющих высокую температуру сверхпроводящего перехода для соединений такого класса, каким является MgB_2 . Особенности электронного спектра сверхпроводника MgB_2 рассматриваются как основополагающие (Рис.1).

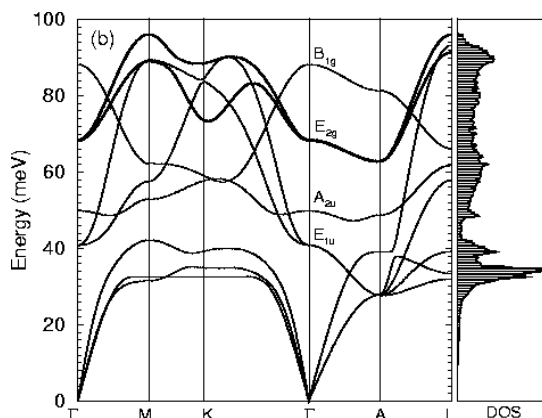


Рис.1 Электронный спектр MgB_2

Экспериментальные исследования свидетельствуют, что MgB_2 , с сильными ковалентными связями в решетке В и ионной связью В–Mg, с электронной точки зрения представляет собой типичный sp-металл с типичной плотностью состояний (Рис.2).

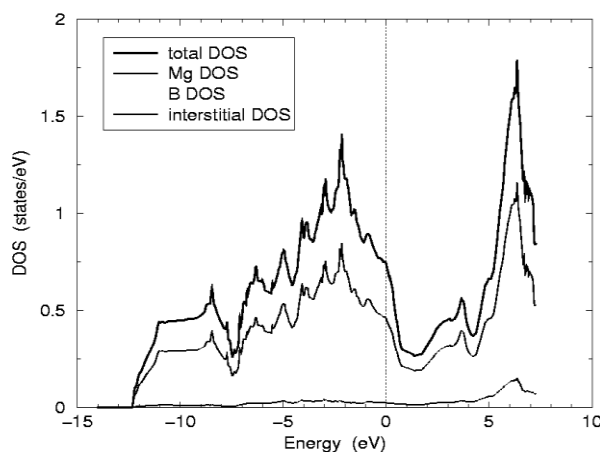


Рис. 2 Плотность состояний по энергии MgB_2

Сильные связи предполагают сильное электронное рассеяние и соответственно сильное электрон-фононное спаривание. Положительным фактором является высокая частота колебаний атомов В. Сверхпроводимость в основном обеспечена за счет бора. Изовалентное допирование может быть успешным, если оно способствует увеличению плотности состояний $N(0)$. Заметный изотопический эффект в MgB_2 указывает на важную роль электрон-фононного взаимодействия.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

В последнее время появилось множество работ посвященных сильному ЭФВ в нормальных и сверхпроводящих состояниях MgB_2 , с помощью которого объясняется ВТСП этого соединения. Следует заметить, что при этом не используются особенности электронного спектра данного соединения.

Дальнейшая разработка теории в этой области предполагает учет особенностей электронного спектра MgB_2 при расчете электрон-фононного взаимодействия.

Поглощение нелинейных волн электронами сверхрешетки
Мещерякова Наталья Евгеньевна
Волгоградский Государственный Педагогический Университет
Крючков Сергей Викторович, д.ф-м.н.
kof@fizmat.vspu.ru

Данная работа посвящена изучению процесса поглощения энергии поля нелинейной электромагнитной волны полупроводниковой сверхрешеткой (СР), а также расчету средней мощности, поглощаемой электронами СР за счет обратнотормозного эффекта. Рассматривались квантовые одномерные СР в одноминизонном приближении, в приближении постоянной частоты столкновений.

Рассуждения будут приводиться для случаев, когда столкновения с нерегулярностями кристаллической решетки являются довольно редкими, иными словами, частота столкновений ν много меньше обобщенной плазменной частоты электронов в минизоне ω_{pl} . В силу вышеупомянутых условий уравнения Максвелла, связывающие векторный потенциал \vec{A} и плотность тока \vec{j} , принимают вид невозмущенного синус – уравнения Гордона (SG), которое в качестве наиболее общего периодического решения имеет решение, выражающееся через эллиптические функции Якоби.

Среднюю мощность, поглощаемую электроном СР из нелинейной волны, определим по формуле

$$\langle e\vec{v}(t)\vec{E}(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T e\vec{v}(t)\vec{E}(t)dt, \quad (1)$$

где $v(t)$ – скорость электрона, T – период волны, $E(t)$ – поле волны, задаваемое решением SG. В силу громоздкости результатов вычисления (1) приведем лишь выражение, соответствующее случаю, когда модуль эллиптических функций k лежит в интервале $0 < k \leq 1$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\varepsilon}{dt} \right)_{\text{погл}} &= \Delta v \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} 2a_m b_s \left[\left(\frac{(2s+1)\omega_0^2}{v^2 + (2s+1)^2 \omega_0^2} + \frac{2m\omega_0^2}{v^2 + (2m\omega_0)^2} \right) \times \right. \\ &\times \left(\frac{q^{s-m+1/2}}{1+q^{2s-2m+1}} \Theta(s-m) + \frac{q^{m-s-1/2}}{1+q^{2m-2s-1}} \Theta(m-s-1) \right) + \\ &\left. + \frac{q^{s+m+1/2}}{1+q^{2s+2m+1}} \left(\frac{2m\omega_0^2}{v^2 + (2m\omega_0)^2} - \frac{(2s+1)\omega_0^2}{v^2 + ((2s+1)\omega_0)^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) $k = eE_0d|1 - \beta^2|^{1/2} / 2\omega_p\hbar\beta$, $\beta = u/c$, u – фазовая скорость волны, c – скорость электромагнитной волны в отсутствие электронов, E_0 – амплитуда напряженности поля нелинейной волны, d – период СР, $\omega_{pl}^2 = 4\pi e^2 n_0 \Delta d^2 \hbar^{-2} I_1(\Delta/\theta) I_0(\Delta/\theta)$, ω_{pl} – обобщенная плазменная частота электрона в минизоне, n_0 – концентрация электронов в минизоне, $I_m(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода порядка m , θ – температура выраженная в энергетических единицах, Δ – полуширина минизоны проводимости, $\Theta(x)$ – ступенчатая функция, $K(k)$ – полный эллиптический интеграл первого рода, \vec{A} – векторный потенциал,

$$a_0 = \left(2 \frac{E(k)}{K(k)} - 1 \right), \quad (3)$$

$$a_n(k) = \frac{4n\pi^2}{K^2(k)} \frac{q^n}{1 - q^{2n}}, \quad (4)$$

$$b_n = \frac{2(2n+1)\pi^2}{K^2(k)} \frac{q^{n+1/2}}{1 + q^{2n+1}}, \quad (5)$$

$$q = \exp(-\pi K(k')/K(k)), \quad k' = \sqrt{1 - k^2} \text{ при } k \leq 1. \quad (6)$$

Проанализируем полученное выражение (2). При стремлении безразмерной амплитуды нелинейной волны k к нулю поглощаемая мощность обращается в ноль. Математически этот факт объясняется следующим образом. При $k=0$ полный эллиптический интеграл первого рода $K(k)=\pi/2$, $K(k') \rightarrow \infty$ и, как это видно из (6), $q=0$, что в свою очередь обращает в ноль коэффициенты b_n согласно (5).

С физической точки зрения отсутствие поглощения в данном случае объясняется тем, что равенство амплитуды k нулю означает отсутствие поля.

С ростом амплитуды поля поглощаемая энергия также возрастает, но при $k=1$ наблюдается резкий спад последней до нуля, т.к. (2) дает нам среднюю за период поглощаемую мощность, а при $k=1$ нелинейная волна вырождается в солитон, что приводит к возрастанию периода T до бесконечности. Энергия, переданная волной электронам, является конечной величиной, которая при делении на бесконечный период даст нулевую поглощаемую мощность.

На рисунке 1 приведен график зависимости поглощаемой мощности, выраженной в единицах $v\Delta$, от параметра нелинейности волны k .

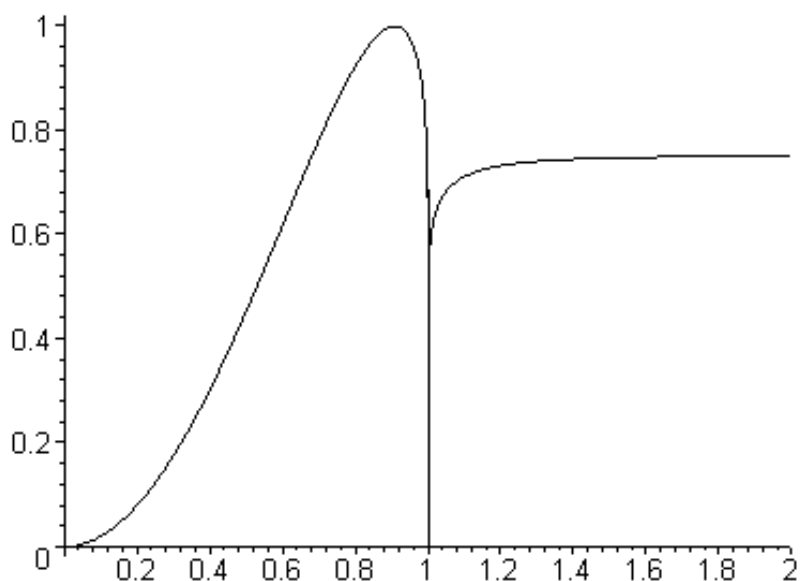


Рис. 1

Изменение термоэлектрической эффективности вещества при различных законах распределения носителей заряда

Мызникова Оксана Александровна

Орловский государственный университет

Марков Олег Иванович, к. ф.-м. н.

Rbv@fromru.com

Расчет температурного поля полупроводникового термоэлемента производился с помощью пакета Maple 6.

Решалась граничная задача относительно безразмерной переменной ξ ($0 \leq \xi \leq 1$) в адиабатическом приближении с оптимизацией по приведенному току:

$$\frac{d^2T}{d\xi^2} = -\frac{y^2}{\sigma(\xi)\kappa}; \quad (1)$$

$$\left. \frac{dT}{d\xi} \right|_{\xi=0} = \frac{y\alpha T_0}{\kappa}, \quad (2)$$

$$T|_{\xi=1} = T_\Gamma \left(T|_{\xi=0} = T_0 \right), \quad (3)$$

где σ - удельная электропроводность, κ - удельная теплопроводность, α - коэффициент термоЭДС, T_0 - температура холодного конца, T_Γ - температура

горячего конца, y - приведенный ток ($y = \frac{Il}{S}$, где I - ток, l - длина и S - поперечное сечение стержня).

Рассматривались следующие законы изменения $\sigma(\xi)$: $\sigma(\xi) = \sigma_0(1 + c\xi)$, $\sigma(\xi) = \sigma_0(-c(\xi - 1)^2 + (c + 1))$, $\sigma(\xi) = \sigma_0(1 + c\xi^2)$, $\sigma(\xi) = \sigma_0 e^{c\xi}$ (c - коэффициент пропорциональности). Все вычисления производились с учетом постоянства среднего значения удельного сопротивления ($\bar{\rho} = const$). При численных расчетах в качестве материала брался Bi_2Te_3 .

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Решением данной задачи является функция

$$T(\xi) = \frac{1}{2} z_0 T_0^2 f(\xi) + T_\Gamma, \quad (4)$$

где $z_0 = \frac{\alpha^2 \sigma_0}{\kappa}$ - термоэлектрическая эффективность (добротность), а $f(\xi)$ определяется законом изменения удельной электропроводности.

2. Максимальный перепад температур

$$\Delta T = T_\Gamma - T_0 = \frac{1}{2} z_0 T_0^2 C \quad (5)$$

где C - константа, определяемая законом изменения удельной электропроводности.

3. Во всех рассмотренных случаях максимальный перепад температур был ниже, чем тогда, когда значение удельной электропроводности бралось постоянным.

В качестве примера можно представить зависимость $T(\xi)$ для различных c при линейном законе изменения удельной электропроводности (рис. 1). Нижняя кривая соответствует $\sigma = \sigma_0 = const$.

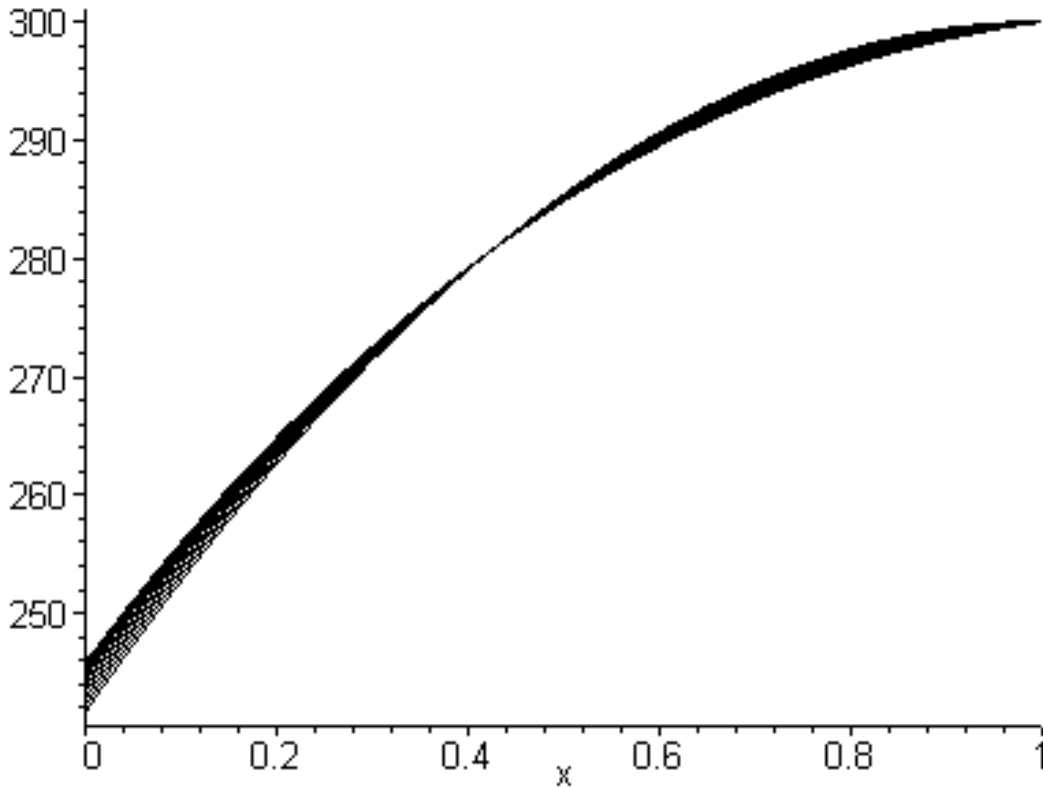


Рис. 1. График зависимости $T(\xi)$ при постоянном значении σ и при $\sigma(\xi) = \sigma_0(1 + c\xi)$ для Bi_2Te_3 .

4. Таким образом, любое распределение носителей заряда, кроме равномерного, уменьшает максимальный перепад температур между концами термоэлемента.

Нелинейные упругие колебания в кристаллах

Одинцов Дмитрий Сергеевич

Кемеровский государственный университет

Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.

foxytail@omen.ru

В работе приводится решение задачи о нахождении скорости распространения упругих колебаний в кристалле с учетом изотермических модулей упругости 3-го порядка, только с учетом которых иногда возможно описать достаточно точно происходящие в кристалле процессы возникновения и распространения колебаний.

Уравнение движения упругой среды с учетом упругих постоянных 3го порядка выглядит следующим образом:

$$\rho \ddot{s}_i = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \sum_{jkl} C_{ij,kl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \sum_{jklmn} C_{ij,kl,mn} \frac{\partial (\varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn})}{\partial x_j}, \quad (1)$$

где ρ - плотность тела, s_i - вектор смещения, σ_{ij} - тензор напряжений, где $C_{ij,kl}$, $C_{ij,kl,mn}$ - изотермические модули упругости 2го и 3го порядка соответственно, а $\varepsilon_{ij} = \frac{\partial s_i}{\partial x_j}$. При подстановке тензора деформаций ε_{ij} и решения в виде $s(\vec{r}, t) = \vec{e} \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$, где \vec{e} - вектор поляризации, \vec{k} - волновой вектор, ω - циклическая частота колебаний, итоговое уравнение запишется:

$$\rho \omega e_i = \sum_k T_{ik}(\vec{k}) e_k + \sum_{k,m} T_{ikm}(\vec{k}) e_k e_m, \quad (2)$$

где матрицы $T_{ik}(\vec{k})$ и $T_{ikm}(\vec{k})$ определяются как $T_{ik}(\vec{k}) = \sum_{j,l} C_{ij,kl} k_j k_l$, $T_{ikm}(\vec{k}) = \sum_{j,l,n} C_{ij,kl,mn} k_j k_l k_n$.

Итоговое уравнение записано в приближении $|\vec{k}| \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$, что соответствует длинноволновому приближению.

При решении системы уравнений (2) мы рассматриваем случай малых колебаний и не касаемся проблемы неустойчивости. Для кристалла кубической сингонии, характеристики которого определяются следующими упругими постоянными в индексации Фойгта: C_{11} , C_{12} , C_{44} , C_{111} , C_{112} , C_{123} , C_{144} , C_{456} , приведем решение для направления $(\vec{k}(k_1, 0, 0))$, в направлении которого распространяются три волны: продольная со скоростью $V_1 = \sqrt{(C_{11} + (C_{111} + 2C_{144})k_1) / \rho}$, и две поперечные со скоростями $V_{2,3} = \sqrt{(C_{44} + 2C_{144}k_1) / \rho}$.

Теория зеркального отражения рентгеновских лучей в условиях скользящей дифракции от многослойных поверхностных структур

Орешко Алексей Павлович

Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова

Бушуев Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н. профессор

oreshko@mail.ru

Дифракция рентгеновских лучей на кристаллических плоскостях, почти перпендикулярных поверхности, в условиях скользящего падения широко используется в последние годы для диагностики приповерхностных слоев монокристаллов [1]. Так как падающий и дифрагированный пучки составляют малые углы с поверхностью, близкие к области полного внешнего отражения, то глубина проникновения излучения в кристалл из-за эффекта зеркального отражения (ЗО) резко уменьшается, что позволяет исследовать ультратонкие слои и пленки с толщиной на уровне 1-10 нм и больше.

Основное внимание во всех работах по данной теме уделялось анализу лишь дифракционного отражения рентгеновских лучей и совершенно не исследовалась угловая зависимость интенсивности зеркального отражения. Авторы многочисленных работ по этой проблеме изучали в основном влияние зеркального отражения на процесс дифракции и оставили без внимания другой не менее интересный эффект – влияние дифракции на зеркальное отражение. Вместе с тем, как было кратко отмечено в [2], а затем подробно рассмотрено теоретически [3] и впервые обнаружено экспериментально [4], угловое поведение ЗО в области дифракции при фиксированном угле скольжения заметным образом зависит от наличия и толщины ультратонкой аморфной пленки на поверхности.

В настоящей работе в двухволновом приближении теории дифракции на основе рекуррентных соотношений нового типа построена теория зеркального отражения от многослойных аморфных и кристаллических структур в условиях скользящей брэгговской дифракции рентгеновских лучей и показана высокая чувствительность кривых зеркального отражения к параметрам неоднородных аморфных пленок и многослойных аморфных и кристаллических периодических структур.

В случае многослойной аморфной пленки полученные рекуррентные соотношения являются обобщением хорошо известной формулы Паррата. На (рис.1) показаны угловые зависимости ЗО от периодической многослойной структуры (МС) Si/C , состоящей из чередующихся аморфных слоев с толщинами $d_1 = 1.5$ нм и $d_2 = 3$ нм, на кремниевой подложке (отражение $\text{Si}(220)$, CuK_α -излучение) от угла скольжения φ_0 (a) и угловой отстройки от точного угла Брэгга $\Delta\theta$ (b) при фиксированном угле $\varphi_0 = 40'$ (b). Число бислоев $N = 10$ – сплошные линии 1, $N = 11$ – штриховые линии 2. Видно, что традиционные кривые ЗО $P_S(\varphi_0)$ практически не меняются (рис. 1a), тогда как форма кривых $I_S(\Delta\theta)$ кардинально изменяется даже при увеличении числа слоев всего лишь на один бислой (рис. 1b).

В случае многослойной кристаллической пленки полученные рекуррентные соотношения для определения коэффициента дифракционного отражения являются новым типом рекуррентных соотношений и, в отличие от формул Дарвина и Колпакова, позволяют вычислять амплитуды волн во всех слоях. Рекуррентные соотношения для амплитудных коэффициентов зеркального отражения являются модификацией формулы Паррата на случай ЗО от кристаллических слоев в условиях дифракции.

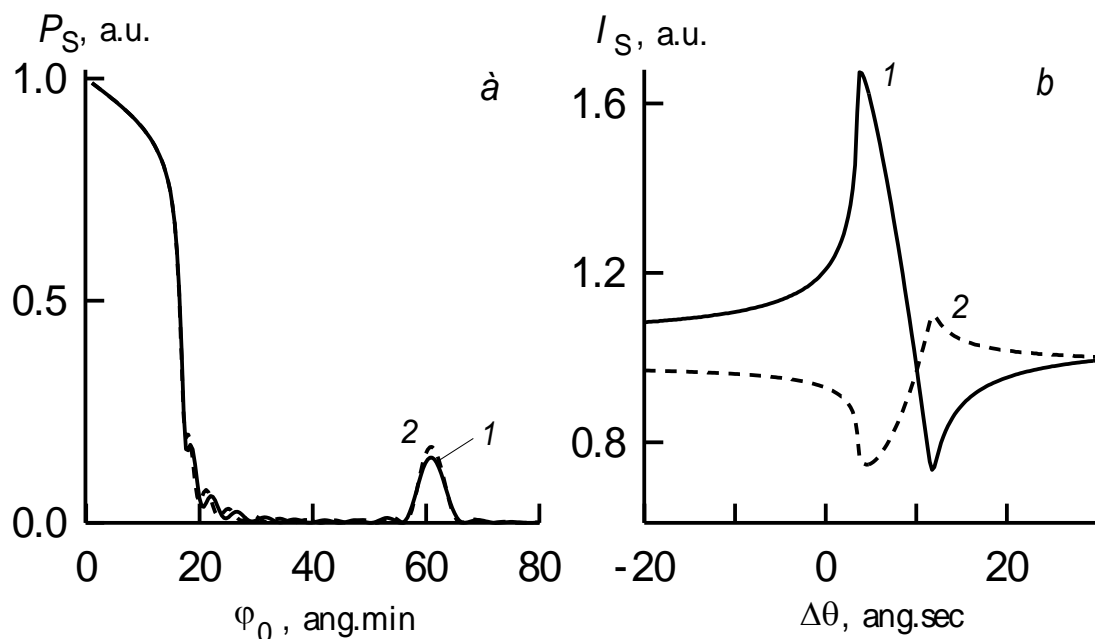


рис. 1

Развитая теория позволяет анализировать зеркальное отражение от произвольной МС с любыми профилями поляризуемости, деформации и фактора аморфизации кристаллических слоев. Простейшим случаем МС является бикристалл ($N = 1$). В случае тонких пленок кривые дифракционного отражения практически не отличаются от кривых дифракционного отражения для подложки. В то же время даже незначительное изменение толщины тонкой пленки ($\sim 0.1-1$ нм) и/или ее деформации приводит к очень сильному изменению формы кривых ЗО $I_S(\Delta\theta)$ в области дифракции от подложки.

Таким образом, в настоящей работе показано, что метод зеркального отражения рентгеновских лучей в условиях скользящей брэгговской дифракции обладает высокой чувствительностью и может быть использован для исследования тончайших (доли и единицы нанометров) переходных слоев и аморфных и кристаллических структур с изменяющимися по глубине параметрами.

Список публикаций:

- [1] Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. Москва, Наука. 1989. 152 с.
- [2] Афанасьев А.М., Имамов Р.М. Кристаллография, 40, N 3, 446-460 (1995).
- [3] Бушуев В.А., Орешко А.П., ФТТ, 43,5, 906-912 (2001).
- [4] Бушуев В.А., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х., Орешко А.П., Кристаллография, 46, N 6, 991-999 (2001).

Закономерности строения валентной зоны дисилицидов группы железа

Переславцева Наталья Сергеевна

Воронежский государственный университет

*Юраков Юрий Алексеевич, д.ф.-м.н.; Курганский Сергей Иванович, д.ф.-м.н.
phssd18@main.vsu.ru*

Среди множества материалов, применяемых в современных технологиях микро- и нанoeлектроники, силициды переходных металлов занимают особое положение, что обусловлено разнообразием электронных и кристаллических свойств этих соединений. Электронное строение дисилицидов группы железа NiSi_2 , CoSi_2 , $\alpha\text{-FeSi}_2$ и $\gamma\text{-FeSi}_2$ всегда вызывало большой научный интерес. Это объясняется, во-первых, активным использованием NiSi_2 , CoSi_2 и $\alpha\text{-FeSi}_2$ в изделиях микроэлектроники и, во-вторых, противоречивыми данными о свойствах γ -фазы дисилицида железа. Так, в частности, за последнее десятилетие сформировалось два противоречивых мнения о $\gamma\text{-FeSi}_2$: 1) эта фаза крайне нестабильна как в объемном, так и в пленочном варианте реализации [1]; 2) тонкую пленку такого материала можно стабилизировать, при этом на атомах железа будет существенный магнитный момент [2]. Дополнительным стимулом проведения исследования электронного строения этих материалов стал тот факт, что NiSi_2 , CoSi_2 и $\gamma\text{-FeSi}_2$ имеют одинаковую кристаллическую структуру типа CaF_2 , что позволяет установить закономерности строения их валентной зоны в зависимости от величины параметров решетки и числа валентных электронов металла.

В данной работе мы представляем результаты расчета плотностей электронных состояний (ПЭС), рентгеновских эмиссионных и фотоэлектронных спектров как для объемных, так и для пленочных фаз дисилицидов группы железа. Расчет проводился в рамках линейного метода присоединенных плоских волн.

Сопоставление экспериментально полученных данных с результатами теоретического расчета электронного строения валентной зоны дисилицидов группы железа, что позволило обнаружить ряд закономерностей и сделать следующие выводы:

1. Валентная зона формируется преимущественно d -состояниями металла и s -, p -состояниями кремния.

2. Форма и энергетическое положение главных особенностей ПЭС атомов объемного образца и атомов внутренних слоев пленки одного материала практически совпадают.

3. Большая плотность состояний на уровне Ферми (E_F) в случае $\gamma\text{-FeSi}_2$ говорит о нестабильности этого соединения как в объемном, так и в пленочном виде.

4. На атомах железа в дисилицидах железа отсутствует магнитный момент.

5. Для атомов кремния $L_{2,3}$ -спектры обусловлены преимущественно s -состояниями. Вклад d -состояний кремния в спектр в явном виде проявляется в качестве небольшого пика при энергии 3.2, 2.3 и 3.5 eV ниже E_F для NiSi_2 , CoSi_2 и $\gamma\text{-FeSi}_2$, соответственно. В $L_{2,3}$ -спектрах атомов кремния $\alpha\text{-FeSi}_2$ эта особенность отсутствует, что, по-видимому, объясняется отличием кристаллической решетки α -лебоита от структурного типа CaF_2 , характерного для остальных дисилицидов группы железа.

6. При переходе от объемного образца к пленочному для $L_{2,3}$ -спектров атомов кремния NiSi_2 , CoSi_2 и $\alpha\text{-FeSi}_2$ наблюдается увеличение интенсивности пика в прифермиевской области (около 0.5 eV ниже E_F). Эта трансформация обусловлена перетеканием заряда от атомов кремния к атомам металла. Механизм подобного процесса подробно описан нами ранее [3]. Ослабление этого эффекта при прохождении ряда дисилицидов от NiSi_2 до $\alpha\text{-FeSi}_2$ связано с уменьшением числа валентных электронов, приходящихся на элементарную ячейку. Отсутствие такой трансформации в случае с $\gamma\text{-FeSi}_2$ объясняется тем, что этот эффект, по-видимому, является одной из характеристик только стабильных фаз дисилицидов группы железа.

7. Структура фотоэлектронных спектров дисилицидов при малых значениях энергии возбуждения обусловлена d -состояниями металла и s -, p -состояниями кремния. С увеличением энергии возбуждения вид спектров определяется практически только d -состояниями металла.

Список публикаций:

[1] N.E. Christensen. *Phys. Rev.* B42, 7148 (1990).

[2] N. Onda, J. Henz, E. Muller, K.A. Mader, H. von Kanel. *Appl. Surf. Sci.* 56/58, 421 (1992).

[3] Н.С. Переславцева, С.И. Курганский. *ФТТ*, 41, 11, 2075 (1999).

Информодинамические и фрактальные характеристики

квазикристаллических структур

Полянский Дмитрий Александрович

Дальневосточный Государственный Университет

Юдин Виталий Витальевич, д.ф.-м.н.

tata@ifit.phys.dvgu.ru

Первоначально в ФТТ рассматривалось 2 крайних типа упорядочения – кристаллографическое упорядочение и аморфное разупорядочение. При этом в классической кристаллографии в качестве моделей кристаллов рассматривались периодические покрытия – мозаики или паркетты. В начале 70-х годов Кавамура предложил в качестве модели аморфного разупорядочения мозаику, состоящую из равносторонних треугольников и квадратов.

В 1984 году группой Шехтмана на основе сплава AL86MN14 был открыт новый класс объектов с дальним порядком взаимодействия и симметрией 5-го порядка. Эти объекты были названы квазикристаллами. Потом обнаружили квазикр. 7-го и более высоких порядков. В это же время Маккей выдвинул гипотезу о том, что должны существовать апериодические покрытия, моделирующие структуру квазикристаллов. В частности, для квазикр. 5-го порядка такими моделями принято считать мозаики Пенроуза. Моделями квазикр. более высоких порядков считаются мозаики Дюно – Каца (МДК).

Если к вышеперечисленным моделям добавить кристаллографические решетки, то можно говорить о своеобразной обобщённой кристаллографии, в рамках которой возникает проблема создания математического аппарата, позволяющего описывать и сравнивать между собой различные структуры. Такой аппарат был создан на основе теории графов и информодинамики. Обобщённые решётки рассматриваются как сеточные структуры, состоящие из ячеек и отношений смежности между ними. Адекватным отображением, где в явном виде представлены обе компоненты, являются древесные графы Кейли. Ячейки сетки отображаются вершинами графа, отношения смежности – связями, рёбрами графа. На полученных деревьях строятся перечисляющие полиномы, которые переводятся в вероятностную форму, определяются информодинамические характеристики (ИДХ), и изучается их перколяция по уровням ДК для расширяющегося и коллапсирующего дерева. За основную идх принимается Энтропия Вайда (H_V). Определяя коэфф. структурированности структуры, можно судить о степени её разупорядочения.

Задачей данной работы являлось исследование ИДХ мозаики Дюно –Каца 8-го порядка (МДК8) и мозаики Кавамуры (МК), а так же их сравнение с МДК 6,7,12-го порядков, мозаикой Пенроуза (МП), металлическими стёклами (МС) и кварцевыми стёклами (КС)..

МДК 8 в отличие от МК имеет явные упорядоченные фрагменты. Исходя из этого можно ожидать, что и на уровне ИДХ она будет более упорядоченной, чем МК.

В результате исследования выяснилось, что обе мозаики характеризуются высоким уровнем энтропии и МК является более упорядоченной с точки зрения перколяции ИДХ, чем МДК ($\bar{H}_V = 0.82 \pm 1.5\%$ $\eta = 1.4\%$ для мозаики Дюно-Каца 8-го порядка и $\bar{H}_V = 0.76 \pm 5\%$ $\eta = 7.68\%$ для мозаики Кавамуры).

Сравнивая эти ИДХ с полученными ранее для МДК 6, 7,12-го порядков, МП, МС, КС можно сделать вывод, что МДК высоких порядков более разупорядоченные, и эти структуры следует считать квазистохастическими, а не квазикристаллическими.

Как упоминалось выше, мозаики являются сеточными структурами, состоящими из ячеек сетки и отношений, связей между ними и их адекватным отображением являются древесные графы Кейли.

Если рассматривать строение самих древесных графов, можно заметить, что на каждом уровне иерархии дерево Кейли состоит из отдельных кустов, которые в свою очередь являются древесными графами. С этих позиций дерева Кейли можно считать фрактальными объектами. Мандельброт ввёл понятие фрактала как, структуры, состоящая из частей, которые в каком-то смысле подобны целому.

. Так как ДК обладает полярной геометрией, то все его свойства можно рассматривать в тангенциальном и радиальном направлениях. Как было показано в диссертации Т.А. Писаренко, на древесных графах можно рассматривать 4 типа фрактальных размерностей:

$$\text{Стримерное представление} \quad d_{fr}^{sr}(m) = \frac{\ln \sum_{i=1}^m k_i}{\ln m} \quad (1)$$

$$\text{Скорлупа Мандельброта} \quad d_{fr}^M = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\ln L}{\ln i} \quad (2)$$

$$\text{Тангенциальная фрактальность} \quad d_{fr}^k(i) = \frac{1}{K \ln(i+1)} \sum_k \frac{\ln(a_k+1)}{\ln(k+1)} \quad (3)$$

$$\text{Шенноновская фрактальность} \quad d_{fr}^{sh} = \frac{H_{sh}}{\ln(i+1)} \quad (4)$$

Поскольку скорлупы Мандельброта являются обобщением волновых фронтов, а стримеры – обобщением лучей, эти два представления являются дуальными, дополнительными. Тогда, как было доказано в диссертации Писаренко Т.А., общая фрактальная размерность ДК определяется как прямая сумма этих двух представлений.

Наша задача состояла в расчёте фрактальных характеристик ДК для мозаик Кавамуры и Дюно – Каца 6, 7, 8, 12 порядков, а также в сравнении их с рассчитанными ранее результатами для кварцевых и металлических стёкол.

В результате наших исследований мы выяснилось, что полная фрактальная размерность колеблется около 3-х, притом что исходные паркеты являются планарными объектами. Это позволяет считать данные структуры объектами сверхперколирующего типа, т.е. их топологическая размерность ниже размерности пространства, в котором «живут» все перколяционные, информационные процессы.

Кроме того, нами была исследована зависимость полной фрактальной размерности рассматриваемых объектов от коэффициента их структурированности В результате оказалось, что получившуюся зависимость можно разбить на квазикристаллический и аморфный кластеры. Причём поведение аморфного кластера даёт возможность предположить, что с дальнейшим ростом порядка симметрии квазикристаллической структуры он плавно перейдёт в аморфный, что совпадает с нашим предположением.

Термодинамика кристаллов с учетом ангармонизма

Силинин Антон Владимирович

Кемеровский Государственный Университет

Поплавной Анатолий Степанович, профессор, д. ф.-м. н.

wanderer81@mail.ru

К настоящему времени в литературе накоплен достаточно обширный материал по физическим, физико-химическим свойствам и практическому применению термодинамически лабильных соединений и, в частности, нитратов щелочных металлов и других оксианионных соединений со сложным анионом. Оксиданионные соединения широко применяются в качестве окислителей твердотопливных установок, компонентов теплоаккумулирующих составов. В качестве характерного примера можно привести реакцию горения NaN_3 с окислителем из $NaNO_3$. Основными процессами, определяющими такого рода приложения, являются радиационное и термическое разложения.

Эти соединения характеризуются аномальной температурной зависимостью упругих постоянных и зависимостью коэффициента теплового расширения от температуры, что приводит к необходимости рассмотрения термодинамики этого кристалла с учетом ангармонизма.

В данной работе получены термодинамические соотношения с учетом ангармонизма путем разложения свободной энергии F в ряд по тензорам деформации ε_{ij} и изменению температуры θ с точностью до членов третьего порядка. Получены выражения для внутренней энергии, энтропии, теплоемкостей при постоянном объеме и давлении, коэффициентов теплового расширения, найдена связь между деформацией кристалла и изменением температуры для адиабатических процессов. Приведем некоторые из этих выражений:

1. Свободная энергия:

$$F = F_0 + F_T \theta + \frac{1}{2} F_{TT} \theta^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{T,ij} \varepsilon_{ij} \theta + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} F_{ij,kl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \frac{1}{6} F_{TTT} \theta^3 + \frac{1}{6} \sum_{i,j} F_{TT,ij} \varepsilon_{ij} \theta^2 + \\ + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l} F_{T,ij,kl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \theta + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} F_{ij,kl,mn} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} .$$

2. Связь тепловых расширений с температурой:

$$\varepsilon_{ij}^{мен.л} = \alpha_{ij}^{(0)} \theta + \frac{1}{2} \alpha_{ij}^{(1)} \theta^2 ,$$

где коэффициенты теплового расширения $\alpha_{ij}^{(0)}$ и $\alpha_{ij}^{(1)}$ выражаются через упругие постоянные следующим образом:

$$\alpha_{ij}^{(0)} = -\frac{1}{2} \sum_{k,l} F_{ij,kl}^{-1} F_{T,kl} ,$$

$$\alpha_{ij}^{(1)} = -\frac{1}{3} \sum_{k,l} F_{ij,kl}^{-1} F_{TT,kl} + \frac{1}{6} \sum_{k,l,m,n,p,q} F_{ij,kl}^{-1} F_{T,kl,mm} F_{mm,pq}^{-1} F_{T,pq}.$$

3. Внутренняя энергия:

$$U = U_0 - \frac{1}{2} F_{TT} \theta^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} F_{ij,kl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - \frac{1}{3} F_{TTT} \theta^3 - \frac{1}{6} \sum_{i,j} F_{TT,ij} \varepsilon_{ij} \theta^2 + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l,m,n} F_{ij,kl,mm} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} - T \left(F_{TT} \theta + \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{T,ij} \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} F_{TTT} \theta^2 + \frac{1}{3} \sum_{i,j} F_{TT,ij} \varepsilon_{ij} \theta + \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l} F_{T,ij,kl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \right).$$

4. Энтропия:

$$S = S_0 - F_{TT} \theta - \frac{1}{2} \sum_{i,j} F_{T,ij} \varepsilon_{ij} - \frac{1}{2} F_{TTT} \theta^2 - \frac{1}{3} \sum_{i,j} F_{TT,ij} \varepsilon_{ij} \theta - \frac{1}{6} \sum_{i,j,k,l} F_{T,ij,kl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}.$$

Во всех приведенных выше соотношениях центральную роль играют упругие постоянные второго и третьего порядка. Имеется достаточно большое количество экспериментальных данных по ангармоническому поведению кристалла $NaNO_3$, принадлежащего к ромбоэдрической сингонии. Поэтому были найдены также все независимые упругие постоянные второго (6 штук) и третьего порядка (14 штук) для данной сингонии и получены соотношения, связывающие с ними остальные упругие постоянные второго и третьего порядка.

В качестве независимых были взяты следующие упругие постоянные:

1) 2-го порядка: $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{14}, C_{33}, C_{44}$;

2) 3-го порядка: $C_{111}, C_{112}, C_{113}, C_{114}, C_{123}, C_{124}, C_{133}, C_{134}, C_{144}, C_{155}, C_{222}, C_{333}, C_{344}, C_{444}$.

Остальные отличные от нуля упругие постоянные будут выражаться через них следующим образом:

1) 2-порядка:

$$C_{22} = C_{11}, \quad C_{55} = C_{44},$$

$$C_{23} = C_{13}, \quad C_{56} = C_{14},$$

$$C_{24} = -C_{14}, \quad C_{66} = \frac{1}{2} C_{11} - \frac{1}{2} C_{12};$$

2) 3-го порядка:

$$C_{122} = C_{111} + C_{112} - C_{222}, \quad C_{256} = \frac{1}{2} C_{114} - \frac{1}{2} C_{124},$$

$$C_{156} = \frac{1}{2} C_{114} + \frac{3}{2} C_{124}, \quad C_{266} = \frac{1}{2} C_{111} - \frac{1}{4} C_{112} - \frac{1}{4} C_{222},$$

$$C_{166} = -\frac{1}{2} C_{111} - \frac{1}{4} C_{112} + \frac{3}{4} C_{222}, \quad C_{355} = C_{344},$$

$$C_{223} = C_{113},$$

$$C_{356} = C_{134},$$

$$C_{224} = -C_{114} - 2C_{124},$$

$$C_{366} = \frac{1}{2}C_{113} - \frac{1}{2}C_{123},$$

$$C_{233} = C_{113},$$

$$C_{455} = -C_{444},$$

$$C_{234} = -C_{134},$$

$$C_{456} = -\frac{1}{2}C_{144} + \frac{1}{2}C_{155}$$

$$C_{244} = C_{155},$$

$$C_{466} = C_{124}.$$

$$C_{255} = C_{144},$$

Полученные соотношения были использованы нами для описания ангармонических эффектов в кристалле $NaNO_3$.

Задача Изинга на древесно-графовых решетках

Старцев Евгений Сергеевич

Дальневосточный государственный университет

Юдин Виталий Витальевич, д.ф.-м.н.

tata@ifit.phys.dvgu.ru

Вершины k -дольного древесного графа Кейли обладают спином, состояние которого равно $+1$ и -1 , состояние спина передается вершинам следующей иерархии с помощью связей от центра к периферии. Спин элемента принимает состояние в зависимости от функции переключения. Для всех элементов функция одинакова и может принимать только два значения: $+1$, -1 и имеет вид:

$$S = \sum_k S_i + \sum_k S_{i-1} + \dots + \sum_k S_{i-m} + f(0, x) \quad \text{где } S \text{ – состояние спина, } k \text{ – количество входов, } i \text{ – номер такта, } f(0, x) \text{ – дополнение.}$$

$$f(0, x) = \begin{cases} 0, & \sum_k S_i + \dots + \sum_k S_{i-m} \neq 0 \\ 1, & \sum_k S_i + \dots + \sum_k S_{i-m} = 0 \\ -1, & \sum_k S_i + \dots + \sum_k S_{i-m} = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \text{случайно выбирается число от } 0 \text{ до } \\ x, \text{ и если выпало } < x/2 \\ \text{случайно выбирается число от } 0 \text{ до } \\ x, \text{ и если выпало } \geq x/2 \end{cases}$$

Корневой элемент, не имеющий входов, с неоднозначными выходами, случайным образом, для каждого выхода, в следующий момент, отсчитываемый тактовыми сигналами часового механизма, приписывает значение либо $+1$ либо -1 . Все выходы остальных элементов принимают значения в зависимости от спина их элемента.

1, то элементы со значениями спина равным -1 займут некоторую область на дереве, и если затем начнут выпадать +1, то элементы со значениями -1 перейдут не сразу в противоположное состояние, а начнут вытесняться к периферии дерева с течением времени.

б. Сценарии поведения спин-ассоциаций рассматривались на виртуальных деревьях. Под правильными деревьями мы понимаем, способность графа отражать реальную сеточную структуру, либо ее можно построить по данному графу. Проводя аналогии нашей работы с критическими системами можно говорить, что с увеличением количества связей в древесных графах, они становятся суперкритичными. Это можно измерить с помощью отношения: количество всех элементов сети деленное на количество всех связей. Когда полученное значение превышает некоторый критический минимум, то достаточно возмущения любого элемента первого уровня что бы по всей сети прошли изменения состояний спинов. Можно говорить что граф суперкритичен. Если память элементов не велика, то все элементы дерева будут менять свои состояния циклически. Причем время смены состояний у суперкритичных деревьев меньше чем у других.

В целом с макроскопической точки зрения поведение структуры можно охарактеризовать стохастическими процессами в нейроподобных, квазислучайных сетях, то есть существует несколько сценариев стохастического поведения нейроподобных систем в зависимости от внешних условий. Работа данного направления может найти применение в теории фазовых переходов на обобщенных решеточных системах, в численном моделировании эволюционных процессов, в теории ассоциативных, когнитивных систем.

Влияние изменений локальной симметрии на электронную структуру высоко- и низкотемпературной фаз Ca_2RuO_4 .

Сергей Владимирович Стрельцов

Данила Евгеньевич Кондаков

Игорь Александрович Некрасов

Владимир Ильич Анисимов

Уральский Государственный Технический Университет

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.

Streltsov@optics.imp.uran.ru

В настоящей работе был проведен детальный анализ кристаллической структуры обеих фаз на основе имеющихся экспериментальных данных [3]. Также было проведено исследование электронной структуры соединения Ca_2RuO_4 в обеих фазах в зависимости от изменения локальной симметрии. Расчет электронной структуры, как для низко-, так и для высокотемпературной фазы проводился в приближении локальной электронной плотности (Local Density Approximation) с использованием базиса линеаризованных “маффин-тин” орбиталей (Linearized Muffin-Tin Orbitals).

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в соединении La_2CuO_4 , легированным Sr дало новый толчок к изучению оксидов переходных металлов, как систем с сильными электрон-электронными кулоновскими корреляциями. В 1994 г. Маено и др. была обнаружена слабая сверхпроводимость ($T_C=1.35\text{K}$) в изоструктурной La_2CuO_4 системе Sr_2RuO_4 [1]. Особенность системы Sr_2RuO_4 заключается в том, что это единственный сверхпроводник, обладающий структурой слоистого перовскита и не содержащий ионов меди. Система Sr_2RuO_4 является нетрадиционным триплетным сверхпроводником [2]. Недавно для более детального анализа эффектов, происходящих в системе Sr_2RuO_4 , была экспериментально исследована серия изоэлектронных сплавов $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ [3] и было предложено ее теоретическое описание [4]. В 2001 г. экспериментально был обнаружен переход металл-изолятор в соединении Ca_2RuO_4 при изменении температуры. В низкотемпературной фазе ($T=180\text{K}$) это вещество является антиферромагнитным изолятором, а в высокотемпературной ($T=400\text{K}$) парамагнитным металлом [3].

Основным элементом кристаллической структуры в обеих фазах являются RuO_6 – октаэдры. В октаэдрическом кристаллическом поле d -зона расщепляется на трехкратно вырожденную t_{2g} и двукратно вырожденную e_g подзоны. Физические свойства систем определяются частично заполненной t_{2g} подзоной (см. нижнюю часть вставок на рис.1 и рис.2). t_{2g} подзона состоит из xy , xz и yz орбиталей, каждая из которых имеет двукратное спиновое вырождение. Благодаря орторомбической симметрии, xy орбиталь t_{2g} зоны неэквивалентна xz , yz орбиталям (рис. 1).

Ca_2RuO_4 в обеих фазах имеет пространственную группу симметрии $Pbca$. С повышением температуры происходят следующие изменения локальной симметрии:

1. Увеличение угла наклона RuO_6 - октаэдров от оси z в направлении 110 с 5.8° до 10.5°
2. Уменьшение угла разворота октаэдров вокруг оси z с 12.6° до 11.6°
3. Искажение основания кислородного октаэдра от прямоугольной формы к параллелограмму.

Уменьшение угла $\text{Ru-O}_{\text{плоск.}}\text{-Ru}$ за счет разворота октаэдров приводит к уменьшению гибридизации $2p$ зоны O и $4d-t_{2g}$ подзоны Ru. Что объясняет наблюдаемое (рис.1) уменьшение ширины t_{2g} подзоны с 2.6 эВ до 2.25 эВ в высоко- и низкотемпературной фазе соответственно. Снятие вырождения между xz и yz орбиталями, наблюдаемое в низкотемпературной фазе (рис. 1), объясняется типом искажений, описанных в п.3.

В данной работе произведен расчет электронной структуры высоко- и низкотемпературных фаз соединения Ca_2RuO_4 . На основе детального изучения кристаллической структуры обеих фаз предложено объяснение изменения их электронной структуры. Тем не менее в приближении локальной электронной плотности не удалось описать антиферромагнитный изолятор для

низкотемпературной фазы. Дальнейшие исследования данной системы необходимо проводить методами в явном виде учитывающими электронные кулоновские корреляции, которые несомненно важны для понимания физики данных соединений.

Благодарим профессора Фольхарда за предоставленную возможность проведения расчетов в вычислительном центре института Корреляций и магнетизма Университета г. Аугсбург (Германия).

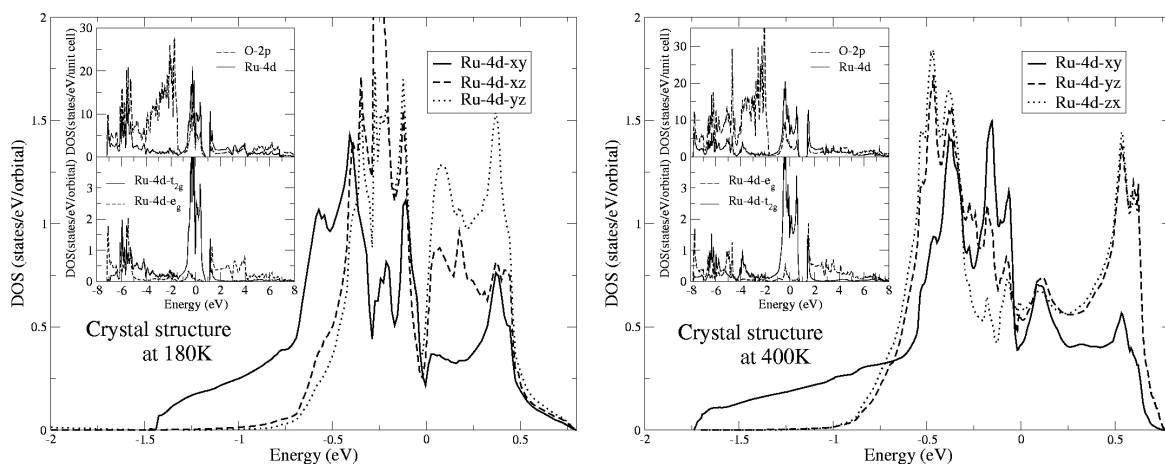


Рис. 1 $Ru-4d-t_{2g}$ парциальные плотности состояний Ca_2RuO_4 . Слева для кристаллической структуры соответствующей $T=180K$, справа – $T=400K$. На верхней вставке плотности $O-2p$ и $Ru-4d$ состояний. На нижней – парциальные (t_{2g} и e_g) плотности $Ru-4d$ состояний. Ноль по шкале энергии соответствует уровню Ферми.

Список публикаций:

- [1] Y. Maeno, H.Hashimoto, K.Yoshida, S.Nishizaki, T.Fujita, J.G. Bednorz, and F.Lichtenberg, *Nature (London)* v. 372, 532 (1994.)
- [2] K. Ishida, H.Mukuta, Y.Kitaoka, K. Asayama, Z.Q. Mao, Y. Mori, and Maeno, *Nature*, v. 396, 658(1998)
- [3] O. Friedt, M. Braden, G. Andrü, P. Adelman, S. Nakatsuji, and Y. Maeno *Phys. Rev. B* 63, 174432 (2001)
- [4] V.I. Anisimov, I.A. Nekrasov, D.E. Kondakov, T.M. Rice, and M. Sigrist *cond-mat/0107095*

Электронная структура атома в модели псевдопотенциала

Федоров Дмитрий Георгиевич

Кемеровский государственный университет

Журавлёв Юрий Николаевич, к.ф.-м.н.

Mitya00@rambler.ru

Для ряда задач моделирования зонной структуры твердых тел требуется знание волновых функций атома в основном и возбужденном состоянии.

Наиболее простым методом является решение уравнения Шрёдингера, где в качестве потенциала используется псевдопотенциал. Нами используется псевдопотенциал предложенный в [1]

$$\hat{V}_l^{ion} = \hat{V}_{core}(r) + \Delta\hat{V}_l^{ion}, \quad (1)$$

где

$$\hat{V}_{core}(r) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 c_i^{core} \operatorname{erf}[(a_i^{core})^{1/2} r] \right], \quad (2)$$

$$\Delta\hat{V}_l^{ion}(r) = \sum_{i=1}^3 (A_i + r^2 A_{i+3}) e^{-a_i r^2}. \quad (3)$$

Параметры псевдопотенциала найдены в [1] для всех элементов периодической системы. Расчёт электронной структуры атомов производился в предположении, что числа заполнения соответствующих квантовых состояний атома являются свободными параметрами, которые определены нами из подгонки под известные значения энергетических уровней атомов [2].

В результате произведенных вычислений определены энергии и волновые функции занятых и возбужденных состояний атомов II и III группы Периодической системы элементов Д.И. Менделеева. Полученные значения атомных уровней находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными

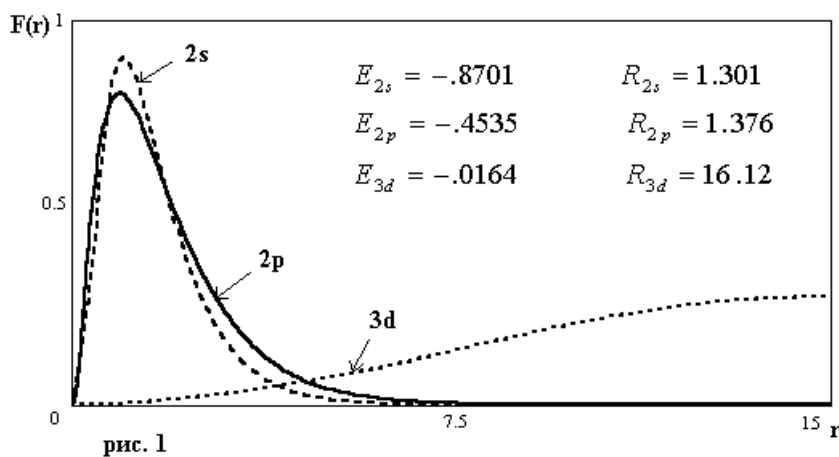


рис. 1

На рис. 1 приведены волновые функции $F(r)$, энергии E_i (ат.ед), средние радиусы R_i (Å) для атома азота, рассчитанные в конфигурации $2s^2 2p^{2.5} 3d^{0.5}$. Все полученные результаты сведены в электронную таблицу, удобную для использования.

Список публикаций:

[1] Bachellet G.B., Haman D.R., Shluter M. 26, 4199-4228 (1982)

[2] Радциг А.А., Смирнов А.А. Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат (1986)

Оценки ГЭП на ядрах меди в клокманните CuSe.

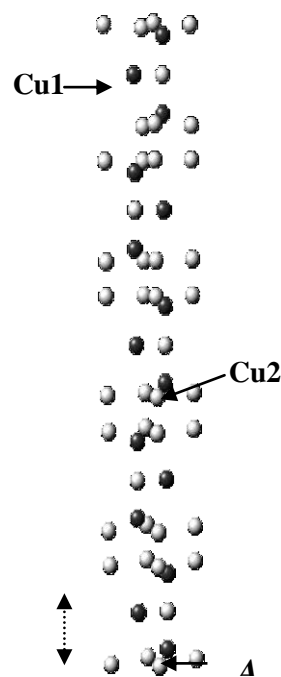
Хакимов Константин Юнусович,

Матухин Вадим Леонидович, Погорельцев Александр Ильич, Невзоров Николай Александрович,
Матухина Лия Евгеньевна

Казанский Государственный Университет

Матухин Вадим Леонидович, д.ф.-м.н, профессор
stenci@mail.ru

CuSe (клокманнит) проявляет ярко выраженные полупроводниковые свойства и является весьма известным соединением. В то же время необходимо отметить, что его кристаллическая структура до сих пор детально не расшифрована. В первом приближении она считается подобной структуре ковеллина: пространственная группа $C6_3/mms$, тот же слоистый мотив ABA , две строительные единицы – тригональные группы $CuSe_3$ и тетраэдры $CuSe_4$, радикалы Se_2^{-2} . Но в дифракционной картине клокманнита обнаруживаются дополнительные рефлексы, которые объясняются проявлением сверхпериодичности кристалла в плоскости ab . Ранее нами были выполнены ЯКР $^{63,65}Cu$ исследования соединения CuSe, полученного пиросинтезом из элементарных Cu и Se. Дифрактограмма синтезированного соединения соответствовала эталону, оптические свойства в целом совпадали с опубликованными. Можно было бы ожидать, что в клокманните, как и в изоморфном ему ковеллине, имеется всего два неэквивалентных положения меди: Cu1 (тригональное окружение $CuSe_3$) и Cu2 (медь в тетраэдрическом окружении $CuSe_4$), что приводило бы к наличию двух частот ЯКР ^{63}Cu . Однако, при температуре 4.2К в ЯКР спектре клокманнита были обнаружены 13 ЯКР ^{63}Cu линий: 12.17, 11.89, 9.49, 9.39, 8.27, 6.60, 6.50, 4.49, 4.01, 3.75, 3.29, 2.83, 2.09 МГц. Такое различие в распределении градиентов электрических полей (ГЭП) в позициях ядер меди в настоящее время не имеет однозначного объяснения. В настоящей работе нами были выполнены *ab initio* оценки ГЭП на ядрах меди для



Кластер $Cu_{15}Se^{-}$ модели с наличием слоя тетраэдрических комплексов, в которых медь несколько смещена относительно своего обычного положения (позиция А на рис. 1). Расчеты выполнялись в рамках самосогласованного неограниченного метода Хартри - Фока (SCF-LCAO-UHF) с использованием MINI базиса [1]. При проведении расчетов использовалась программа GAMESS [2]. Наибольший используемый при оценках ГЭП кластер $Cu_{15}Se^{-n}_{45}$ (в расчет принимались все 2000 электронов) приведен на рисунке. Таким образом, в рассмотрение принимались 15 позиций меди. На основе проведенных расчетов строились кривые относительного изменения ГЭП в позициях меди в зависимости от смещения атомов меди в слое А. Проводится анализ формирования ГЭП на ядрах меди от решетки и электронной оболочки атомов.

Список публикаций:

S.Huzinaga, J.Andzelm, M.Klobukowski, E.Radzio-Andzelm, Y.Sakai, H.Tatewaki
Elsevier, Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations, Amserdam 1984.
2.M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.J.Jensen, S.Koseki,
N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery J. Comput. Chem.,
1993, P.1347

Фрактальные свойства квазикристаллических симметрий.

Чуднов Павел Сергеевич

Полянский Дмитрий Алексеевич

Дальневосточный государственный университет

Юдин Виталий Витальевич, д.ф.-м.н.

pavel@dale.elektra.ru, olechka@ifit.phys.dvgu.ru

После открытия квазикристаллов, появилось много различных моделей этих объектов, базирующихся на различных мозаиках и покрытиях. Наиболее известное из них – мозаики Пенроуза. Известен целый класс мозаик высших некристаллографических симметрий 6 (бигексагон) 7, 8, 10, 12 порядков - мозаики Дюно-Каца (*рис1*).

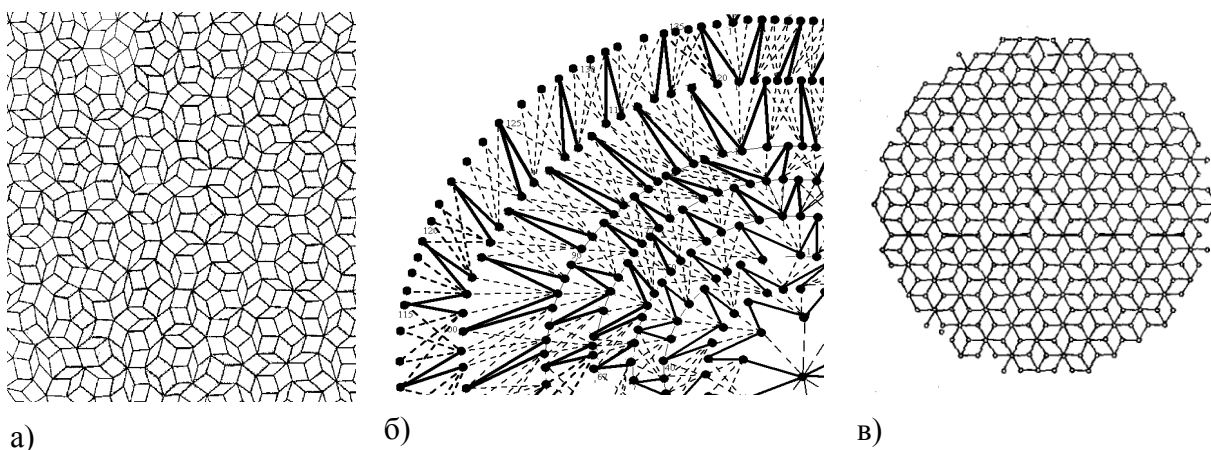


Рис1: а) Мозаика Пенроуза; б) фрагмент ДК мозаика Дюно-Каца 6 – пор.;

в) бигексагон

Представление сеточных структур в древесных графах Кейли (ДК) можно считать наиболее полным т. к. в явном виде представлена как координатная компонента, так и связи между ячейками. Поскольку ДК имеют полярную геометрию исследование можно вести в двух направлениях - центр – периферия, периферия - центр. При рассмотрении фрактальных характеристик возможны три варианта:

1. тангенциальная форма построения вероятностных мер на каждом уровне иерархии:

$$d_{fr}^t(i) = \frac{1}{K \cdot \ln(i+1)} \cdot \sum_k \frac{\ln(a_k^i + 1)}{\ln(k+1)}, \text{ где } K = \left(\sum_i a_k^i \cdot k^i \right) / \left(\sum_k a_k^i \right);$$

2. стримерное рассмотрение

$$d_{fr}^{str}(m) = \left\langle \frac{\ln \sum_{i=1}^m k_i}{\ln m} \right\rangle,$$

где m – общее число иерархий ДК (число звеньев стримера);

3. скорлупы Мандельброта: $d_{fr}^M = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{\ln L}{\ln i},$

где L – длина скорлупы Мандельброта, m – число иерархий на дереве.

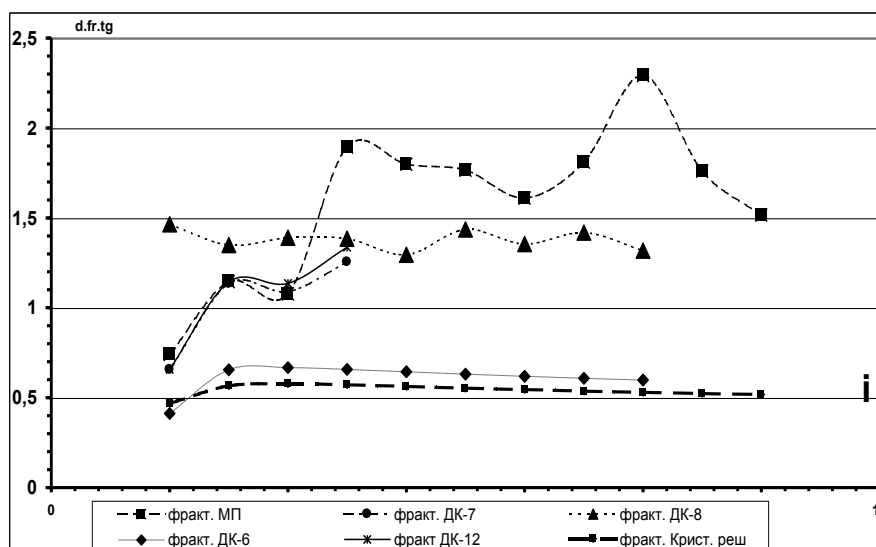


рис.2

На данных древесных структурах можно говорить о тангенциальном (рис.2) и стримерном протекании одновременно, тогда фрактальная размерность древесных структур определяется прямой суммой лучевого и волнового представлений.

структура	Мозаика Пенроуза	Мозаика Дюно-Каца			
		7	8	12	Бигексагон
d_{fr}^t	1.53	1,16	1,38	$\text{tg } \alpha = 0.568$	0,65
d_{fr}^M	1.53	1,52	1,47	1,41	1,14
d_{fr}^{str}	1.2	1,68	1,72	1,72	1,14

d_{fr}	2.73	3.2	3.19	3.13	2.28
----------	------	-----	------	------	------

Мы получили, что фрактальные размерности мозаик превышает топологическую размерность решеток ($d_T = 2$) в 1.5 – 2 раза. Следовательно, данные решеточные объекты являются фрактальными объектами со сверхперколяционными свойствами.

Список публикаций:

[1] Юдин В.В. и др. «Обобщенные решеточные системы как сверхперколирующие структуры». *Известия академии наук. Серия физическая*, 2001, том 65, №10, 1405 – 1410

[2] Юдин В.В. и др. «Случайные координационные деревья Кейли для сеточных мезоструктур кварцевых и металлических стекол». *Кристаллография*, 3(1999) т.44, 413-417.