



КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО-
ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ
Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2001

ЕЖЕГОДНИК

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2001



ЕЖЕГОДНИК

ФИЗТЕХПРЕСС

УДК 006.16(471.41)(09)+53(06)
ББК 22.3е(2)л+22.3я54(2 Рос.тат)
К14

К14 Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2001.
Ежегодник. – Казань: ФизтехПресс, 2002. 248 с.

ISBN 5-94469-002-X

Под редакцией
К. М. Салихова

Редакционно-издательский совет
В. Ф. Тарасов (председатель), В. К. Воронкова (зам. председателя), С. М. Ахмин, А. А. Бухараев,
Х. Л. Гайнутдинов, А. Р. Кессель, Л. В. Мосина, И. В. Овчинников, В. В. Самарцев,
Г. Б. Тейтельбаум, Я. В. Фаттахов, И. Б. Хайбуллин, С. К. Черников

Печатается по решению
Ученого совета Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН

В ежегоднике представлены материалы, отражающие деятельность Казанского физико-технического института имени Е. К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук за 2001 год.

Сборник включает также некоторый справочный материал по институту.

УДК 006.16(471.41)(09)+53(06)
ББК 22.3е(2)л+22.3я54(2 Рос.тат)

ISBN 5-94469-002-X

© КФТИ КазНЦ РАН, 2002
© Обложка Аксенов И.А., 2002

Ответственный редактор С. М. Ахмин
Редакторы Н. А. Карташева, Л. В. Мосина
Технический редактор С. Г. Львов

Издательство “ФизтехПресс” КФТИ КазНЦ РАН
420029, Казань, Сибирский тракт, 10/7
Лицензия № 0325 от 7 декабря 2000 года

Подписано в печать 30.05.2002
Формат 60х90/8. Бумага офсетная
Гарнитура Times. Печать офсетная
Тираж 225 экз.

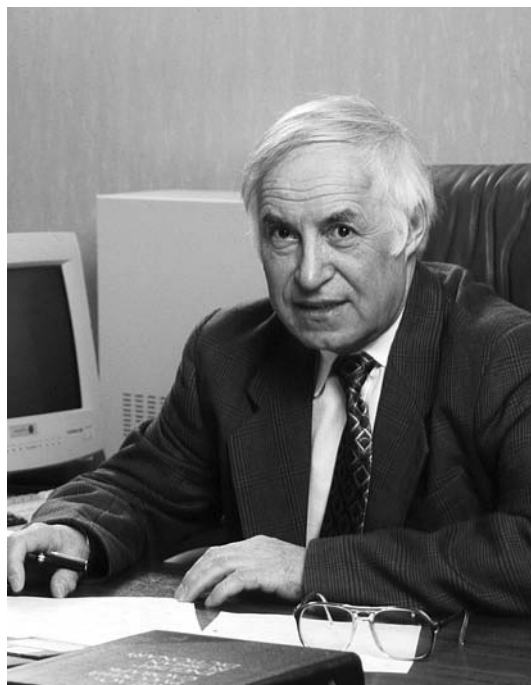
Предисловие редактора

Ученый совет нашего института решил издавать ежегодник, отражающий основные события в жизни института за год. Первый выпуск посвящается 2001 году. Может возникнуть вопрос, нужно ли это издание, ведь мы и так представляем ежегодный отчет о научно-исследовательской и научно-организационной деятельности института. Но, с одной стороны, эти отчеты хранятся в архивах и малодоступны. С другой стороны, формат официального отчета не позволяет дать полное представление обо всех значительных событиях в жизни института. Например, в отличие от отчета, в ежегоднике более полно будут отражаться не только результаты исследований, но и текущая работа научных сотрудников, незаконченные и продолжающиеся исследования, прикладные работы, итоговые конкурсы научных работ, конкурсы молодых ученых, персоналии. В ежегоднике также будет отражена работа ученых советов, вспомогательных служб института, работа научного семинара, информация о гостях института, о посещении института известными учеными и государственными деятелями, и др.

Ежегодник интересен в нескольких проекциях. Это и отчет об институте за год, это и часть летописи института. В будущем ежегодник окажет неоценимую помощь при написании истории института. Но ежегодник, несомненно, поможет и в нашей сегодняшней работе. Он поможет лучше осознать достижения и трудности в работе института.

Естественно, что первый выпуск ежегодника - особый. Формат этого выпуска является экспериментальным, в будущем он может быть изменен в соответствии с отзывами на первый выпуск. В первом выпуске при изложении результатов, полученных в 2001 году, даны иногда расширенные формулировки проблем и аннотации результатов, полученных по этой проблеме в предыдущие годы. Это позволяет ежегоднику стать самодостаточным изданием. По тем проблемам, по которым в первом выпуске дано расширенное введение, в последующих выпусках можно будет этого не делать и сосредотачиваться только на новых результатах.

В подготовке этого выпуска ежегодника принимали участие многие сотрудники института. Но я хочу особо выделить научно-организационную работу ученого секретаря института Виолеты Константиновны Воронковой. Всем, кто подготовил этот выпуск, большое спасибо. Всех физтеховцев поздравляю с рождением ежегодника института.



*К. М. Салихов
3 марта 2002*

Содержание

8	Структура института
---	---------------------

Важнейшие результаты года

11	Государственная премия Республики Татарстан
13	Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Ученым советом КФТИ КазНЦ РАН в отчет РАН за 2001 год
17	Важнейшие законченные исследования и разработки, готовые к практическому применению
18	Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2001 года

Научные сообщения

19	Исследование первичных стадий фотосинтеза методом ЭПР <i>К. М. Салихов</i>
23	Развитие методов спиновой химии: времяразрешенная ЭПР спектроскопия интермедиатов в фотохимии <i>А. А. Обычный, К. М. Салихов</i>
26	Проявление двухквантовых переходов в оптически детектируемых спектрах ЭПР (ОД ЭПР) спин-коррелированных радикальных пар в мицеллах <i>Л. Р. Мурсалимов, К. М. Салихов</i>
28	ЭПР томография в средах с проводимостью и диэлектрическими потерями <i>М. П. Цейтлин, К. М. Салихов</i>
31	ЭПР спектроскопия некоторых квазиодномерных соединений <i>В. К. Воронкова, Р. Т. Галеев</i>
35	Оптический эффект Керра и субпикосекундная молекулярная динамика жидкости <i>Д. М. Дунаев, В. С. Лобков</i>
40	О возможности восстановления фотона, поглощенного средой <i>С. А. Моисеев</i>
43	Радиационно-стимулированное растворение диоксида кремния <i>А. А. Бухараев</i>
46	Применение компьютерного моделирования в магнитной силовой микроскопии <i>Д. В. Овчинников</i>
50	Влияние термического отжига в атмосфере азота на оптические свойства и колебательный спектр графеновых наноструктур <i>И. А. Файзрахманов, В. В. Базаров, Н. В. Курбатова, И. Б. Хайбуллин</i>
53	Ионно-лучевой синтез металлополимерных наноструктур <i>В. Ю. Петухов, М. И. Ибрагимова, Н. Р. Хабибуллина</i>

- 58 Импульсный синтез дисилицида железа для кремниевой оптоэлектроники
Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов
- 62 Нелинейно-оптические свойства металлических наночастиц, синтезированных в стекле ионной имплантацией
А. Л. Степанов
- 65 ФМР исследования композитных пленок, формируемых имплантацией ионов железа в вязкую силасановую подложку
Р. И. Хайбуллин, Б. З. Рамеев
- 69 Изинговское обменное взаимодействие оптических двухуровневых систем
А. Р. Кессель
- 73 Стабилизация вычислительного базиса квантового компьютера при кодировании кубитов в представлении виртуального спина
А. Р. Кессель
- 76 Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$
Х. Г. Богданова
- 80 Высокочастотная ЭПР спектроскопия пар Cr^{3+} - Cr^{3+} в синтетическом форстерите
В. Ф. Тарасов, Г. С. Шакуров
- 84 Взаимодействие неравновесных фононов различных поляризаций с оптически возбужденными примесными центрами
А. М. Шегеда
- 88 Магнитное двулучепреломление ультразвука в гематите
С. А. Мигачев, И. Ш. Ахмадуллин
- 91 Эффективный спин и спиновый гамильтониан
М. М. Зарипов
- 95 Восьмикоординированные комплексы примесных d-ионов ян-теллеровского типа в кристаллах структурного ряда флюорита
В. А. Уланов
- 99 Статистическое моделирование изотропной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси
М. Х. Бренерман
- 104 О коррелированной динамике подсистем замкнутой квантовой системы
Н. К. Соловаров
- 108 Косвенное взаимодействие мессбауэровских ядер через электромагнитное поле вакуума
В. А. Попов
- 111 Супрамолекулярно-организованные среды со спин-переменными и усиленными оптическими свойствами на основе жидкокристаллических координационных соединений
Ю. Г. Галяметдинов
- 114 Ян-теллеровские центры низкоспинового Ni^{3+} в оксидных керамиках
Т. А. Иванова
- 116 Особенности магнитного и диэлектрического поведения мезофаз комплексов хрома (III) с азоциклическими лигандами
Н. Е. Домрачева, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов
- 120 ЭПР супрамолекулярных сетчатых структур с четырьмя центрами меди
Н. Е. Домрачева
- 121 Электронная релаксация в водных и водно-глицериновых растворах нитрата гадолиния
Г. П. Вишневская, Е. Н. Фролова, А. Р. Фахрутдинов

- 125 Проявление жидкостных и твердотельных свойств растворов по данным электронной релаксации парамагнитных ионов. Немарковские процессы
Г. П. Вишневецкая, Е. Н. Фролова
- 128 Динамическое фазовое расслоение в сверхпроводящих купратах лантана
Г. Б. тейтельбаум
- 132 Эффект близости в тонкопленочных слоистых гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик
И. А. Гарифуллин
- 136 Квазиклассическая теория гигантского магнетосопротивления в наноразмерных магнитных контактах
Б. П. Водопьянов
- 138 Влияние размерных факторов на механизмы пиннинга вихрей в тонких сверхпроводящих пленках
Ю. И. Таланов
- 144 Феноменологическая теория релаксоров и свойства электронной системы
Р. Ф. Мамин
- 148 Оптическое сверхизлучение в примесных кристаллах и разработка оптимальных режимов их лазерного охлаждения
В. В. Самарцев
- 153 Интерференция каналов возбуждения в квантовой оптике
Р. Н. Шахмуратов
- 159 Оптическая фазовая память на основе некогерентного фотонного эха и свободной фотонной индукции
В. А. Зуйков
- 163 Векторная теорема площадей в кристаллах и поляризационная стабильность солитонов при самоиндуцированной прозрачности
В. Н. Лисин
- 167 Исследование динамики зарождения и роста локальной жидкой фазы на поверхности монокристаллического кремния при облучении световыми импульсами с различными длительностями
Я. В. Фаттахов, Т. Н. Львова
- 171 Квантовохимическое изучение электронной структуры молекул и молекулярных кластеров в основном и возбужденном состоянии
Р. М. Аминова
- 174 Исследования биофизических характеристик элементов нейронных сетей у виноградной улитки при обучении
Х. Л. Гайнутдинов, В. В. Андрианов, Т. Х. Гайнутдинова
- 178 Анализ изменения формы усталостной поверхностной трещины в трубопроводе
В. Н. Шлянников, Б. В. Ильченко
- 182 Метод подконструкций как аппарат распараллеливания вычислений в компьютерных сетях
С. К. Черников, А. Н. Ашихмин
- 187 Математическая модель для анализа НДС рамы автомобиля “КамАЗ” и ее верификация
С. К. Черников, А. Н. Ашихмин
- 194 Математическая модель несущей системы автомобиля “Ока” и ее использование при выборе направлений модернизации конструкции
С. К. Черников, Ю. В. Садчиков, Б. В. Ильченко
- 201 Использование наноструктурных металлов для получения электронных автоэммиттеров на основе углеродных нанотрубок
Е. Ф. Куковицкий

Аспиранты и молодые ученые

- 204 Аспиранты и молодые ученые

Персоналии

- 206 Семён Александрович Альтшулер. К 90-летию со дня рождения
М. М. Заринов
- 208 Памяти Рината Зуфаровича Бариева
М. П. Желифонов, В. А. Жихарев, А. Р. Кессель, Г. Б. Тейтельбаум
- 209 Очерк развития исследований модели Изинга и других точно
решаемых квантово-статистических моделей в КФТИ
М. П. Желифонов

Научно-организационная деятельность

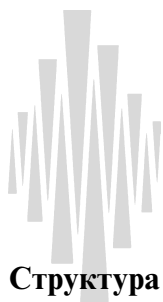
- 214 О работе ученого совета
В. К. Воронкова
- 215 О работе диссертационного совета
М. М. Шакирзянов
- 215 Международная премия им. Е. К. Завойского
Л. В. Мосина
- 216 Журнал “Applied Magnetic Resonance”
Л. В. Мосина
- 217 Взаимодействие с ВУЗами
В. Ф. Тарасов
- 218 Международные связи
Н. А. Карташева
- 219 О реорганизации библиотеки
Г. Э. Гумерова

Финансово-хозяйственная деятельность

- 221 О некоторых результатах хозяйственной деятельности в 2001
и предшествующие годы
В. И. Рахамов

Цифры и факты

- 224 2001 год в цифрах
- 225 Важнейшие результаты фундаментальных исследований,
вошедшие в отчет РАН за 2000 год
- 226 Публикации сотрудников института
- 232 Гранты
- 235 Защиты, награды, государственные стипендии
- 235 Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ
- 238 Гости института
- 239 Участие сотрудников в конференциях



Структура института

Дирекция

Директор

Салихов Кев Минуллинович
член-корр. РАН, академик АНТ,
доктор физ.-мат. наук

Зам. директора по научной работе

Тарасов Валерий Федорович
с.н.с., канд. физ.-мат. наук

Зам. директора по общим вопросам

Рахамов Виктор Иванович

Ученый секретарь

Воронкова Виолета Константиновна
с.н.с., канд. физ.-мат. наук

Ученый совет

Салихов Кев Минуллинович, член-корр. РАН
председатель

Кессель Александр Рахмиэлевич, д.ф.-м.н.
заместитель председателя

Воронкова Виолета Константиновна, к.ф.-м.н.
ученый секретарь

Бухараев Анастас Ахметович, д.ф.-м.н.

Гайнутдинов Халил Латыпович, д.б.н.

Гарифуллин Ильгиз Абдулсаматович, д.ф.-м.н.

Жихарев Валентин Александрович, д.ф.-м.н.

Лисин Валерий Николаевич, к.ф.-м.н.

Моисеев Сергей Андреевич, д.ф.-м.н.

Овчинников Игорь Васильевич, д.ф.-м.н.

Осокин Дмитрий Яковлевич, д.ф.-м.н.

Петухов Владимир Юрьевич, д.ф.-м.н.

Самарцев Виталий Владимирович, д.ф.-м.н.

Соловаров Николай Константинович, к.ф.-м.н.

Таланов Юрий Иванович, д.ф.-м.н.

Тарасов Валерий Федорович, к.ф.-м.н.

Тейтельбаум Григорий Бенционович, д.ф.-м.н.

Хайбуллин Ильдус Бариевич, член-корр. РАН

Хлебников Святослав Яковлевич, к.ф.-м.н.

Шакирзянов Масгут Мазитович, д.ф.-м.н.

Курбатова Надежда Васильевна

технический секретарь

Научные и научно-вспомогательные подразделения*Лаборатория молекулярной фотохимии*

Заведующий лабораторией: член-корр. РАН,
действительный член АНТ, проф., д.ф.-м.н.
Салихов Кев Минуллович

Лаборатория физики и химии поверхности

Заведующий лабораторией: с.н.с., д.ф.-м.н.
Бухараев Анастас Ахметович

Лаборатория радиационной физики

Заведующий лабораторией: член-корр. РАН,
действительный член АНТ, РАЕН, АИН и АН
Чувашии, проф., д.ф.-м.н., заслуженный деятель
науки РТ Хайбуллин Ильдус Бариевич

Лаборатория резонансных явлений

Заведующий лабораторией: действительный член
РАЕН, проф., заслуженный деятель науки РФ
Кессель Александр Рахмиевич

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Заведующий лабораторией: проф., д.ф.-м.н.,
заслуженный деятель науки РФ и РТ
Овчинников Игорь Васильевич

Лаборатория физики перспективных материалов

Заведующий лабораторией: проф., д.ф.-м.н.
Тейтельбаум Григорий Бенционович

Лаборатория нелинейной оптики

Заведующий лабораторией: член-корр. РАЕН,
проф., д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ
и РФ Самарцев Виталий Владимирович

Лаборатория методов медицинской физики

Заведующий лабораторией: с.н.с., к.ф.-м.н.
Фаттахов Яхъя Валиевич

Лаборатория биофизики

Заведующий лабораторией: проф., д.б.н.
Гайнутдинов Халил Латыпович

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Заведующий лабораторией: с.н.с., к.т.н.
Черников Сергей Константинович

Группа роста кристаллов

Руководитель группы: Куковицкий Евгений
Филиппович

Отдел криогенной техники

Заведующий отделом: к.ф.-м.н. Хлебников
Святослав Яковлевич

Отдел телекоммуникационных технологий

Заведующий отделом: к.ф.-м.н. Мусин Виталий
Мухбиревич

Отдел вычислительных систем и автоматизации научных исследований

Заведующий отделом: Дюльдев Игорь Николаевич

Библиотека

Заведующая библиотекой: Гумерова Гульшат
Эльгизовна
Заведующая отделением библиотеки: Гайнутдинова
Светлана Станиславовна

Патентная служба

Главный специалист: Туриянский Ефим Аронович

Редакция журнала "Applied Magnetic Resonance"

Главный редактор: член-корр. РАН, проф., д.ф.-м.н.
Салихов Кев Минуллович
Зам. гл. редактора по научно-редакционным
вопросам, ответственный секретарь: с.н.с., к.ф.-м.н.
Мосина Ляйля Васильевна
Зам. гл. редактора по издательским вопросам:
к.ф.-м.н. Ахмин Сергей Михайлович

Службы*Приемная*

Секретарь-референт: Губайдуллина Альфия
Закировна

Бухгалтерия

Главный бухгалтер: Маликова Рашида Барыевна
Зам. главного бухгалтера: Зарипова Розалия
Абдрахмановна

Отдел кадров, аспирантура

Зав. отделом кадров, зав. аспирантурой:
Мухтасарова Халима Лутфулловна

Канцелярия

Заведующая канцелярией: Куркина Нина
Георгиевна

Отдел охраны труда

Инженер по ТБ и ГО: Хлебникова Тамара
Анатольевна (до 1.07.01), Рыбакова Людмила
Александровна (с 7.06.01)

Экспериментальная мастерская

Мастер-станочник: Гайнутдинов Наиль
Валеевич

Отдел научно-технической информации

Вед. инженер: Богомолова Ольга Игоревна

Архив

Главный специалист: Карташева Нина Алексеевна

Копировально-множительное бюро

Блатт Алевтина Павловна

АХО

Заведующая АХО (ул. Лобачевского, 2/31):
Макарова Екатерина Александровна;
Заведующая АХО (ул. Сибирский тракт, 10/7):
Куприянова Ольга Олеговна

Отдел главного энергетика

Главный энергетик: Кюне Дмитрий Густавович
(до 16.04.01), Гайнуллин Ринат Хайруллович
(с 16.04.01)

Группа капитального ремонта

Мастер: Гнездилов Иван Дмитриевич

Отдел материально-технического снабжения

Заведующий отделом: Садыков Нияз Рифгатович

Гараж

Механик: Лукин Иван Тимофеевич

ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ГОДА

Государственная премия Республики Татарстан

В последние дни 2001 г. коллективу сотрудников лаборатории молекулярной радиоспектроскопии: И. В. Овчинникову, Ю. Г. Галяметдинову, И. Г. Бикчантаеву, Г. И. Ивановой была вручена Государственная премия РТ за цикл работ “Создание магнитных жидких кристаллов”.

На соискание премии были представлены результаты, свидетельствующие о приоритете авторского коллектива в создании нового, быстро развивающегося в мире научного направления – “Магнитные жидкие кристаллы”.

Магнитные жидкие кристаллы на основе координационных соединений 3d-элементов

Созданы первые магнитные (парамагнитные) металлосодержащие жидкие кристаллы – смектики и нематики.

Впервые в качестве лигандов для получения металлomezоенов (т.е. обладающих жидкокристаллической фазой металлосодержащих комплексов) использованы замещенные основания Шиффа – наиболее популярный сегодня класс лигандов в синтезе металлomezоенов.

Впервые продемонстрирована принципиальная возможность создания металлomezоенов с неплоским (пирамидальным) строением координационного узла (комплекс ванадила).

Выявлена определяющая роль геометрии хелатного узла (зависящая от атома металла) в проявлении мезоморфизма металлокомплексов. Получен первый парамагнитный комплекс никеля, обладающий жидкокристаллической фазой.



Президент Республики Татарстан М. Ш. Шаймиев вручает Государственную премию РТ профессору И. В. Овчинникову.

Широкие рентгеноструктурные исследования парамагнитных металлomezоенов 3d-группы в сочетании с данными ЭПР выявили структурные особенности изменения, строения и упаковки ряда парамагнитных металлomezоенов, проявляющиеся при переходе от кристаллической к жидкокристаллической фазе.

Получен первый высокоспиновой термотропный металлomezоенный комплекс с атомом железа.

Синтезированы первые полиядерные (гомо- и гетероядерные) мезогенные соединения с металлосодержащим (производное ферроцена) лигандом, в том числе, имеющие в своем составе 6 атомов железа. Созданы первые полимерные парамагнитные жидкокристаллические системы.

Создан первый жидкий кристалл на основе комплексов железа со спин-переменными (спиновыми переходами) свойствами.



Лауреаты Государственной премии РТ
(слева направо): И. Г. Бикчантаев,
Ю. Г. Галяметдинов, И. В. Овчинников,
Г. И. Иванова.

Развитие метода ЭПР для исследования магнитных жидких кристаллов

Построена теория формы линии ЭПР в различных жидкокристаллических фазах и других частично ориентационно-упорядоченных средах.

Разработана оригинальная методика ЭПР исследования парамагнитных металломезогенов, на основе которой предложена структурная классификация парамагнитных смектиков по данным ЭПР, обнаружена новая низкосимметричная смектическая фаза.

Магнитные жидкие кристаллы на основе комплексов редкоземельных 4f элементов

Созданы первые жидкие кристаллы на основе каламитных комплексов парамагнитных ионов редкоземельных элементов. Вариацией лигандного и анионного состава достигнуто значительное снижение об-

ласти температур существования жидкокристаллической фазы этих соединений и вязкости этих фаз.

Обнаружена и теоретически интерпретирована рекордная для жидких кристаллов магнитная анизотропия жидкокристаллических фаз металломезогенов редких земель, превышающая магнитную анизотропию известных жидких кристаллов на 2–3 порядка. Показана возможность создания на их основе супрамолекулярно-организованных магнитоанизотропных систем.

Некоторые области применения металлосодержащих магнитных жидких кристаллов

Созданные магнитные жидкие кристаллы уже нашли применение в научных исследованиях, в хроматографии, в сенсорных устройствах, в каталитических системах, возникает принципиальная возможность применения их в магнитной дефектоскопии и в приборах отображения информации (дисплеях, телевизорах).

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Ученым советом КФТИ КазНЦ РАН в отчет РАН за 2001 год

1.

Создано и исследовано первое соединение железа с замещенным основанием Шиффа со спин-переменным (spin-crossover) свойством, обладающее надмолекулярной жидкокристаллической (смектической) организацией.

Аннотация. Создано и исследовано методами ДСК, поляризационной микроскопии, магнитной восприимчивости, гамма-резонансной спектроскопии и рентгенофазового анализа первое соединение Fe, обладающее как жидкокристаллическим (смектическим), так и спин-переменным (spin-crossover) свойствами.

Синергизм спин-переменных ($S = 1/2 \leftrightarrow S = 5/2$) и жидкокристаллических свойств заключается в комбинации чувствительности жидкокристаллического состояния к электрическим и магнитным полям с чувствительностью оптических и магнитных свойств спин-переменных систем к различным физическим воздействиям. Можно ожидать в дальнейшем широкого практического применения соединений подобного типа в качестве активных сред для записи и хранения информации и в оптических устройствах, используя при этом хорошо развитую технологию и технику приготовления жидкокристаллических систем.

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии КФТИ КазНЦ РАН.

Отв. исполнители: Галяметдинов Ю.Г., Иванова Г.И., Просвирин А.Н., Овчинников И.В.

Публикация:

1. Galyametdinov Yu., Ksenofontov V., Prosvirin A., Ovchinnikov I., Ivanova G., Gutlich P., Haase W.: First example of coexistence of thermal spin transition and liquid-crystal properties. *Angew. Chem. Int. Edit.* **40** (22), 4269–4271 (2001)

2.

Создана теория время-разрешенных спектров ЭПР разделенных зарядов в реакционном центре фотосистемы I.

Аннотация. Создана теория время-разрешенного спектра ЭПР разделенных зарядов в реакционном центре фотосистемы, которая позволила впервые описать наблюдаемые в опыте спектры ЭПР в X, Q, W диапазонах частот единым набором параметров, задающих взаимное расположение донора и акцептора и време-

на жизни электрона на различных ко-факторах в реакционном центре.

Лаборатория молекулярного фотосинтеза КФТИ КазНЦ РАН, Берлинский свободный университет, Берлин.

Руководитель: Салихов К.М.

Отв. исполнители: Кандрашкин Ю.Е., ван дер Эст А., Зех С., Штелик Д.

Публикации:

1. Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: Light-induced radical pair intermediates in photosynthetic reaction centers in contact with an observer spin label: spin dynamics and effects on transient EPR-spectra. *Mol. Phys.* **100**, 1311–1321 (2002)
2. Kandrashkin Yu.E., Vollmann W., Stehlik D., Salikhov K.M., van der Est A.: The magnetic field dependence of the electron spin polarisation in consecutive spin-correlated radical pairs in type I photosynthetic reaction centers. *Mol. Phys.* **100**, 1431–1443 (2002)

3.

Создана теория гигантского магнетосопротивления магнитных наноразмерных точечных контактов. Вычислены их максимально возможные значения магнетосопротивления как для баллистического, так и для диффузионного режима транспорта в области контакта.

Аннотация. Вычислен кондактанс и магнетосопротивление наноразмерного точечного контакта магнитных доменов. Определены условия, при которых эффект увеличения магнетосопротивления достигает сотен процентов. Точечный контакт рассматривается как отверстие с радиусом в несколько ангстрем в непроницаемой мембране, разделяющей два магнитных домена, направление намагниченности в которых может изменяться относительно друг друга. Внутри отверстия образуется доменная стенка с характерными размерами порядка диаметра отверстия. Найдены условия, при которых доменная стенка для электрона проводимости является эффективно резкой (направление спина электрона сохраняется при прохождении доменной стенки). В этом случае, при антипараллельной ориентации магнитных доменов, из-за большой разности фермиевских импульсов в подзонах только электроны с узким конусом углов падения вокруг нормали к границе пропускаются областью точечного контакта. Электроны, имеющие большие углы падения, испытывают полное внутреннее отражение. Это обуславливает большое магнетосопротивление точечных магнитных контактов. Теория хорошо согласуется с имеющимися экспериментами на наноразмерных никель-никелевых и кобальт-кобальтовых точечных контактах, показывающих гигантские ве-

личины магнетосопротивления (увеличение порядка 300% при комнатной температуре).

Лаборатория физики перспективных материалов КФТИ КазНЦ РАН, Институт теоретической физики им. Ландау РАН, Москва, Казанский государственный университет.

Руководитель: Водопьянов Б.П.

Отв. исполнители: Тагиров Л.Р., Ефетов К.Б.

Публикация:

1. Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.B.: Ballistic versus diffusive magnetoresistance of a magnetic point contact. Phys. Rev. B **63**, 104428 (2001)

4.

Исследованы зарядовые состояния примесных ионов хрома в синтетическом форстерите и структуры парамагнитных центров, образованных этими ионами. Наряду с известными ранее центрами трех и четырех валентного хрома обнаружены центры двухвалентного хрома и димеры Cr^{3+} - Cr^{3+} с концентрацией, существенно превышающей статистическую.

Аннотация. Методом субмиллиметровой ЭПР спектроскопии исследованы кристаллы синтетического форстерита, активированного ионами хрома. В диапазоне 65–400 ГГц обнаружены резонансные переходы, принадлежащие неизвестным ранее парамагнитным центрам, образованным примесными ионами хрома в синтетическом форстерите. На основе анализа зависимостей резонансных частот от величины магнитного поля и его ориентации относительно кристаллографических осей установлена природа новых центров. Установлено, что ионы двухвалентного хрома могут замещать магний в кристаллографических позициях M1 и M2, а ионы трехвалентного хрома образуют парные центры с концентрацией, существенно превышающей статистическую для данной концентрации примесных ионов хрома. Наиболее вероятная структура парного центра – симметричный димер, когда два трехвалентных иона хрома замещают три двухвалентных иона магния в позициях M1, расположенных вдоль кристаллографической оси *c*, причем, магниевая вакансия располагается между ионами хрома.

Лаборатория резонансных явлений КФТИ КазНЦ РАН.

Отв. исполнители: Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С.

Публикация:

1. Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С., Гавриленко А.Н.: ЭПР ионов хрома в синтетическом форстерите в субмиллиметровом диапазоне. ФТТ **37**, 499 (1995)
2. Shakurov G.S., Tarasov V.F.: High-frequency tunable EPR spectroscopy of Cr^{3+} in synthetic forsterite. Appl. Magn. Reson. **21**, 597–607 (2001)

5.

Впервые в твердотельном образце – кристалле дифенила, легированного молекулами пирена, экспериментально наблюдается и теоретически объяснено явление триггерного оптического сверхизлучения.

Аннотация. Впервые в твердом теле (в кристалле дифенила с молекулами пирена при температуре жидкого гелия на длине волны 373 нм, соответствующей 0-0 переходу молекулы пирена) наблюдалось триггерное оптическое сверхизлучение. Развита теория этого явления и получено хорошее согласие теории с экспериментом.

Лаборатория нелинейной оптики КФТИ КазНЦ РАН, ФТИНТ АН Украины, Харьков.

Руководитель: Самарцев В.В.

Отв. исполнители: Зиновьев П.В., Силаева Н.Б., Зуйков В.А., Калачев А.А.

Публикация:

1. Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V., Silaeva N.B.: Triggered optical superradiance in biphenyl crystal doped by pyrene. Laser Physics **11**, no. 12, 1–6 (2001)

6.

Теоретически показана возможность полного восстановления светового импульса, испытавшего резонансное поглощение в среде.

Аннотация. Показано, что восстановленное световое поле является обращенной копией одного из световых импульсов, возбуждающих среду. В отличие от известных вариантов формирования фотонного эха, в предлагаемом эффекте восстановленный сигнал может воспроизводить интенсивность возбуждающего светового поля с эффективностью близкой к ста процентам, в частности, для полей, содержащих единичные фотоны. Реализация данного эффекта открывает широкие возможности как для развития новых более чувствительных методов оптической спектроскопии, так и для решения задач квантовой информатики, использующих нестационарные квантовые световые поля.

Лаборатория молекулярной фотохимии КФТИ КазНЦ РАН, Лундский технологический институт, Лунд.

Руководитель: Моисеев С.А.

Публикация:

1. Moiseev S.A., Kröll S.: Complete reconstruction of the quantum state of a single-photon wave packet absorbed by a doppler-broadened transition. Phys. Rev. Lett. **87**, no. 17, 173601 (2001)

7.

Выведена векторная теорема площадей, которая позволила изучить стабильность поляризации, площади и числа солитонов в режиме самоиндуцированной прозрачности при прохождении линейно-поляризованных лазерных импульсов в примесных кристаллах.

Аннотация. Теоретически исследованы стабильность поляризации, площади и числа солитонов на выходе из кристалла $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ в режиме самоиндуцированной прозрачности в зависимости от направления поляризации и площади падающего линейно поляризованного лазерного импульса. Для этой цели выведена векторная теорема площадей и получена двумерная карта особых точек, которая определяется симметрией кристалла и направлениями векторов дипольных матричных элементов различных подгрупп оптически возбужденных ионов. Отображение на данную карту временной эволюции лазерного импульса позволяет выявить поляризационные свойства солитонов.

Лаборатория нелинейной оптики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Лисин В.Н.

Публикация:

1. Lisin V.N.: Vector area theorem mapping in crystals and polarization stability of SIT-solitons. Письма ЖЭТФ **74**, № 5, 314–317 (2001); Arxiv: physics, 0110017, **2**, 8 October 2001.

8.

Впервые получен гамильтониан парного взаимодействия оптических двухуровневых систем (ОДУС) в форме оператора изинговской обменной связи с потенциалом, на несколько порядков превышающим потенциалы других типов парных взаимодействий ОДУС.

Аннотация. Рассчитан оператор

$$\mathcal{H}_a = \sum \mathbf{U}_{mn}^a \mathbf{I}_m^a \mathbf{I}_n^a \quad (a = z) \quad (1)$$

косвенного взаимодействия (ОДУС) через электромагнитное поле вакуума в условиях, когда связь ОДУС с полем излучения осуществляется через электрический квадрупольный момент атома. Оператор имеет форму изинговского обменного взаимодействия, а его потенциал $\mathbf{U}_{mn}^z$ имеет порядок величины 10^{12} Гц на расстоянии 10^{-6} см между атомами. Здесь $\mathbf{I}_n^z$ есть z -компонента (“энергетическая” компонента) псевдоспина, на языке которого принято описывать ДУС. Взаимодействие (1) вносит вклад в неоднородную ширину оптических линий и может также проявляться в условиях, когда оптическая система выведена из состояния термодинамического равновесия.

Ранее известные выражения для косвенных взаимодействий ОДУС тоже имеют форму (1) с $a = x$. Два существенных отличия: А) Операторная часть гамильтониана $\mathcal{H}_x$ содержит только поперечные компоненты псевдоспинов, связанных с электрическими дипольными моментами переходов между уровнями ОДУС. Б) Потенциал $\mathbf{U}_{mn}^x$ имеет другую зависимость от радиуса-вектора, соединяющего взаимодействующие ДУС, а, главное, потенциал $\mathbf{U}_{mn}^z$ на несколько порядков больше, чем $\mathbf{U}_{mn}^x$. Последнее отличие связано с особенностями теории возмущений для ДУС как квантовой системы и со свойствами матричных элементов дипольных и квадрупольных моментов между состояниями ОДУС.

Лаборатория резонансных явлений КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Кессель А.Р.

Отв. исполнитель: Донская И.С.

Публикация:

1. Кессель А.Р., Донская И.С.: Обменное взаимодействие изинговского типа для оптических ДУС. Письма в ЖЭТФ **74**, 283–286 (1999)
2. Кессель А.Р., Донская И.С.: Изинговское обменное взаимодействие оптических двухуровневых систем. ЖЭТФ № 3 (2002) в печати.

9.

Показано, что температурное и частотное поведение диэлектрической постоянной в области размытого максимума и в низкотемпературной фазе релаксоров связано с динамикой процессов локализации зарядов на дефектах.

Аннотация. Развита феноменологическая модель сегнетоэлектриков с размытым фазовым переходом (релаксоров). Показано, что поведение релаксоров можно описывать в рамках теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау. Получено описание температурного и частотного поведения диэлектрической постоянной в области размытого максимума. Показано, что поведение в этой области температур связано с динамикой процессов образования поляронных состояний в результате локализации зарядов на дефектах. Исследованы долго релаксирующие процессы в низкотемпературной фазе релаксоров. Найдена зависимость времени задержки фазового перехода в однородно поляризованное состояние от температуры и величины внешнего электрического поля. Теория хорошо согласуется с известными экспериментальными данными, имеющимися для соединений $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{La}_x\text{Zr}_{1-y}\text{Ti}_y\text{O}_3$.

Лаборатория физики перспективных материалов КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Мамин Р.Ф.

Публикации:

1. Мамин Р.Ф.: К теории фазовых переходов в релаксорах. ФТТ **43**, 1262–1267 (2001)
2. Mamin R.F., Blinc R.: Delay time of phase transition in low-temperature phase of relaxors. Ferroelectric Lett. (2002) accepted for publication.

10.

С использованием непрерывных и импульсных ионных пучков синтезированы сплошные и мелкодисперсные слои полупроводникового дисилицида железа в кремнии. Слои характеризуются высокой степенью текстуры зерен, соответствующей ориентации кремния, прямозонной структурой дисилицида, высоким уровнем фотолюминесценции в ближней ИК-области.

Аннотация. Основным направлением кремниевой оптоэлектроники является создание на основе кремния тонкопленочных структур, излучающих в области 1.5 мкм, соответствующей “окну” прозрачности кварцевых оптоволоконных линий связи и позволяющих интегрировать опто- и микроэлектронные устройства на одном кремниевом кристалле. В работах сотрудников КФТИ КазНЦ РАН и ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН впервые с использованием ионной имплантации и последующих обработок мощными импульсами ионного пучка синтезированы сплошные и мелкодисперсные слои полупроводникового дисилицида железа в кремнии. Обработка импульсами наносекундной длительности позволяет предотвратить нежелательную диффузию атомов железа в базовый материал, препятствующую интеграции опто- и микроэлектронных устройств. Синтезированные слои характеризуются также высокой степенью ориентации зерен (на кремнии (100) в направлении [110]), прямой оптической щелью с энергией 0.83 эВ. Сигнал фотолюминесценции, соответствующий прямым межзонным переходам в дисилициде железа в области длины волны 1.5 мкм, наблюдается вплоть до температуры 210 К.

Лаборатория радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН, ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург.
Руководитель: Баязитов Р.М.

Отв. исполнители: Баталов Р.И., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.

Публикации:

1. Bayazitov R.M., Batalov R.I.: X-ray and optical characterization of β -FeSi₂ layers formed by pulsed ion-beam treatment. J. of Phys.: Condensed Matter **13**, 113–118 (2001)
2. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Рентгеновский и люминесцентный анализ мелкодисперсных пленок β -FeSi₂, сформированных в Si импульсной ионной обработкой. ФТТ **43**, 1569–1572 (2001) [Physics of the Solid State **43**, 1633–1636 (2001)]

3. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х., Вейзер Г., Кюне Х.: Импульсный синтез слоев β -FeSi₂ на кремнии, имплантированном ионами Fe⁺. ФТП **35**, 1320–1325 (2001) [Semiconductors **35**, 1263–1269 (2001)]
4. Batalov R.I., Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh.: Pulsed ion-beam synthesis of β -FeSi₂ precipitate layers in Si(100). Nanotechnology **12**, S1–S4 (2001)

11.

С помощью магнитно-силового микроскопа (МСМ) исследована in-situ трансформация доменной структуры в отдельных ферромагнитных микропроводах под действием внешнего магнитного поля. Визуализирован процесс перехода от “полосатой” доменной структуры, обусловленной периодически расположенными доменами с противоположной намагниченностью, к однородной намагниченности.

Аннотация. На подложках из углерода и диоксида кремния получены пленочные планарные периодические структуры из отдельных ферромагнитных металлических частиц Co и Ni прямоугольной формы микронных размеров толщиной от 30 до 200 нм и с соотношением длины к ширине от 1:10 до 1:1. С помощью МСМ со встроенным в него магнитом *in-situ* исследовано перемагничивание внешним магнитным полем таких металлических частиц в зависимости от их размеров и формы, а также направления внешнего поля. В частности, показано, что в микропроводах Co с соотношением длины к ширине 10:1 в отсутствие внешнего магнитного поля наблюдается “полосатая” доменная структура, обусловленная периодически расположенными доменами с противоположной намагниченностью. С ростом внешнего магнитного поля за счет движения доменных стенок вдоль микропровода наблюдается переход от “полосатой” к однородной намагниченности. Такие объекты представляют интерес с точки зрения их магнеторезистивных свойств. Величина поля, при которой формируется однородная намагниченность, зависит от направления внешнего поля, размеров и формы микрочастиц.

Лаборатория физики и химии поверхности КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Бухараев А.А.

Отв. исполнители: Овчинников Д.В., Бородин П.А.

Публикации:

1. Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A., Borodin P.A., Biziaev D.A.: *In situ* MFM investigation of magnetization reversal in Co patterned microstructures. Phys. Low-Dim. Struct. **3/4**, 103–108 (2001)
2. Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Компьютерное моделирование МСМ-изображений в рамках ста-

тической модели распределения намагниченности и диполь-дипольного взаимодействия. ЖТФ 71, 85–91 (2001)

12.

Методом высокодозной имплантации ионов Cu^+ получен композитный материал с гигантским значением показателя нелинейной кубической восприимчивости $\chi^{(3)} \approx 10^{-7}$ ед. СГСЕ.

Аннотация. Нелинейное оптическое поведение малых металлических частиц, внедренных в диэлектрические материалы, представляет как научный так и практический интерес. Такие композиционные материалы характеризуются высокими показателями нелинейной кубической восприимчивости $\chi^{(3)}$ для пикосекундных времен, причем, эффективные значения $\chi^{(3)}$ определяются как типом металла и диэлектрика, так и структурными параметрами наночастиц, т.е. их размерами, распределением по размерам, формой и фактором заполнения диэлектрика металлом. К настоящему времени на практике получены материалы, характеризующиеся $\chi^{(3)} \approx 10^{-8}$ – 10^{-9} ед. СГСЭ.

В результате отработки методики высокодозной имплантации ионов Cu^+ в диэлектрик, в частности в SiO_2 , при низких энергиях ионов, высокой плотности ионного тока и строгом контроле температуры стекла во время имплантации, были синтезированы композиционные слои с наночастицами меди, которые имели высокие факторы заполнения металлом с узкой функцией распределения данных частиц по размерам при сохранении малого среднего размера наночастиц (4 нм). Для сформированных композиционных материалов зарегистрированы гигантские значения $\chi^{(3)} \approx 10^{-7}$ ед. СГСЕ при воздействиях импульсным лазером пикосекундной длительности в спектральной области плазменного резонансного поглощения металлических частиц. Достигнутая величина $\chi^{(3)}$ находится среди наивысших значений, известных из литературы, и оказывается максимально приближенным к теоретически предсказываемым.

Лаборатория радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Степанов А.Л.

Публикации:

1. Olivares J., Requejo-Isidro J., del Coso R., de Nalda R., Solis J., Afonso C.N., Stepanov A.L., Hole D., Townsend P.D., Naudon A.: Large enhancement of the third-order optical susceptibility in Cu-silica composites produced by low-energy high-current ion implantation. J. Appl. Phys. **90**, 1064 (2001)
2. Степанов А.Л., Хайбуллин И.Б., Таунсенд П., Холле Д., Бухараев А.А.: Способ получения нелинейно-оптического материала. Патент РФ № 2156490 от 20.09.2000

Важнейшие законченные исследования и разработки, готовые к практическому применению

1.

Разработан и изготовлен магнитно-резонансный томограф “ТМР-0.06-КФТИ” с индукцией магнитного поля 0.06 Тл. Томограф является следующей моделью после “ТМР-0.02-КФТИ” в ряду сверхнизкопольных томографов, разрабатываемых в КФТИ.

Применение невысоких магнитных полей позволяет значительно уменьшить энергопотребление прибора при получении изображений, удовлетворяющих медицинским требованиям. Кроме того, величина постоянного магнитного поля и радиочастотного поля, а также скорость переключения градиентных магнитных полей во много раз ниже предельно допустимых значений, принятых ВОЗ, что является немаловажным фактором с точки зрения экологии человека и выгодно отличает представляемый аппарат от всех промышленно выпускаемых аналогов.

Томограф располагает следующим набором стандартных режимов: градиентное эхо, спин-эхо, многократное спин-эхо, быстрое сканирование, насыщение-восстановление, инверсия-восстановление.

Полученные изображения могут быть выведены на экран дисплея ПЭВМ, видеомонитор, лазерный принтер. Предусмотрена возможность передачи информации по сети Интернет в международном формате DICOM-3.0.

Томограф укомплектован пятью датчиками: “Голова”, “Шея”, “Спина”, “Суставы”, “Все тело”.

Лаборатория методов медицинской физики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Фаттахов Я.В.

2.

Разработана математическая модель для исследования прочности и жесткости рам автомобилей семейства “КамАЗ”. Определены расчетные уровни допустимых характеристик прочности и жесткости рам автомобилей типа “КамАЗ”.

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Черников С.К.

Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2001 года

В рамках ежегодной итоговой конференции КФТИ был проведен конкурс работ КФТИ КазНЦ РАН за 2001 год.

Конкурсная комиссия в составе: Салихов К.М. (председатель), Бухараев А.А. (секретарь), Гарифуллин И.А., Овчинников И.В., Петухов В.Ю., Кессель А.Р., Соловаров Н.К., Тейтельбаум Г.Б., Тарасов В.Ф. отобрала из 39 докладов, представленных на стендовой сессии, 11 докладов для устного представления.

По итогам конкурса 2001 года присуждены одно первое, два вторых и четыре третьих места.

В номинации “фундаментальные исследования”

1-е место

- Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С.: Высокочастотная перестраиваемая ЭПР спектроскопия Cr^{3+} в синтетическом форстерите

2-е место

- Салихов К.М. (КФТИ КазНЦ РАН), Зех Ш., Штелик Д. (Берлинский свободный университет, Берлин): Светоиндуцированные радикальные пары в фотосинтетическом реакционном центре в контакте со спином-наблюдателем: спиновая ди-

намика и ее проявления во время-разрешенных спектрах ЭПР

- Лисин В.Н., Зуйков В.А., Шегеда А.М.: Взаимодействие неравновесных фоонов с различными типами оптически возбужденных примесных центров

3-е место

- Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р. (КГУ), Ефетов К.Б. (ИТФ им. Ландау РАН): Гигантские воспроизводимые флуктуации магнетосопротивления в квантовых магнитных контактах
- Галяметдинов Ю.Г., Просвирина А.В., Овчинников И.В., Иванова Г.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Ксенофонов В.А., Гютлих Ф. (Майнцский университет, Майнц), Хаазе В. (Технический университет, Дармштадт): Первый пример сосуществования теплового спинового перехода и жидкокристаллических свойств
- Моисеев С.А. (КФТИ КазНЦ РАН), Кролл С. (Лундский технологический институт, Лунд): Полное восстановление квантового состояния однофотонного волнового пакета поглощенного резонансным неоднородно уширенным переходом

В номинации “экспериментальные установки”

3-е место

- Баязитов Р.М., Мустафин Р.Г., Нурутдинов Р.М.: Модернизация импульсного ионного ускорителя и его экспериментальные возможности

Исследование первичных стадий фотосинтеза методом ЭПР

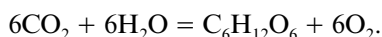
К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

В работе предложена новая стратегия в исследовании разделения зарядов в реакционном центре фотосинтеза с помощью времяразрешенной ЭПР-спектроскопии. Предлагается модифицировать реакционный центр, добавив спин-наблюдатель, и изучать изменения в спектре ЭПР разделенных зарядов и спина-наблюдателя. На основе численных расчетов найдены оптимальные положения для спина-наблюдателя, спин-наблюдатель должен быть введен на расстоянии 2–2.5 мм от акцептора электрона.

В фотосинтезе солнечная энергия преобразуется в химическую. Возможно, именно с фотосинтеза началась жизнь на Земле. Подавляющая часть потребляемой нами энергии, продуктов питания есть результат фотосинтеза. Огромный интерес к фотосинтезу легко объяснить. С одной стороны, это любопытство, желание понять механизм ассимиляции солнечной энергии – важнейшего природного процесса. С другой стороны, исследователей вдохновляет надежда на основе полученного при изучении фотосинтеза знания создать такие искусственные системы, которые бы столь же эффективно, как при фотосинтезе, разделяли заряды в солнечных батареях, расщепляли воду, связывали CO_2 .

Брутто реакция фотосинтеза хорошо известна:



Из воды и углекислого газа получается кислород и сахар. Написанная брутто реакция не есть результат какого-то одного элементарного химического акта, в котором участвуют одновременно по шесть молекул воды и углекислого газа и в результате согласованного движения атомов, концертной перегруппировки, создают кислород и сахар. В действительности, фотосинтез представляет собой сложный многостадийный процесс.

Фотосинтез начинается с фотохимических стадий. Есть два типа молекулярных фотохимических аппа-

рата: фотосистема 2, ФС2, и фотосистема 1, ФС1. Они сопряжены и функционируют согласованно. В фотосистеме 2 солнечная энергия используется для расщепления воды и производства кислорода. В фотосистеме 1 солнечная энергия используется для создания аккумуляторов энергии, прежде всего, происходит восстановление никотинамид-аденин динуклеотид фосфата, $\text{NADP}^+ \rightarrow \text{NADPH}$. В последующем на стадии темновых реакций эта энергия используется для связывания углекислого газа, синтеза сахара и т.д.

В фотосинтетических системах свет поглощается молекулами хлорофилла и они оказываются в электронно-возбужденном состоянии. Возбуждение передается от одних молекул хлорофилла к другим, оно мигрирует, пока случайно не попадает в реакционный центр (РЦ) фотосистемы, погруженный в мембрану. В РЦ возбужденный хлорофилл отдает свой электрон первичному акцептору электрона. Далее электрон переносится на вторичный акцептор и т.д., пока не достигнет конечного в цепи переноса электрона акцептора. Именно это разделение зарядов в РЦ является первичной фотохимической стадией фотосинтеза, первичной стадией превращения солнечной энергии в химическую: поглощается квант света и появляется восстановленный акцептор, который участвует в дальнейших химических превращениях.

РЦ – это довольно сложный молекулярный комплекс, супрамолекула. Например, РЦ ФС1 состоит из 12 белков, 127 ко-факторов (96 молекул хлорофилла,

2 филлохинона, 3 железозернистых комплекса, 22 каротеноида, 4 липида, ион Ca^{2+}) и 201 молекулы воды [1].

В каждом РЦ можно выделить цепочку молекул, по которой переносится электрон. Донором электрона является димер хлорофилла. Например, в ФС2 первичным акцептором является феофитин, вторичным – хинон А (QA), хинон В (QB) – конечный акцептор. В ФС1 конечным акцептором является один из трех железозернистых комплексов.

Разделенные заряды в РЦ являются парамагнитными частицами, и их можно изучать с помощью методов ЭПР. Проблема с применением ЭПР для изучения первичных стадий фотосинтеза в том, что время жизни электрона на акцепторах лежит в интервале от сотни пикосекунд до микросекунд. Поэтому концентрация РЦ с разделенными зарядами мала. Но пары разделенных зарядов рождаются в спиновом состоянии, которое является неравновесным. Реакция первичного разделения зарядов в РЦ является неадиабатической, так что спины электрон-дырочной пары P^+Q^- (Р – донор, Q – акцептор электрона) в момент рождения пары наследуют синглетное состояние электронно-возбужденного донора. Неравновесность состояния электронных спинов, с одной стороны, весьма характерным образом сказывается на наблюдаемых ЭПР сигналах, а с другой стороны, позволяет регистрировать ЭПР сигналы от гораздо меньшего количества разделенных зарядов (примерно на два порядка) благодаря неравновесной поляризации спинов. Для исследования РЦ применяют так называемую времязрешенную стационарную (иначе сказать, переходную, по-английски *transient EPR*) ЭПР спектроскопию (разрешение 50–100 нс) и электронное спиновое эхо (временное разрешение 2–10 нс).

Из анализа спектров ЭПР и данных по электронному спиновому эхо, по модуляции сигналов спинового эха удалось получить уникальную информацию о структуре РЦ, о механизме разделения зарядов в РЦ (см., например, обзоры [2, 3]):

1. Была установлена природа донора и акцепторов электрона в РЦ. Показано, что донором является димер хлорофилла.

2. Установлена мультиплетность предшественника разделенных зарядов в РЦ: первичное разделение зарядов происходит из синглетного возбужденного состояния донора электрона.

3. Установлена геометрия расположения донора и акцепторов электрона в РЦ, найдены расстояния от донора до акцепторов электрона.

4. Определены времена жизни электрона на акцепторах.

5. Определено обменное взаимодействие в паре разделенных зарядов, и т.д.

Исследованием фотосинтеза занимаются многие. Для исследования этого процесса широко применяют ЭПР. Поэтому то, что мы знаем о фотосинтезе – это

результат труда очень многих исследователей. Последние десять лет мы развивали теорию ЭПР разделенных зарядов в РЦ ФС. Эта работа выполнялась в сотрудничестве с экспериментальной группой проф. Д. Штелика из Свободного университета Берлина. Можно отметить несколько наших теоретических результатов, полученных в прежние годы и получивших экспериментальное подтверждение (см., например, обзоры [2, 3]):

1. Теоретически было предсказано, что во время разрешенных спектров ЭПР РЦ интенсивность линий должна испытывать квантовые биения.

2. Теоретически была предсказана аномальная фаза сигнала электронного спинового эха для разделенных зарядов в РЦ. Метод *out-of-phase echo* сейчас широко применяется при изучении РЦ фотосистем.

3. Теоретически был предсказан сдвиг фазы квантовых биений интенсивности линий ЭПР последующей пары разделенных зарядов из-за спиновой динамики в короткоживущей предшествующей паре.

В 2001 году мы продолжали исследование РЦ ФС1 [5, 6]. На сегодня очень злободневный вопрос – по какой цепочке акцепторов переносится электрон в РЦ ФС1? В РЦ ФС1 электрон может в принципе переноситься либо только по левой, либо только по правой цепочке, либо по обеим цепочкам параллельно. Ранее было установлено, что в РЦ ФС2 электрон переносится только по одной из цепочек акцепторов. Поэтому вполне оправдано ожидать, что и в РЦ ФС1 только одна из ветвей РЦ активна в разделении зарядов. Но в то же время имеются данные по оптической спектроскопии РЦ ФС1 [4], которые можно рассматривать и как указание на участие обеих ветвей РЦ ФС1 в первичном разделении заряда. Чтобы помочь решить этот вопрос, предлагается такой подход. В белок в РЦ в заданное место предполагается пришить стабильный радикал, мы называем его спин-наблюдатель. Если такой спин-наблюдатель находится близко к одной из цепочек, то по изменениям в спектре ЭПР или модуляции сигнала спинового эха такого модифицированного РЦ можно будет делать выводы, какая цепочка акцепторов реально функционирует. В рамках этой общей стратегии исследований в 2001 году нами были численно смоделированы времязрешенные спектры ЭПР разделенных зарядов в РЦ ФС1. Расчеты были проведены как для немодифицированных РЦ (без спина-наблюдателя), так и для возможных вариантов модифицированных РЦ. Включение спина-наблюдателя добавляет новые параметры и поэтому мы довольно подробно проанализировали спектры ЭПР для немодифицированных РЦ. Пример полученного результата приведен на рис. 1 (из работы [5]).

Приведенные на рис. 1 результаты расчета получены для одного и того же набора молекулярно-кинетических и магнитно-резонансных параметров РЦ

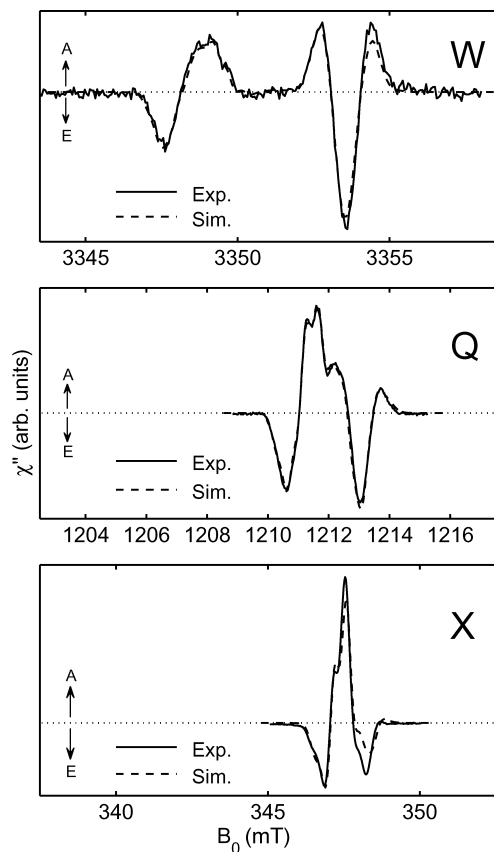


Рис. 1. Времяразрешенный спектр ЭПР разделенных зарядов в РЦ ФС1 для трех диапазонов частот (X-диапазон, 9.75 Гц; Q-диапазон, 34.0 Гц; W-диапазон, 94.0 Гц). Сплошные линии – данные эксперимента, пунктирные линии – результаты численного моделирования.

для всех трех рассмотренных диапазонов частот. Можно отметить, что удастся единым образом описать данные для разных диапазонов частот. Расчеты для немодифицированных РЦ представляют самостоятельный интерес, но они служили нам и полигоном, на котором мы отработывали алгоритм расчетов времяразрешенных спектров ЭПР модифицированных РЦ с добавлением спина-наблюдателя.

Алгоритм расчетов следующий. Записывается кинетическое уравнение для матрицы плотности изучаемой спиновой системы. Оно имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\mathcal{H}, \rho] + R\rho - \frac{K_S}{2}(P_S\rho + \rho P_S) - \frac{K_T}{2}(P_T\rho + \rho P_T).$$

Здесь первое слагаемое описывает спиновую динамику под действием спин-гамильтониана системы, который включает зеемановское взаимодействие спинов с внешними магнитными полями во вращающейся системе координат, обменное и диполь-дипольное взаимодействие парамагнитных частиц и сверхтонкое

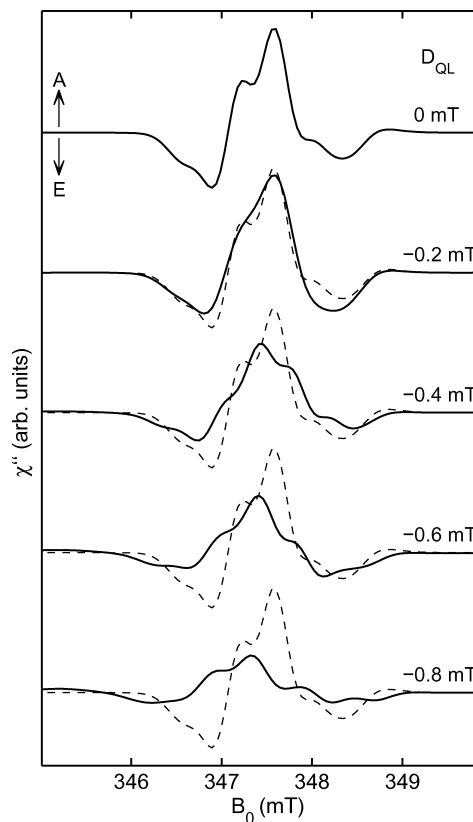


Рис. 2. Влияние диполь-дипольного взаимодействия (указано на кривых) между акцептором электрона и спином наблюдателем на спектр ЭПР в X-диапазоне частот. Пунктирные линии показывают форму спектра ЭПР немодифицированных РЦ.

взаимодействие электронов с магнитными ядрами, второе слагаемое описывает парамагнитную релаксацию, последние два слагаемых описывают рекомбинацию электрон-дырочных пар из синглетного и триплетного состояний соответственно. Эти уравнения решаются при условии, что электрон-дырочная пара рождается в синглетном состоянии, а спин-наблюдатель к моменту рождения пары находится в термодинамическом равновесии с решеткой. Во времяразрешенных экспериментах сигнал интегрируется в заданном интервале времени. Поэтому можно упростить численное моделирование спектра, если проинтегрировать кинетические уравнения по времени и решать получаемую после этого систему алгебраических уравнений с постоянными коэффициентами. Зная матрицу плотности системы, не представляет труда рассчитать спектр ЭПР по известным алгоритмам. В реальной ситуации РЦ ориентирован случайным образом. Поэтому расчеты проводятся для разных ориентаций и спектры складываются. Расчетные спектры на рис. 1 получены именно таким путем. Этим же путем мы рассчитали спектры ЭПР модифицированных РЦ ФС1 для разных расстояний от акцептора электрона до спина-наблюдателя. На рис. 2 показан пример трансформаций спектра ЭПР электрон-дырочной пары в

РЦ ФС1 при добавлении спина-наблюдателя (из работы [5]). Варьировалось диполь-дипольное взаимодействие между акцептором и спином наблюдателем. Это соответствует изменению расстояния между акцептором и спином-наблюдателем.

Эти расчеты показали, что спин-наблюдатель должен быть введен на расстоянии 2–2.5 нм, чтобы, с одной стороны, введение спина наблюдателя мало сказывалось на переносе электрона, и с другой стороны, приводило к заметным изменениям в спектроскопии ЭПР.

Наши ближайшие планы: мы предполагаем провести теоретический анализ поведения сигналов электронного спинового эха модифицированных РЦ ФС1. Наша работа ведется в тесном сотрудничестве с коллегами из Свободного университета Берлина (группа профессора Д. Штелика).

Литература

1. Jordan P., Fromme P., Witt H.T., Klukas O., Saenger W., Krauss N.: Three-dimensional structure of cyanobacterial photosystem I at 2.5 Å resolution. *Nature* **401**, 909 (2001)
2. Angerhofer A., Bittl R.: Radicals and radical pairs in photosynthesis. *Photochem. Photobiol.* **63**, 11–38 (1996)
3. Bittl R., Zech S.G.: Pulsed EPR spectroscopy on short-lived intermediates in photosystem I. *Biochim. Biophys. Acta* **1507**, 194–211 (2001)
4. Guergova-Kuras M., Boudreaux B., Joliot A., Joliot P., Redding K.: Evidence for two active branches for electron transfer in photosystem I. *PNAS* **98**, no. 8 (2001)
5. Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: Light induced radical pair intermediates in photosynthetic reaction centres in contact with an observer spin label: spin dynamics and effects on transient EPR spectra. *Mol. Phys.* **100**, 1311–1321 (2002)
6. Kandrashkin Yu.E., Vollmann W., Stehlik D., Salikhov K.M., van der Est A.: The magnetic field dependence of the electron spin polarization in consecutive spin-correlated radical pairs in type I photosynthetic reaction centres. *Mol. Phys.* **100**, 1431–1443 (2002)

Развитие методов спиновой химии: времяразрешенная ЭПР спектроскопия интермедиатов в фотохимии

А. А. Обычный, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

На базе серийного ЭПР спектрометра создана установка для исследования короткоживущих парамагнитных частиц с временным разрешением ~ 80 нс. На примере исследования процессов формирования поляризации электронов при фотолизе систем пентацен, тетрафенилпорфирина цинка с бензохиноном, порфирины и металлопорфирины со стабильными радикалами продемонстрированы возможности времяразрешенного спектрометра для исследования реакций с участием свободных радикалов и триплетных возбужденных состояний в широком диапазоне температур и концентраций.

Многие фотохимические реакции протекают с образованием активных короткоживущих промежуточных парамагнитных частиц. Этими интермедиатами могут быть электронно-возбужденные молекулы в триплетном состоянии, бирадикалы, радикальные (или ион-радикальные) пары. Прямым методом исследования таких веществ является спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). ЭПР спектроскопия дает уникальную информацию о каналах фотохимических превращений, о молекулярной динамике элементарных химических актов. ЭПР спектроскопия короткоживущих промежуточных состояний является одним из важнейших методов спиновой химии [1].

В большинстве случаев для таких короткоживущих частиц чувствительность обычного метода регистрации стационарных спектров ЭПР оказывается недостаточной из-за низкой стационарной концентрации парамагнитных частиц. Однако в таких интермедиатах формируется неравновесная поляризация электронных спинов. Например, в результате безизлучательного внутримолекулярного интеркомбинационного перехода триплетные подуровни возбужденной молекулы могут быть заселены таким образом, что поляризация электронных спинов может на порядки превышать равновесную поляризацию. В спинкоррелированных радикальных парах спиновая динамика приводит к созданию поляризации, которая может также сильно отличаться от равновесной. Формирование неравновесной спиновой поляризации открывает возможность изучения интермедиатов фотохимических реакций времяразрешенными методами ЭПР [2, 3].

В настоящее время метод прямого детектирования ЭПР широко используется для исследования короткоживущих интермедиатов. При таком способе детектирования обычно отказываются от использования модуляции внешнего постоянного магнитного поля [3]. Стандартный ЭПР спектрометр, работаю-

щий на частоте модуляции 100 кГц, имеет полосу пропускания усилителя максимум до 1 МГц [4]. Для усиления сигналов длительностью в несколько десятков наносекунд полосу пропускания следует расширить до величины 500 МГц.

Кроме того, необходимо использовать более быстросредействующую систему считывания сигнала. Для этой цели либо применяют специальные цифровые осциллоскопы типа LeCroy, либо используют boxcar интеграторы.

Блок-схема установки, реализованной в КФТИ, включает в себя (рис. 1): базовый магнит спектрометра; микроволновый мост с модифицированным усилителем, временное разрешение которого не менее 80 нс; цифровой осциллограф LeCroy 9400a в качестве цифрового накопителя сигнала; консоль спектрометра, снабженную оригинальным блоком управления

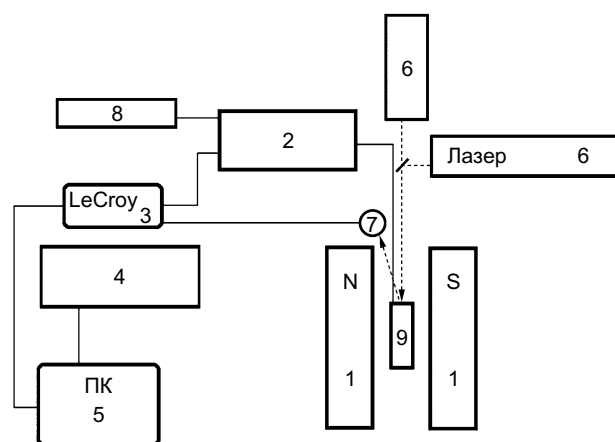


Рис. 1. Блок-схема установки по реализации времяразрешенного ЭПР эксперимента при фотолизе органических соединений. 1 – базовый магнит, 2 – микроволновый мост с модифицированным усилителем, 3 – цифровой осциллограф LeCroy 9400a, 4 – консоль спектрометра с блоком управления магнитным полем, 5 – персональный компьютер, 6 – импульсный и/или эксимерный лазер, 7 – фотодиод, 8 – цифровой частотомер, 9 – резонатор.

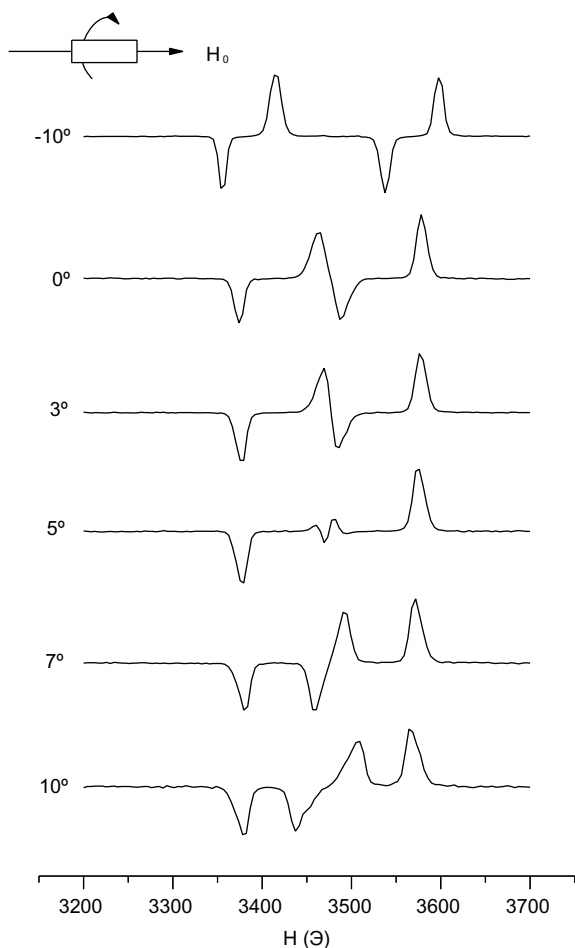


Рис. 2. Фотолиз кристалла пентацена при комнатной температуре. Представлены времяразрешенные спектры ЭПР возбужденного триплетного состояния пентацена, полученные в интервале интегрирования $0.5 \div 0.7$ мкс. Спектры приведены для разных значений угла поворота образца.

магнитным полем, персональный компьютер, координирующий работу составных блоков установки при помощи системы GPIB и управляющий ходом ведения эксперимента; импульсный лазер для проведения фотолиза (твердотельный YAG лазер M1520, энергия 80 мДж, $\lambda = 533$ нм, длительность импульса 15 нс) и/или эксимерный лазер (энергия 150 мДж, $\lambda = 308$ нм, длительность импульса 12 нс); фотодиод, запускающий систему регистрации осциллоскопа; цифровой частотомер; резонатор. Установка дополнительно снабжена температурным блоком фирмы Брукер, поддерживающим температуру в диапазоне от 100 до 550 К, и оригинальной струевой системой, позволяющей варьировать скорость потока в зависимости от частоты лазера, работа которой также управляется персональным компьютером.

Времяразрешенный эксперимент представляет собой построение двумерной спектрально-временной картины, которая описывает изменение спектра с течением времени. Происходит это нижеследующим образом.

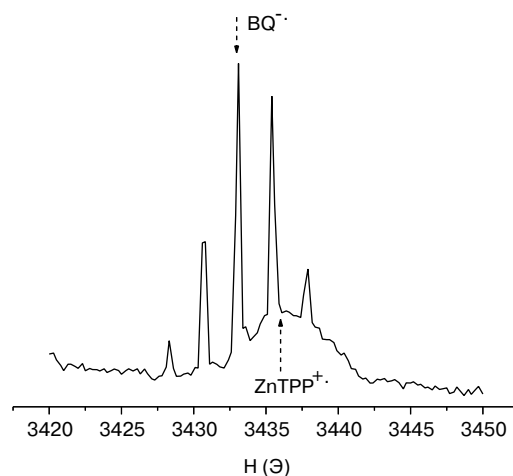


Рис. 3. Времяразрешенный спектр ЭПР, зарегистрированный при фотолизе раствора тетрафенилпорфирина цинка (1 mM) с бензохиноном (5 mM) в этиловом спирте при комнатной температуре. Окно интегрирования $1.05 \div 1.17$ мкс.

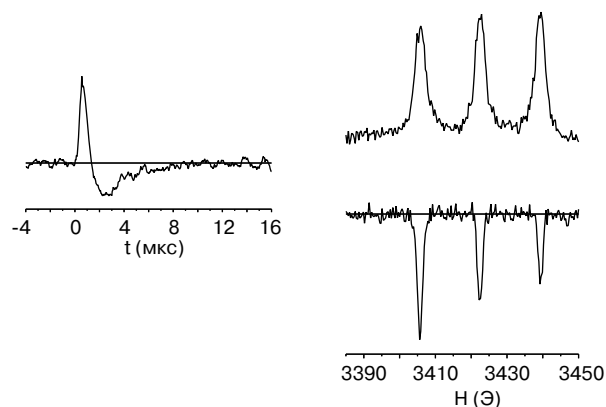


Рис. 4. Временной спад сигнала (слева) и времяразрешенные спектры, полученные при фотолизе системы октаэтилпорфирина цинка (ZnOEP) (1 mM) + TEMPO (1.7 mM) в толуоле для разных окон интегрирования: $0.6 \div 0.8$ мкс (справа сверху) и $2 \div 2.2$ мкс (справа внизу).

Персональный компьютер устанавливает величину внешнего магнитного поля, в котором при помощи импульсного лазерного возбуждения создается неравновесная поляризация спинов образца. Одновременно с каждым импульсом запускается система регистрации осциллоскопа (триггер) и считывается временной сигнал ЭПР, который накапливается заданное число раз. После этого накопленный сигнал с помощью интерфейса GPIB пересылается на персональный компьютер и записывается в числовом виде на жесткий диск. Затем этот цикл (от установки поля до записи усредненного временного сигнала) повторяется при новом значении постоянного магнитного поля.

Полученный набор экспериментальных данных обрабатывается компьютерной программой, позволяющей суммировать временные спады в заданных временных интервалах. Таким образом, мы получаем динамику изменения спектра ЭПР во времени.

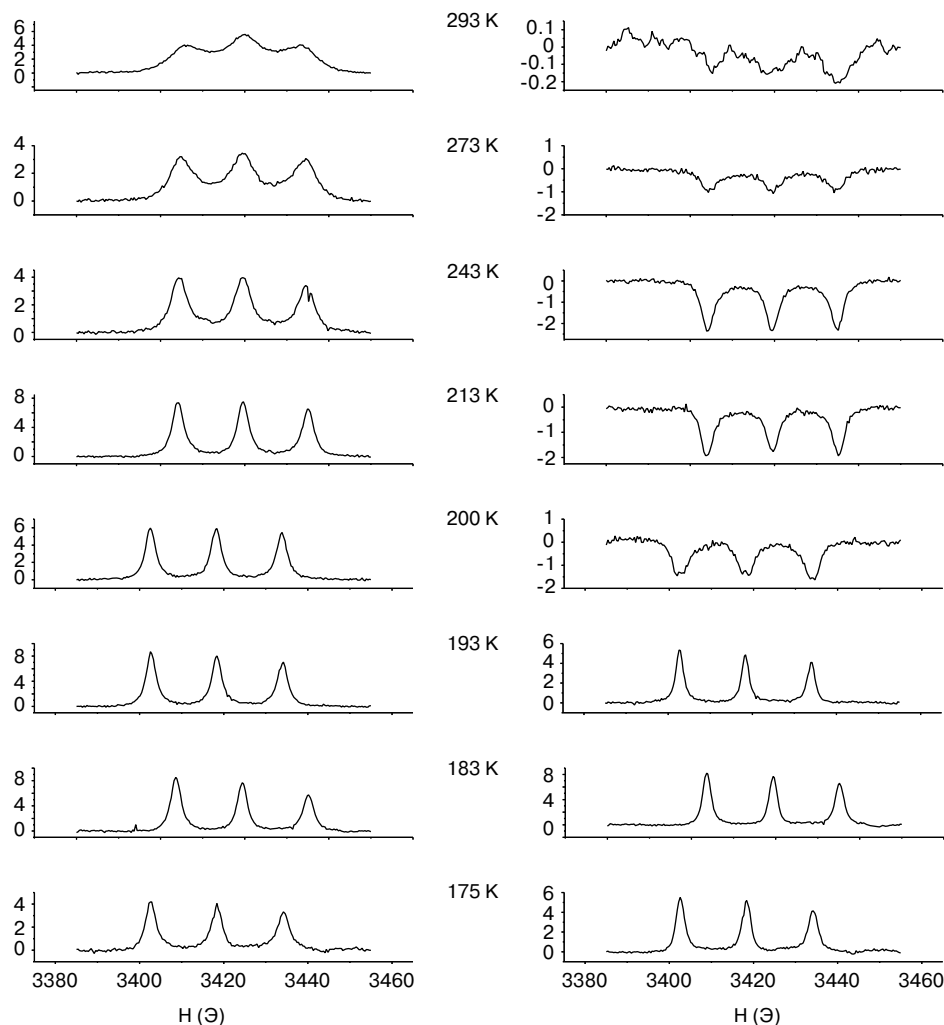


Рис. 5. Времяразрешенные спектры ЭПР (соответствующие электронной поляризации молекул ТЕМПО), полученные при разных температурах фотолиза системы ZnOEP (1 mM) + ТЕМПО (17 mM) в толуоле. Спектры в левом столбце соответствуют окну интегрирования $0.6 \div 0.8$ мкс, в правом столбце окну интегрирования $2.0 \div 2.2$ мкс. По оси Y отложена интенсивность сигнала ЭПР в относительных единицах, по оси X – значение магнитных полей, измеряемый диапазон которых одинаков для всех спектров и представлен на нижних спектрах.

Рисунки 2–5 иллюстрируют реализацию времяразрешенного эксперимента при исследовании поляризации электронных спинов.

Отметим, что спектры ЭПР, приведенные на рис. 2–5 не являются производными спектра, как это имеет место в стандартной ЭПР спектроскопии с использованием модуляции внешнего магнитного поля. Поэтому отрицательный знак сигнала на рис. 2–5 означает эмиссию, а положительный знак – поглощение.

В создании установки принимали участие сотрудники лаборатории: Гнездилов О.И., Цейтлин М.П., Васина О.А., Владимирцев Ю.В.

Литература

1. McLauchlan K.A.: Modern Pulsed and Continuous-Wave Transient Electron Spin Resonance (Hoff A.J., ed.), Chap. 7. New York: John Wiley & Sons 1990.
2. Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М.: Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск: Наука 1978.
3. McLauchlan K.A.: Time-Resolved EPR, in: Advanced EPR (Hoff A.J., ed.), Chap. 10. Amsterdam: Elsevier 1989.
4. Керрингтон А., Мак-Лечлан Э.: Магнитный резонанс и его применение в химии. Москва: Мир 1970.

Проявление двухквантовых переходов в оптически детектируемых спектрах ЭПР (ОД ЭПР) спин-коррелированных радикальных пар в мицеллах

Л. Р. Мурсалимов, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

На основе численного решения кинетического уравнения для матрицы плотности радикальных пар (РП), диффундирующих в сферических мицеллах, рассчитаны ОД ЭПР спектры РП. Показано, что спектры содержат линии, связанные с двухквантовыми переходами. Исследована зависимость ширины линии двухквантового перехода от молекулярно-кинетических и магнитно-резонансных параметров РП.

В химических и фотохимических реакциях нередко образуются промежуточные состояния, обладающие парамагнитными свойствами. Исследуя эти промежуточные состояния методами ЭПР, можно получить информацию о механизме химических и фотохимических реакций. К таким состояниям можно отнести радикальную пару (РП) [1]. На спиновое состояние РП могут оказывать влияние магнитные взаимодействия, такие как зеемановское, сверхтонкое, спин-спиновое (обменное и диполь-дипольное). Также на спиновое состояние РП может влиять внешнее переменное магнитное поле, причем резонансным образом. При совпадении частоты переменного магнитного поля с частотой ЭПР перехода в РП влияние переменного магнитного поля проявляется наиболее сильно.

Одним из перспективных методов исследования короткоживущих РП является метод оптического детектирования спектров ЭПР (ОД ЭПР) [1]. Суть этого метода можно пояснить следующим образом. Магнитные взаимодействия в системе “перемешивают” синглетное и триплетное спиновые состояния РП. При рекомбинации РП в молекулу из синглетного состояния может наблюдаться рекомбинационная флуоресценция. При рекомбинации РП в молекулу из триплетного состояния может наблюдаться рекомбинационная фосфоресценция. Если регистрировать изменение интенсивности рекомбинационной фосфоресценции или флуоресценции в зависимости от частоты переменного магнитного поля, то получим спектр ОД ЭПР РП [2].

Ранее было сделано предсказание о появлении дополнительных узких линий в спектрах ОД ЭПР РП [2]. В работе [2] рассматривалась статическая модель РП, когда партнеры РП занимают жестко фиксированные положения в пространстве и спин-спиновое взаимодействие между радикалами не зависит от времени. Но в жидкости расстояние между партнерами РП и взаимная ориентация радикалов пары случайным образом изменяются, и можно предположить, что эти узкие линии как-то “размажутся”. Поэтому в этой работе ставилась задача исследовать возможность

проявления узких линий в спектрах ОД ЭПР РП при учете диффузии радикалов, которая модулирует случайным образом спин-спиновое взаимодействие.

Парциальная матрица плотности РП с заданным расстоянием r между партнерами пары $\rho(r, t)$ удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\frac{\partial \rho(t, r)}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \rho(t, r)}{\partial r} \right) - \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}(r), \rho(t, r)], \quad (1)$$

где в правой части первое слагаемое описывает изменение матрицы плотности, вызванное взаимной диффузией партнеров пары, а второе слагаемое – спин-гамильтонианом $\mathcal{H}(r)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(r) &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \\ \mathcal{H}_0 &= (g_A \beta B_0 - \hbar \omega) S_{Az} + (g_B \beta B_0 - \hbar \omega) S_{Bz} \\ &\quad - \hbar J(r) (1/2 + 2S_A S_B), \\ \mathcal{H}_1 &= \hbar \gamma B_1 (S_{Ax} + S_{Bx}), \end{aligned} \quad (2)$$

где g_A и g_B – g -факторы радикалов пары А и В, β – магнетон Бора, γ – гиромагнитное отношение для электрона, B_1 – амплитуда переменного поля с частотой ω . Предполагаем, что обменный интеграл экспоненциально убывает с ростом r :

$$J(r) = J_0 \exp(-\lambda(r - b)), \quad (3)$$

где b – радиус рекомбинации РП. Конкретные расчеты были нами проведены для РП, родившихся в триплетном состоянии. В качестве граничных условий мы использовали равенство диффузионного потока скорости гибели РП за счет рекомбинации на радиусе рекомбинации

$$D \nabla \rho(t, r) \Big|_{r=b} = \frac{W}{2} (P_S \rho(t, b) + \rho(t, b) P_S), \quad (4)$$

где $W = K\Delta r$, K – константа скорости рекомбинации синглетных РП, Δr – толщина слоя рекомбинации, P_S – оператор проектирования в синглетное состояние. На внешнем радиусе R мицеллы граничное условие имеет вид

$$D\nabla\rho(t,r)|_{r=R} = -V\rho(t,R), \quad (5)$$

где V – скорость выхода радикалов из мицеллы. Вероятность рекомбинации РП равна

$$P = 4\pi b^2 \Delta r K_S \int \rho_{SS}(t,b) dt. \quad (6)$$

Спектр ОД ЭПР рассчитывался следующим образом. С помощью приведенных выше уравнений рассчитывали вероятность рекомбинации РП в присутствии переменного поля и без него, разность этих вероятностей дает относительную интенсивность спектра ОД ЭПР

$$I_{\text{ОДЭПР}} \propto P(B_1) - P(B_1 = 0). \quad (7)$$

Проведенные расчеты показали, что и для РП в жидкости, обсуждаемые узкие линии в спектрах ОД ЭПР РП должны проявляться, не размазываться. Форма узкой линии очень близка к лоренцевой (см. рис. 1).

Проведен подробный анализ формы узкой линии в спектре ОД ЭПР в зависимости от подвижности радикалов, их реакционной способности, магнитно-резонансных параметров РП. На рис. 2 приведена зависимость пиковой интенсивности узкой линии от амплитуды переменного магнитного поля.

При малых значениях B_1 пиковая интенсивность ведет себя как B_1^4 , а при больших B_1 пиковая интенсивность выходит на плато. Аналогичная зависимость

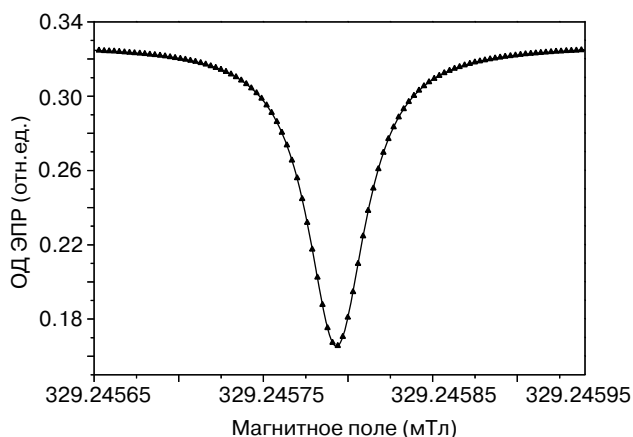


Рис. 1. Сравнение формы узкой линии ($\blacktriangle$) с распределением Лоренца (сплошная линия). Расчет проведен для следующих параметров [3]: $g_A = 2.0023$, $g_B = 2.0043$, $J_0 = 0$, $K_S = 5 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$, $D = 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{c}$, $\Delta r = 0.1 \text{ nm}$, $b = 0.4 \text{ nm}$, $R = 5 \text{ nm}$, $r_0 = b$, $B_1 = 0.01 \text{ mT}$, $V = 10^{-4} \text{ cm/c}$.

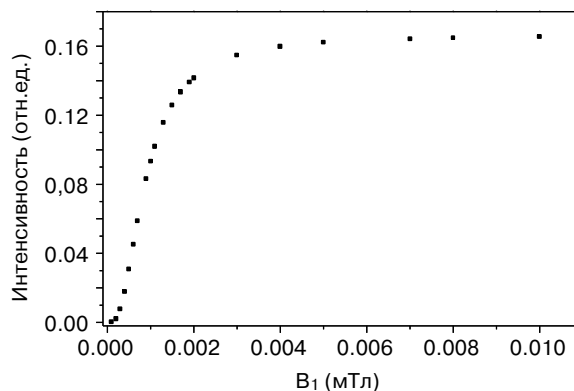


Рис. 2. Зависимость пиковой интенсивности узкой линии от B_1 . Расчет проведен для следующих параметров [3]: $g_A = 2.0023$, $g_B = 2.0043$, $J_0 = 56860 \text{ mT}$, $\lambda = 10 \text{ nm}$, $K_S = 5 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$, $D = 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{c}$, $\Delta r = 0.1 \text{ nm}$, $b = 0.4 \text{ nm}$, $R = 5 \text{ nm}$, $r_0 = b$, $V = 10^{-4} \text{ cm/c}$.

имеет место для линии двухквантового перехода в традиционном ЭПР. Это дает основание интерпретировать узкую линию как линию двухквантового перехода в спектре ОД ЭПР РП [3]. В обычном спектре ЭПР линия двухквантового перехода отсутствует, если спины пары не взаимодействуют. В ОД ЭПР спектре линия двухквантового перехода проявляется и без спин-спинового взаимодействия в паре. Мы это связываем с тем, РП образуются в так называемом запутанном (entangled) состоянии, что связано с взаимодействием спинов пары в прошлом, в молекуле-предшественнице РП. Мы планируем вести дальнейшие исследования природы возникновения узкой линии в спектрах ОД ЭПР РП.

Для статической ситуации была предложена методика определения эффективного времени жизни РП по ширине узкой линии в спектрах ОД ЭПР РП [2]. Ширина узкой линии в спектре ОД ЭПР равна

$$\Delta B_0 = \frac{\omega_1}{\Delta\tau} \frac{\hbar}{(g_A + g_B)\beta} \propto \frac{\omega_1}{\Delta\tau}, \quad (8)$$

где Δ – разность зеемановских частот радикалов пары, τ – время жизни РП.

В данной работе анализ формы узкой линии в спектрах ОД ЭПР РП показал, что уравнение (8) справедливо и для случая, когда диффузионное движение радикалов модулирует спин-спиновое взаимодействие между радикалами пары [3].

Литература

1. Салихов К.М.: 10 лекций по спиновой химии. Казань: Унипресс 2000.
2. Salikhov K.M., Sakaguchi Y., Hayashi H.: A contribution to the theory of spin-correlated radical pairs. Chem. Phys. **220**, 335–371 (1997)
3. Mursalimov L.R., Salikhov K.M.: A manifestation of two-quantum transitions in the ODEPR spectra of the spin-correlated radical pairs in micelles. Appl. Magn. Reson. **21**, 223–248 (2001)

ЭПР томография в средах с проводимостью и диэлектрическими потерями

М. П. Цейтлин, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Решен ряд модельных задач для проводящих объектов и показана принципиальная возможность применения метода ЭПР томографии для поглощающих поле образцов. Также были разработаны новые алгоритмы восстановления пространственного распределения, которые были применены для визуализации скин-эффекта в проводящем угольном цилиндре.

Метод ЭПР томографии (ЭПРТ) имеет широкое применение во многих областях науки и практики. Дефектоскопия, изучение процессов диффузии радикалов в живых и неживых биологических объектах, наблюдение за кинетикой медленно протекающих химических реакций – вот далеко не полный круг задач, которые позволяет решить этот метод.

Существующие алгоритмы магнитно-резонансной томографии, на основе которых строится пространственное распределение спинов, были разработаны для изучения диэлектрических объектов. В этом случае величина поглощаемой образцом мощности определяется χ'' , мнимой частью комплексной восприимчивости. Для образцов с неоднородным распределением спинов спектр магнитного резонанса пропорционален величине

$$P(\omega) \propto \int_V \chi''(\mathbf{r}, \omega) d\mathbf{r}, \quad (1)$$

где $\chi''(\mathbf{r}, \omega)$ – мнимая часть локальной магнитной восприимчивости, а интегрирование ведется по всему объему образца. Уравнение (1) справедливо лишь до тех пор, пока магнитная компонента переменного электромагнитного поля имеет одно и то же значение во всех точках образца, т.е. $H_1(\mathbf{r}) = \text{const}$. Это позволяет решать задачу о картине распределения парамагнитных центров, исключив из рассмотрения переменное поле. Так именно и поступают, когда образец представляет собой диэлектрик, не искажающий силовых линий магнитного поля ненагруженного резонатора [1–3].

Но это не всегда так. Хорошо известно, что материалы, обладающие проводимостью σ и имеющие большое значение комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$, взаимодействуют с переменным электромагнитным полем, искажают его силовые линии. Проникающая в образец волна изменяется как по амплитуде, так и по фазе. Это существенно усложняет спектр магнитного резонанса. Традиционные алгоритмы томографии в этой ситуации уже не могут применяться. Возникает не-

обходимость создания новых методов построения изображений с учетом неоднородности переменного высокочастотного поля.

К объектам такого типа относятся электролиты, графиты, угли, полупроводники, металлы, различные композиционные проводящие материалы.

Наибольший интерес представляют водосодержащие биологические ткани и живые организмы. С точки зрения электродинамики, такого рода объекты – это сложные гетерогенные структуры с неоднородным распределением проводимости и диэлектрической проницаемости. Поскольку клетки организмов содержат большое количество воды с растворенными в ней солями, имеется ионная проводимость. С другой стороны, в спектре поглощения переменного электромагнитного поля $\varepsilon''(\omega)$ водой имеется сильно выраженный максимум в области микроволновых частот. Это хорошо известная проблема в ЭПР. Ее решают либо понижением частоты (до величин порядка 1 ГГц) с потерей общей чувствительности спектрометра, либо используют плоскую специальную кювету, располагая ее в пучности переменного магнитного поля с тем, чтобы свести диэлектрические потери до минимума.

Нами была поставлена цель – разработать основы применения метода ЭПРТ для изучения образцов, активно поглощающих переменное электромагнитное поле (ЭПРТ поглощающих сред). Для этого мы рассмотрели несколько модельных задач (цилиндр, полупространство) и на их примере разработали принципы построения изображения (алгоритмы томографии), применимые для подобных систем.

В предыдущие годы нами были получены следующие результаты:

1. Экспериментально и теоретически было показано, что форма спектра ЭПР, записанного в градиенте внешнего магнитного поля, изменяется не зеркальным образом при замене направления градиента на противоположный, как это имеет место для диэлектрических образцов. Отсюда следует, что для восстановления одной комплексной одномерной проекции изображения необходимо использовать два спек-

тра, зарегистрированные в поле градиентов, равных по величине и противоположных по направлению [4, 5].

2. Для образца в виде бесконечной полуплоскости, поглощающей переменное поле, было получено следующее выражение для спектра ЭПР:

$$P(\omega) \propto \text{Im} \omega \int_V m_-(\mathbf{r}, \omega) h_{0-}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2)$$

Здесь $m_-(\mathbf{r}, \omega)$ и $h_{0-}(\mathbf{r})$ – комплексные не зависящие от времени амплитуды локальных значений намагниченности и магнитной компоненты переменного поля в нулевом приближении по χ .

Для локализованных спинов уравнение (2) принимает вид:

$$P(\omega) \propto \text{Im} \omega \int_V \chi(\mathbf{r}, \omega) h_{0-}^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3)$$

Эти теоретические результаты позволили нам построить алгоритмы восстановления пространственного распределения парамагнитных центров и переменного магнитного поля (амплитуду и фазу) [6].

Рассмотрим одномерный образец с одним типом парамагнитных центров с концентрацией $n(z)$. В основе алгоритма восстановления распределения $F(z) = n(z)h_{0-}(z)^2$ лежит идея использования для восстановления одной комплексной проекции двух спектров

$$\begin{cases} S(\Delta, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\Delta - gz) F(z) dz \\ S(\Delta, -g) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\Delta + gz) F(z) dz \end{cases}, \quad (4)$$

записанных при противоположных значениях линейного градиента g постоянного магнитного поля. Здесь мы ввели $\Delta = \omega - \omega_0$ (ω_0 соответствует первому моменту резонансной линии) для того, чтобы зафиксировать центральное положение спектра. Комплексные функции (4) получены из реальных спектров (3) с помощью соотношения Крамерса-Кронинга. Инвертируем относительно ω_0 линию $S(\Delta, -g)$

$$S(-\Delta, -g) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(-\Delta + gz) F(z) dz \quad (5)$$

и сложим ее с $S(D, g)$

$$S(\Delta, g) + S(-\Delta, -g) = \int_{-\infty}^{\infty} (\chi(\Delta - gz) + \chi(-\Delta + gz)) F(z) dz. \quad (6)$$

Поскольку реальная часть χ – асимметричная функция аргумента Δ , а мнимая часть – симметричная, запишем:

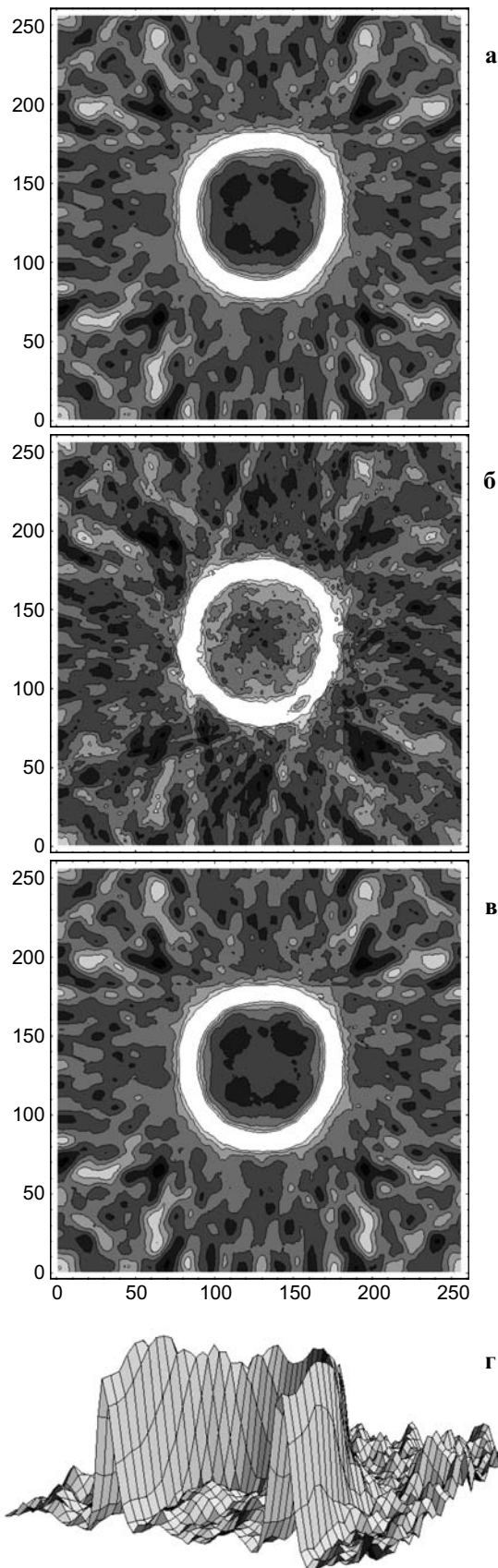


Рис. 1. а Реальная часть, б мнимая часть, в модуль комплексной функции распределения микроволнового поля (вид сверху). г Псевдо-трехмерное изображение сечения модуля полученного изображения.

$$S(\Delta, g) + S(-\Delta, -g) = 2i \int_{-\infty}^{\infty} \chi''(\Delta - gz) F(z) dz. \quad (7)$$

Выделив по отдельности реальную и мнимую части

$$\begin{cases} \operatorname{Re}(S(\Delta, g) + S(-\Delta, -g)) = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi''(\Delta - gz) \operatorname{Im}(F(z)) dz \\ \operatorname{Im}(S(\Delta, g) + S(-\Delta, -g)) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi''(\Delta - gz) \operatorname{Re}(F(z)) dz, \end{cases} \quad (8)$$

получим два независимых реальных уравнения свертки с положительным реальным ядром χ'' . Соотношения (8) позволяют использовать стандартное программное обеспечение томографии для получения реальной и мнимой частей $F(z)$ по отдельности.

Экспериментальный набор одномерных проекций, зарегистрированных при повороте образца относительно линейного градиента внешнего магнитного поля, может также быть обработан стандартными процедурами восстановления изображения для получения двухмерной картины.

В работе [6] нами было показано, что уравнение (2) применимо и для бесконечного цилиндра. Используя разработанный нами алгоритм восстановления ЭПРТ изображений, в [6] был экспериментально визуализирован скин-слой. В качестве образца использовался проводящий угольный цилиндр радиуса $a = 3$ мм, высоты $h = 9$ мм. При проводимости образца $\sigma = 455 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ переменное микроволновое поле проникало на глубину (0.5 мм), значительно меньшую радиуса цилиндра, что позволило нам впервые наблюдать явление скин-эффекта методом ЭПРТ. Результат представлен на рис. 1. Хорошо видно, что

разработанные нами алгоритмы позволили визуализировать скин-слой, который представлен на рисунке в виде белых колец. Несмотря на то, что парамагнитные центры равномерно распределены по всему объему образца, сигнал виден только от узкого слоя вблизи поверхности цилиндра. Это происходит из-за того, что в более удаленных от поверхности слоях поле пренебрежимо мало.

Таким образом, мы нашли общее выражение для сигнала ЭПР поглощающих объектов (1, 2), на основе которых были разработаны алгоритмы томографии (3–8). Это позволило нам провести реальный эксперимент и получить изображение скин-слоя в угольном проводящем цилиндре.

В дальнейшем мы планируем рассмотреть объекты более сложной геометрии и учесть диффузию магнитных моментов (электронов проводимости).

Литература

1. Eaton G.R., Eaton S.S., Ohno K.: EPR Imaging and in vivo EPR. CRC Press 1991.
2. Grinberg O.Y., Smirnov A.I., Swartz H.M.: High spatial resolution multi-state EPR Oximetry. The use of a convolution-based fitting method. J. Magn. Reson. **152**, 247 (2001)
3. Maltempo M.M.: Differentiation of spectral and spatial components in EPR imaging using 2-D image reconstruction algorithms. J. Magn. Reson. **69**, 156 (1986)
4. Aminov K.L., Tseitlin M.P., Salikhov K.M.: 1-D EPR imaging of conducting and lossy-dielectric samples. Appl. Magn. Reson. **16**, 341 (1999)
5. Tseitlin M.P., Aminov K.L., Salikhov K.M.: Magnetic resonance spectrum of localized spins in conductive materials in a linear field gradient. Appl. Magn. Reson. **16**, 325 (1999)
6. Tseitlin M.P., Salikhov K.M.: Two-dimensional EPR image visualization of a skin effect for a conductive coal cylinder. Appl. Magn. Reson. **20**, 159–170 (2001)

ЭПР спектроскопия некоторых квазиодномерных соединений

В. К. Воронкова, Р. Т. Галеев

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Изучены некоторые особенности ЭПР спектроскопии линейных цепочек, в которых реализуются анизотропные спин-спиновые взаимодействия. Представлены первые результаты ЭПР исследования кристаллов, цепочки которых построены из димерных фрагментов ионов неодима. Обнаружено, что анизотропные взаимодействия между ионами неодима приводят к сложной форме спектра, и предложена модель, описывающая спектры цепочки как суперпозицию спектров от фрагментов цепочки разной длины. Разделение на фрагменты связано с чередованием в цепочке магнитных и немагнитных состояний димеров по закону статистики. Для соединения $[\text{Cu}(\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4\text{N})\text{Cl}]_n$, построенного из геликоидальных цепочек медных полиэдров, обнаружены особенности проявления эффектов ближнего порядка.

Одномерные соединения привлекают внимание исследователей прежде всего как модельные системы, для которых некоторые задачи могут быть решены точно. В последние года особый интерес проявляется к цепочкам с альтернированием взаимодействия, к спиновым “лестницам”. В этих случаях для описания взаимодействия внутри цепочки необходимо вводить несколько тензоров спин-спинового взаимодействия.

Магнитные свойства таких систем существенно зависят от соотношения между величинами параметров, описывающих взаимодействия в них; могут реализоваться различные нетривиальные ситуации. Однако, при анализе свойств линейных цепочек с альтернированием взаимодействия не всегда учитывается анизотропия взаимодействия. Для систем, построенных из ионов с замороженным орбитальным моментом, такое приближение обычно оправдано.

Для изучения влияния анизотропии взаимодействия и симметрии парного фрагмента на магнитные свойства квазиодномерных систем, мы предприняли исследования цепочек, построенных из димерных фрагментов ионов неодима. Насколько нам известно, это первое ЭПР исследование таких неодимовых кристаллов. Для ионов неодима характерна большая анизотропия локальных свойств и анизотропия обменного взаимодействия. Основной терм иона трехвалентного неодима ($4f^3$) $^4I_{9/2}$ расщепляется в поле низкой симметрии на пять крамеровских дублетов. При низких температурах, когда заселен только нижний из пяти дублетов, ЭПР наблюдается за счет переходов между уровнями этого дублета [1]. Для описания резонанса на одиночных центрах неодима вводят эффективный спин $S' = 1/2$. Расщепление дублета в магнитном поле описывается эффективным g -тензором, степень анизотропии которого целиком определяется анизотропией основного состояния. При исследовании взаимодействия между ионами неодима мы рассматривали целый круг вопросов, связанных с харак-

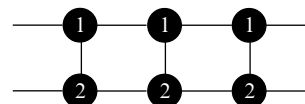
тером и природой анизотропии, зависимостью параметров от структуры кристаллов и мостиковых фрагментов, все эти вопросы актуальны для исследования взаимодействия между ионами неодима [2], но в данном сообщении мы остановимся, главным образом, на особенностях проявления анизотропии взаимодействия в спектрах ЭПР цепочек и, анализируя их, рассмотрим возможности метода ЭПР для исследования эффектов, связанных с анизотропными взаимодействиями в одномерных соединениях.

Мы представляем результаты исследований соединений, которые дают примеры изучения трех типов цепочек.

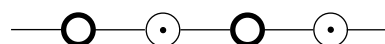
Тип 1. Цепочки построены из двух разных чередующихся димерных фрагментов, при этом димеры образованы эквивалентными полиэдрами парамагнитных ионов 1 и 2:



Тип 2. Цепочки построены из димерных фрагментов одного типа, при этом димеры образованы неэквивалентными полиэдрами парамагнитных ионов 1 и 2 (центр симметрии в димерах отсутствует):



Тип 3. Геликоидальные цепочки; две ближайшие позиции в цепочке магнитно-неэквивалентны и взаимодействие между ними предполагает наличие антисимметричной части взаимодействия:



Первые две ситуации реализуются в кристаллах: $[\text{Nd}_2(\text{Cl}_3\text{C}_2\text{O}_6)(\text{H}_2\text{O})_3]_n \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (I) и $[\text{Nd}(\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})_4] \times$

$\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (II), соответственно, и третья ситуация рассмотрена на примере соединения $[\text{Cu}(\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4\text{N})\text{Cl}]_n$ (III).

Монокристаллы ионов неодима синтезированы под руководством Я. Легенджевич на Факультете химии Вроцлавского университета, Польша.

Соединения с ионами меди синтезированы в Институте химии МАН, Молдова под руководством К. И. Туртэ. Структурные исследования соединения III выполнены Ю. А. Симоновым и С. Шова, Институт прикладной физики МАН, Молдова.

ЭПР исследование монокристалла I показало, что анизотропные взаимодействия между ионами неодима в цепочке приводят к сложной форме спектра, в котором выделены две группы сигналов, каждая из которых соответствует одному из димеров цепочки. В цепочках кристалла (I) расстояния $\text{Nd}_1\text{-Nd}_1$, $\text{Nd}_1\text{-Nd}_2$ и $\text{Nd}_2\text{-Nd}_2$ равны 4.430, 4.823 и 4.267 Å, соответственно. Видно, что расстояние между димерными фрагментами незначительно превышает расстояние внутри димерных фрагментов и определяющую роль в разделении цепочки на димерные фрагменты играет, вероятно, различие в числе мостиковых каналов, связывающих эквивалентные $\text{Nd}_1\text{-Nd}_1$, $\text{Nd}_2\text{-Nd}_2$ и неэквивалентные комплексы ионов неодима $\text{Nd}_1\text{-Nd}_2$. Все ионы неодима имеют восьмикратную координацию в виде квадратной антипризмы [3, 4]. Обнаружено, что спектры от каждого димера расщеплены за счет анизотропного взаимодействия с соседями по цепочке (рис. 1). Подчеркнем, что ранее в литературе обсуждался только эффект уширения сигналов за счет анизотропии взаимодействия в цепочках. Дополнительное расщепление спектра димера наблюдается и для ориентации, когда два димерных фрагмента практически эквивалентны (рис. 1а), что явилось наиболее неожиданной особенностью для спектра ЭПР цепочки. Форма спектров ЭПР проанализирована как суперпозиция спектров от фрагментов цепочки разной длины, возникающих за счет чередования в цепочке магнитных триплетных и немагнитных синглетных состояний. В качестве первого приближения цепочку можно рассматривать как состоящую из не взаимодействующих димеров, в каждый конкретный момент времени димер находится или в синглетном S или триплетном T состоянии, и цепочку можно представить как последовательность этих состояний, возникающих по закону статистики. Взаимодействия между триплетными T-T и синглетом и триплетом S-T приводят к существенно разным эффектам в спектре. Первые из них ответственны за дополнительные расщепления спектра относительно спектра от изолированного триплетного, вторые – за появление дополнительных, более слабых сигналов. Эти сигналы соответствуют переходам, которые запрещены для не взаимодействующего димера. Взаимодействие между димерами частично снимает этот запрет. Степень разрешенности зависит от соотношения между взаимо-

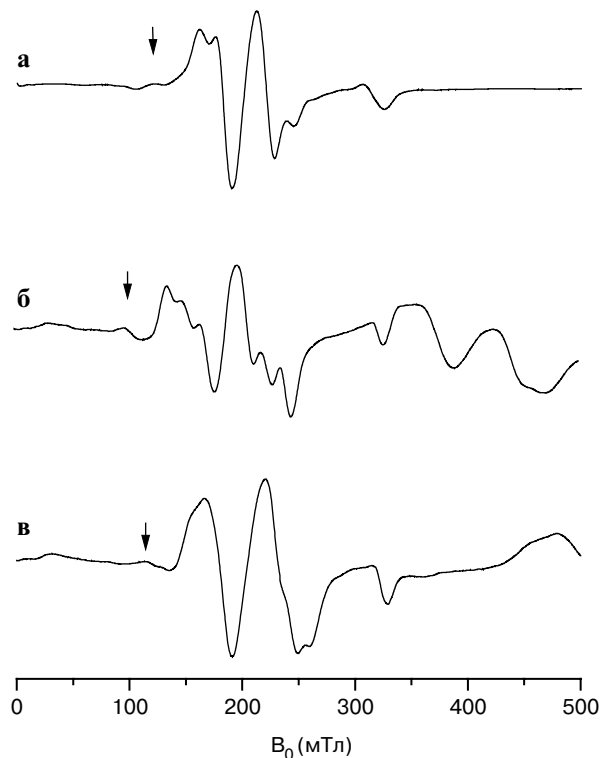


Рис. 1. Спектры ЭПР кристалла I при $T = 4.2$ К для нескольких ориентаций магнитного поля в плоскости ac . Стрелками показаны “запрещенные” переходы [5].

действиями внутри и между димерами. Наблюдение этих дополнительных, частично “запрещенных” сигналов позволило определить величину изотропного внутридимерного обмена. Показано, что форма спектра определяется в первую очередь суперпозицией спектров изолированного триплетного состояния ($S = 1$), двух и трех взаимодействующих триплетных состояний с определенными весовыми вкладами (рис. 2) [5].

ЭПР исследования кристалла II, построенного из эквивалентных димеров [6], подтвердили правильность предложенной модели, согласно которой цепочка рассматривается как последовательность взаимодействующих и не взаимодействующих центров. Однако форма спектров ЭПР кристалла II имеет свои особенности, связанные с изменением строения димерного фрагмента и величины взаимодействия между димерными фрагментами. ЭПР исследование монокристалла II показало [7], что увеличение соотношения между анизотропией внутридимерного и междимерного взаимодействий приводит к дополнительному подавлению спиновой корреляции вдоль цепочки. Для этого кристалла взаимодействия между димерами проявляются в спектре ЭПР в ограниченной области ориентации кристалла в магнитном поле в виде дополнительных сигналов (рис. 3). Эти сигналы могут быть описаны только с учетом взаимодействия двух и трех димеров, но вероятность образования таких фрагмен-

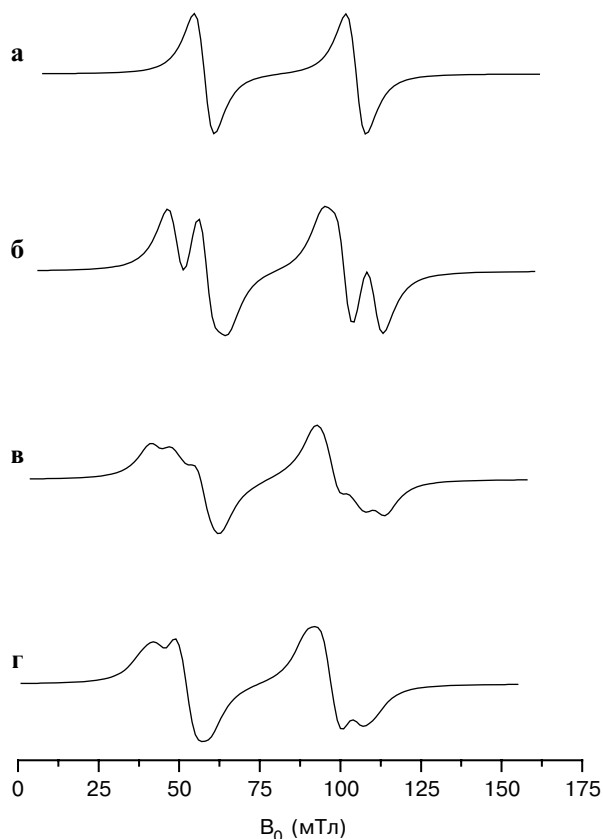


Рис. 2. Рассчитанные спектры для изолированного триплета (а), двух (б) и трех взаимодействующих эквивалентных триплетов (с) и суммы этих спектров (д) с весовыми вкладами $P_1:P_2:P_3 = 16:12:9$; величина расщепления триплетов: $D = 0.04 \text{ см}^{-1}$; параметры взаимодействия между триплетами: $K_{12,zz} = 0.008 \text{ см}^{-1}$, $K_{12,xx} = K_{12,yy} = -0.004 \text{ см}^{-1}$, ширина линий $\delta B = 8 \text{ мТл}$ [5].

тов уменьшилась по сравнению с кристаллом I. Форма спектра димерного фрагмента соединения II имеет свои особенности, связанные с отсутствием центра симметрии, этот вопрос мы будем рассматривать отдельно. Отметим только, что отсутствие центра симметрии приводит к перемешиванию спиновых состояний, что в свою очередь частично снимает запрет на “запрещенные” переходы, интенсивность которых для некоторых ориентаций данного кристалла в магнитном поле сравнима с основными сигналами. Детектирование сигналов, соответствующих этим переходам, позволяет определить величину изотропного внутридимерного взаимодействия непосредственно из спектров ЭПР. Для кристалла I, как отмечалось, синглетные-триплетные состояния димеров перемешаны за счет междимерного взаимодействия и из положения слабых сигналов, соответствующих этим переходам (на рис. 1 показаны стрелками), определена величина изотропного обмена.

Отметим также особенности, связанные с низкосимметричным характером анизотропного взаимодействия, обнаруженные нами при исследовании геликоидальной цепочки, построенной из медных ком-

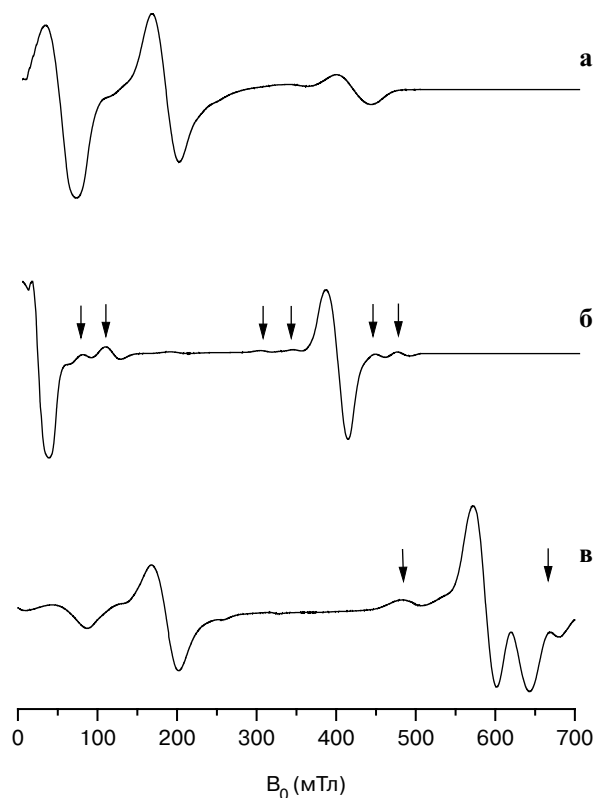


Рис. 3. Спектры ЭПР кристалла II при $T = 4.2 \text{ К}$ для нескольких ориентаций кристалла в магнитном поле.

плексов (соединение II). Исследовались поликристаллические образцы.

Температурная зависимость магнитной восприимчивости (измерения проведены в Университете Флоренции, Италия под руководством Д. Гаттески, рис. 4) описывается в модели линейной цепочки с величиной антиферромагнитного взаимодействия $J = 2.5 \text{ см}^{-1}$. В спектрах ЭПР при понижении температуры

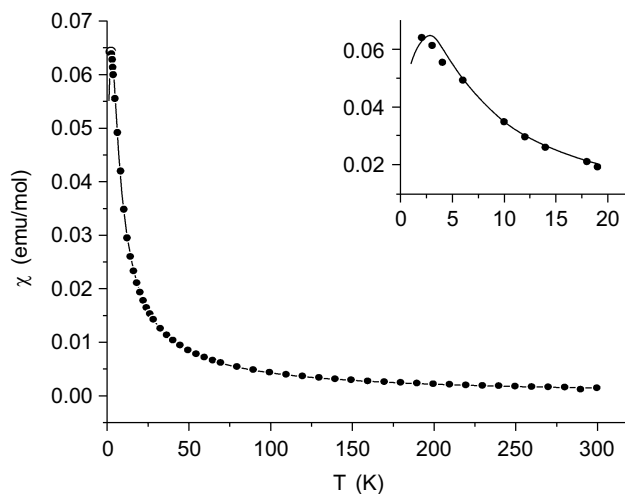


Рис. 4. Температурная зависимость магнитной восприимчивости соединения III [8].

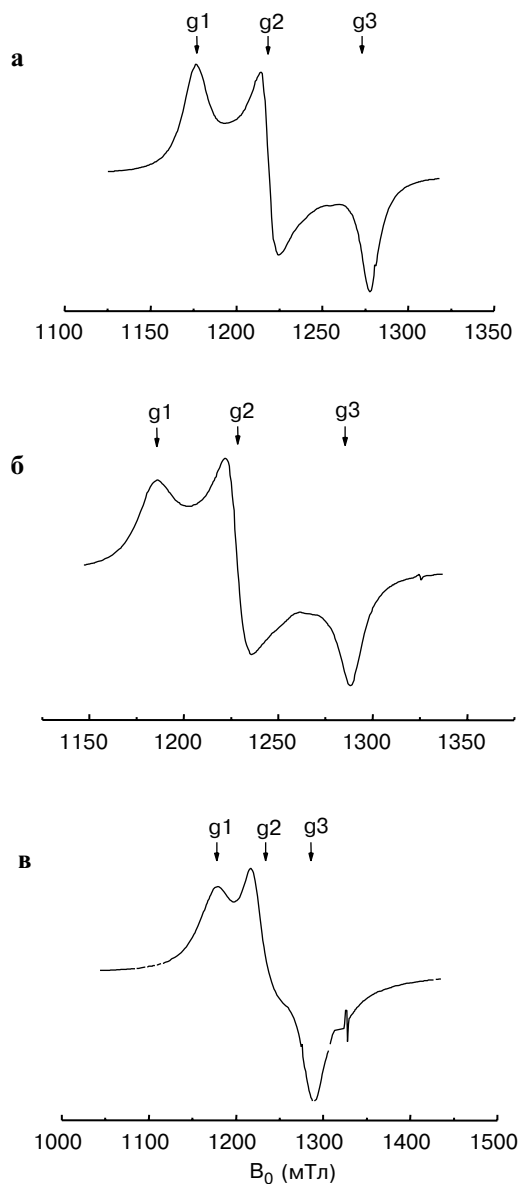


Рис. 5. Спектр ЭПР соединения III в Q-диапазоне при а $T = 298$ К, б 77 К, в 4.2 К [8].

проявляются эффекты, связанные с возникновением областей близкого порядка в цепочках [8].

Температурная зависимость ЭПР спектров в X- и Q-диапазонах (рис. 5) демонстрирует увеличение ширины линий с понижением температуры и изменение

величин g -факторов (определены не молекулярные g -факторы, а усредненные обменным взаимодействием величины, характеризующие цепочку в целом): при $T = 293$ К $g_1 = 2.239 \pm 0.002$, $g_2 = 2.159 \pm 0.002$, $g_3 = 2.060 \pm 0.002$; при $T = 4.2$ К $g_1 = 2.236 \pm 0.002$, $g_2 = 2.129 \pm 0.002$, $g_3 = 2.044 \pm 0.002$.

Уширение и сдвиг сигналов при понижении температуры до значений, сравнимых с величиной обменного взаимодействия, характерны для эффекта возникновения ближнего порядка в цепочках. Для данного кристалла обнаружены особенности проявления этого эффекта: сдвиги сигналов наблюдаются только для ориентаций, перпендикулярных направлению цепочки. Вероятно, это связано с низкой симметрией тензора анизотропного взаимодействия между ближайшими центрами в цепочке.

ЭПР исследования и анализ данных по температурной зависимости магнитной восприимчивости соединения III выполнены сотрудником лаборатории Л. В. Коробченко. Спектры ЭПР в Q-диапазоне измерены Е. П. Жегловым.

Литература

1. Абрагам А., Блани Б.: Парамагнитный резонанс переходных ионов. М.: Мир 1973.
2. Baker J.B. in: Foundations of Modern EPR (Eaton G.R., Eaton S.S., Salikhov K.M., eds.). Singapore: World Scientific 1998.
3. Анцышкин А.С., Порай-Кошиц М.А., Острикова В.Н.: Кристаллическая структура трихлорацетата эрбия $\text{Er}(\text{CCl}_3\text{COO})_3 \times 2\text{H}_2\text{O}$. ЖНХ 33, 1950–1956 (1988)
4. Imai T., Ouchi A.: The Structure of (m-trichloroacetato)-bis[aquabis(trichloroacetato)-erbium(III) hydrate. Bull. Chem. Soc. Jpn. 60, 408–410 (1987)
5. Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Легенджиевич Я., Очко Г.: ЭПР квазиодномерного кристалла $[\text{Nd}_2(\text{Cl}_3\text{CCOO})_6(\text{H}_2\text{O})_3]_n \cdot n\text{H}_2\text{O}$. ФТТ 43, 299–306 (2001)
6. Legendziewicz J., Keller B., Turowska-Tyrk I., Wojciechowski W.: Synthesis, optical and magnetic properties of homo- and heteronuclear systems and glasses containing them. New J. Chem. 23, 1097–1103 (1999)
7. Legendziewicz J., Voronkova V.K., Galeev R.T., Keller B., Oczko G.: Magnetic and spectroscopic properties of polymeric Nd(III) crystal. Abstracts of XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, p. 44. Kazan 2001.
8. Shova S., Novitskii G., Gdaniec M., Simonov Yu.A., Gatteschi D., Caneschi A., Voronkova V.K., Korobchenko L., Turta C.: Synthesis, structure and magnetic properties of a copper complex with the condensation product of 2-formylphenoxyacetic acid and hydroxyl amine (в печати)

Оптический эффект Керра и субпикосекундная молекулярная динамика жидкости

Д. М. Дунаев, В. С. Лобков

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Представлены результаты исследования молекулярной динамики ряда нитрильных органических соединений методом динамического эффекта Керра с применением оптического гетеродинамирования. Было обнаружено ярко выраженное влияние постоянной анизотропии поляризуемости на временной профиль кинетической кривой. Высокосимметричная молекула тертбутилнитрила обладает изотропной поляризуемостью, и в ее сигнале доминирует мгновенный отклик, который относится к электронной гиперполяризуемости, которая наблюдается только в момент перекрытия импульса накачки и пробного импульса. Кинетические кривые от менее симметричных молекул имеют более сложный временной профиль. Здесь также присутствует составляющая от электронной гиперполяризуемости, но появились дополнительные компоненты в форме сигнала. Теоретический анализ полученных экспериментальных данных позволил выявить четырехкомпонентную структуру молекулярного движения в жидкостях. На все четыре компоненты налагается колебательное движение ядер, возникающее благодаря сверхкороткому возбуждающему импульсу, Фурье-компоненты которого взаимодействуют с низкочастотными колебательными модами молекул. Математическая модель вполне удовлетворительно описывает временную функцию сигнала динамического эффекта Керра каждой исследованной жидкости.

Введение

Молекулярная структура и динамика жидкости является предметом интенсивного изучения на протяжении многих десятилетий. Исследования в данной области обусловлены в первую очередь той важной ролью, которую играют жидкости в химии и биологии. В то же время выявление общих принципов различных динамических событий, которые могут происходить в жидкостях, является фундаментальной физической задачей и является предметом пристального внимания как для теоретиков, так и для экспериментаторов. Достижение этой цели требует знания динамической структуры молекулярного движения в жидкости и того, как эти динамические процессы влияют на скорость реакций. Макроскопические свойства жидкостей, такие как вязкость и диэлектрическая проницаемость, позволяют вполне удовлетворительно объяснить динамику молекул на больших временах шкалы, однако, они не в состоянии описать неравновесные сверхбыстрые процессы, такие как динамика сольватации, протекающей в первые несколько сот фемтосекунд.

Были развиты различные методы для детального исследования динамики молекулярного движения жидкости. Наиболее широко используемые из них – это спонтанное релеевское и рамановское рассеяние [1–3]. Спектр квазиупругого релеевского рассеяния обычно выглядит в виде лоренцевой узкой линии, центрированной на нулевую частоту смещения и расположенной на более широкой полосе, которая простирается более чем на 100 см^{-1} . Узкий центральный пик позволяет получить информацию о коллективной реориентационной динамике жидкости, т.е. по его

ширине можно судить о “коллективном реориентационном времени”, требуемом для возвращения жидкости к изотропному состоянию после некоторого выстраивания молекул жидкости. Более широкая полоса, известная в литературе как релеевское крыло, отражает в основном наиболее быстрое движение отдельных молекул – возвращение отдельной молекулы к локальному равновесию с ее ближайшими соседями после возбуждения. Это время часто называют локальное время релаксации. Ориентационное движение также изучается методом рамановского рассеяния. Как было показано в работе [2], в форме линий рамановского спектра содержится информация как о внутримолекулярном движении, так и о молекулярной реориентации.

Главной проблемой спонтанного релеевского рассеяния является то, что релеевское крыло захоронено под линией возбуждающего лазера, которая более чем на два порядка величины интенсивней релеевского крыла. В случае рамановского рассеяния очень большие трудности с обработкой экспериментального материала, а проблемы, присущие обоим методикам – это то, что информация по сверхбыстрой динамике содержится в дальних крыльях спектра, где интенсивность очень низка и отношение сигнал/шум очень мало.

Ситуация сильно изменилась с появлением фемтосекундных лазеров. Стало возможным получать информацию об ориентационном и колебательном движении молекул в реальном времени. Движения атомов характеризуются масштабом времен, соответствующим периоду молекулярных колебаний, т.е. масштабом 10–1000 фс. Таким образом, пятидесяти-шестидесяти фемтосекундный лазер в подавляющем боль-

шинстве случаев будет отвечать требованиям задачи зондирования молекулярной динамики в реальном времени. Возможность этого обусловлена тем, что ширина частотной полосы излучения фемтосекундного лазера превышает расстояния между соседними колебательными уровнями.

Таким образом, принцип неопределенности работает в пользу эксперимента, поскольку конечность энергетической ширины сверхкороткого импульса создает условия для когерентной суперпозиции. Осциллирующий волновой пакет после действия импульса возбуждения совершает поступательно-возвратное движение в потенциальной яме основного электронного состояния (для случая нерезонансного возбуждения).

Зондирование вторым лазерным импульсом должно при соответствующих временных задержках обнаруживать признаки вращательного и колебательного движения молекулы. Фурье-преобразование интенсивности отклика дает с высоким разрешением информацию о колебательных и ориентационных движениях молекул. Тем самым восстанавливается вся информация, которая, как можно было думать, должна теряться из-за широкой частотной полосы коротких импульсов. Такова принципиальная идея эксперимента, которая одинакова для всех видов спектроскопических фемтосекундных исследований нестационарных процессов.

Если использовать поляризованные фемтосекундные импульсы, то можно осуществлять выстраивание молекул, которое в дальнейшем нарушается, поскольку вращательное движение молекул с различными угловыми моментами разрушает когерентность. Таким образом извлекается информация о фундаментальных постоянных исследуемой жидкости.

Фемтосекундный оптический эффект Керра (ОЭК) является одним из наиболее продуктивных методов исследования молекулярной динамики оптически прозрачных жидкостей [3–6] (здесь и далее предполагается, что длина волны возбуждающего лазерного импульса далека от ближайшего электронного перехода). Одним из преимуществ данного метода является то, что условия фазового синхронизма выполняются для всех направлений распространения и всех частотных комбинаций.

Нами было проведено исследование молекулярной динамики ряда нитрильных органических молекул, обладающих различной симметрией. В связи с этим можно было ожидать изменение относительно вклада меж- и внутримолекулярного взаимодействия в общую динамическую картину движения при изменении симметрии молекулы.

Методика эксперимента

Эксперимент проводился при температуре 298 ± 1 К. Нами был использован лазер на базе кристалла Ti:Sa

(Avesta Ltd.), накачиваемый всеми линиями аргонного лазера ЛГН-512, мощность которого составляла 7 Вт. Типичная выходная мощность и частота следования 65–70 фс импульсов составляла 500 мВт и 100 МГц соответственно. Импульсы были центрированы на 800 нм и спектрально ограничены на полувысоте шириной ~ 200 см⁻¹. Схема эксперимента время-разрешенного ОЭК приведена на рис 1.

В ОЭК анизотропия показателя преломления в образце создается импульсом накачки, а мониторинг осуществляется изменением задержки слабого поляризованного пробного импульса [3], интенсивность которого составляла 1/20 часть интенсивности импульса накачки. Изменение поляризации пробного импульса регистрировалось через скрещенную пару призм Глана (P2 и P3 на рис. 1), как функция времени задержки пробного импульса от импульса накачки. Шаг задержки составлял 6 фс. Ослабление пробного импульса при прохождении через скрещенную пару P2 и P3 составляло 10^{-6} , однако при установке между ними линзовой пары и кварцевой кюветы с образцом толщиной 2 мм, этот показатель ухудшался почти на порядок. При обычной (гомодинной) регистрации эффекта Керра сигнал имеет квадратичную зависимость от интенсивности импульса накачки и линейную зависимость от интенсивности пробного импульса. Более того, этот сигнал имеет квадратичную зависимость от импульсной функции отклика образца. Анализ такого сигнала довольно сложен [4], в связи с чем нами была применена техника оптического гетеродинамирования ОЭК. Она была впервые использована в работе [3] и впоследствии развита в работах [4, 5]. Для этого мы поместили четвертьволновую пластинку между скрещенными поляризаторами, как показано на рис. 1, и сориентировали ее таким образом по отношению к поляризации пробного пучка, чтобы поле локального осциллятора значительно, примерно в 15–20 раз, превышало гомодинный сигнал (сигнал, прошедший через скрещенную пару поляризаторов без четвертьволновой пластинки). Это происходит благодаря тому, что при отстройке оси $\lambda/4$ пластины от направления плоскости поляризации пробного луча у него возникает эллиптичность, т.е. появляется постоянная составляющая, проходящая через анализатор. В нашем случае угол между осями пробного пучка и $\lambda/4$ пластины составлял менее 1°.

В соответствии с работами [5, 6], при использовании поля локального осциллятора E_{lo} интенсивность сигнала с детектора пропорциональна

$$I_{lo} + I_s + I_b + \frac{nc}{8\pi} (E_s^* E_{lo} + E_{lo}^* E_s), \quad (1)$$

где E_s – поле сигнала, I_{lo} – интенсивность локального осциллятора, I_s – интенсивность гомодинного сигнала.

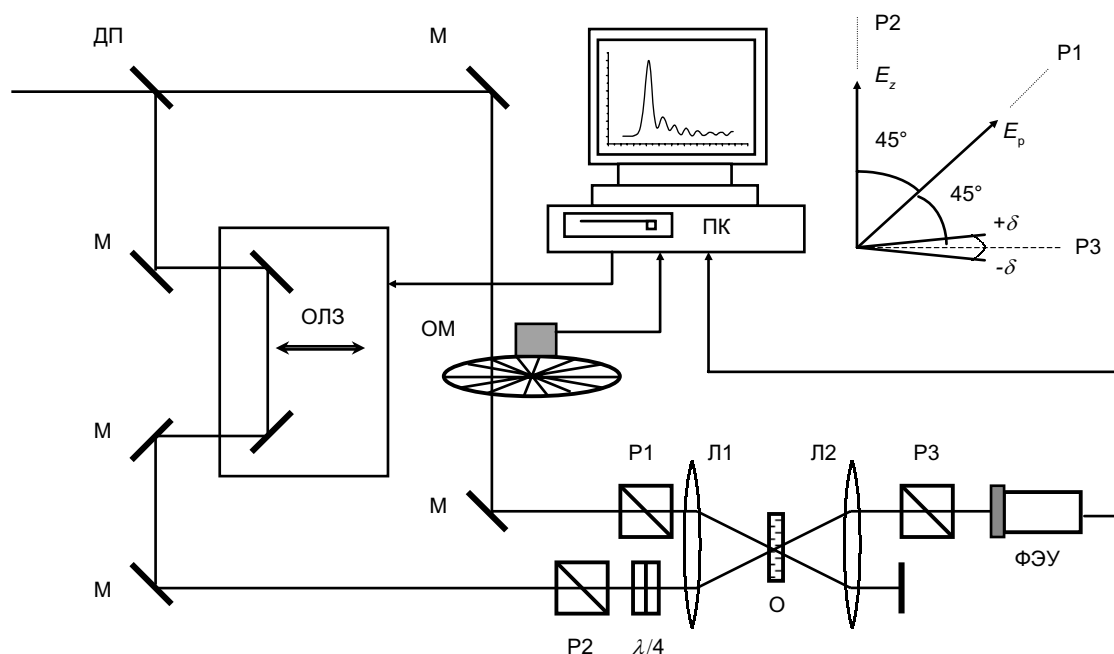


Рис. 1. Схема измерения сигнала оптического гетеродина в эксперименте с динамическим эффектом Керра. На вкладке показаны относительные направления поляризации поля возбуждения E_p и поля пробного луча E_z . Методика оптического гетеродина включает в себя вращение P2 или $\lambda/4$ -пластинки на угол $\pm\delta$. На схеме обозначены: ДП – делительная пластинка (1:20), М – зеркало, ОЛЗ – оптическая линия задержки, ОМ – оптический модулятор, P1, P2, P3 – поляризаторы (призмы Глана), Л1 и Л2 – линзы, ПК – персональный компьютер (АЦП, синхронный детектор, управление линией задержки), О – образец, ФЭУ – фотоэлектрический умножитель, $\lambda/4$ – четвертьволновая пластинка.

ла эффекта Керра, I_b – интенсивность фонового излучения, а последнее выражение в сумме представляет собой гетеродинный член. Локальный осциллятор был настроен таким образом, чтобы гетеродинный член стал значительно больше, чем I_s , а I_o и I_s отсекались синхронным детектированием сигнала, который был промодулирован с частотой ~ 300 Гц.

Органические соединения, которые исследовались в данной работе были получены от фирмы Aldrich и использовались без дальнейшей очистки. Все образцы, перед тем как производить измерения, были отфильтрованы 0.2 мкм фильтрами, чтобы удалить посторонние микрочастицы.

Полученные результаты

На рис. 2 представлена серия из трех нитрильных молекул: ацетонитрил CH_3CN , бензонитрил $\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$ и третбутилнитрил $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$. Молекулы подобраны таким образом, чтобы оценить влияние их формы на структуру сигнала оптического эффекта Керра. Процедура анализа экспериментальных данных очень близка к той, что изложена в работе [4]. На рис. 3а показана кинетика сигнала ОЭК для третбутилнитрила. Пунктиром обозначена автокорреляционная функция между импульсом накачки и пробным импульсом.

На рис. 3б Фурье-преобразование временной функции сигнала и автокорреляционной функции. Нормализация реальной и мнимой части Фурье-преобразования сигнала к автокорреляционной функции позволяет получить прямую информацию о ядерной динамике жидкости. Как можно увидеть в работе [7], временная зависимость отклика является конволюцией нелинейной оптической функции отклика среды с автокорреляционной функцией. В приближении Борна-Оппенгеймера эта функция отклика может быть разделена на электронную и ядерную компоненты [7].

Для нерезонансных экспериментов по ОЭК электронная составляющая в сигнале пропорциональна δ -функции, которая при времяразрешенных экспериментах соответствует свертке δ -функции с автокорре-

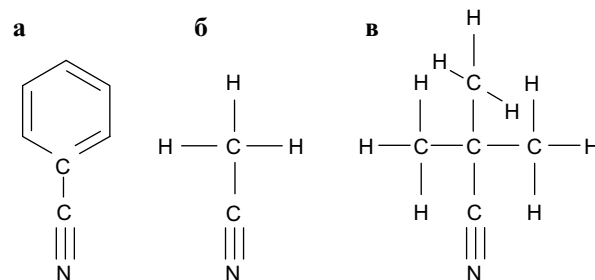


Рис. 2. Химические формулы и структура ряда исследуемых образцов: а бензонитрил $\text{C}_6\text{H}_5\text{CN}$, б ацетонитрил CH_3CN , в третбутилнитрил $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$.

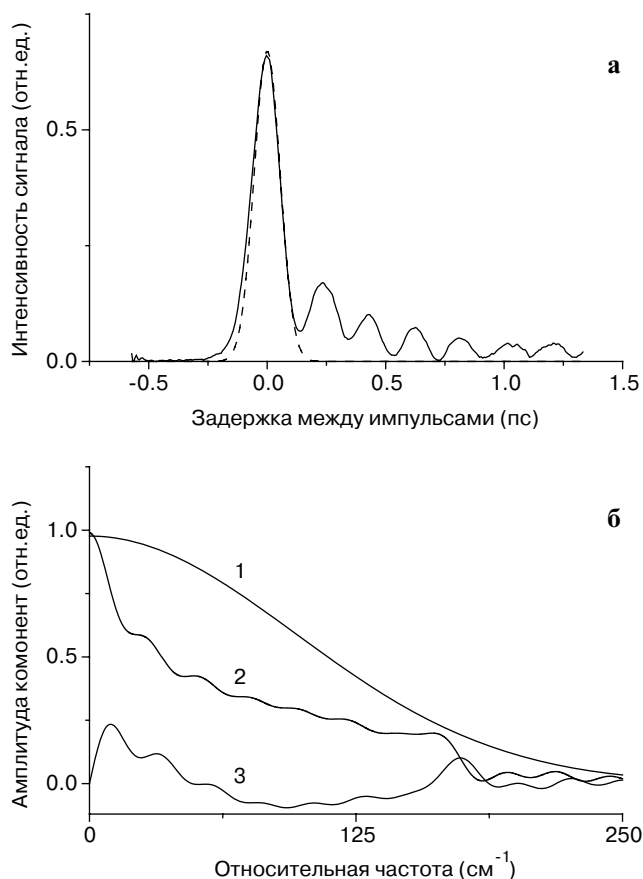


Рис. 3. Анализ кинетики сигнала ОЭК в третбутилнитриле. **а** Кинетика сигнала в зависимости от задержки между импульсами (сплошная линия – сигнал в образце, пунктирная линия – автокорреляционная функция). **б** Фурье-образ временных функций сигналов (1 – автокорреляционная функция, 2 – реальная часть сигнала, 3 – мнимая часть сигнала).

ляционной функцией. Это приводит к симметричной функции относительно нулевой задержки, которая в Фурье-преобразовании отражена реальной частью. С другой стороны, нормализованная мнимая часть спектра отображает вклад от движения в ядерных координатах. Таким образом, процедура Фурье-преобразование-деконволюция позволяет отделить ядерную компоненту от той компоненты, что называется мгновенной электронной поляризуемостью [7]. Экспериментальные данные, полученные для всех исследуемых жидкостей, обработаны данным методом, однако в основном наше внимание сосредоточено на динамике ядер.

Как уже упоминалось ранее, в среде, макроскопически изотропной, имеются две составляющие в функции нелинейного отклика. Это мгновенный, отслеживающий фронты лазерного импульса отклик и наблюдаемый только тогда, когда перекрываются импульс накачки и пробный импульс. Его относят к чисто электронной гиперполяризуемости. Вторая составляющая содержит вклады от меж- и внутримолекулярного движения ядер.

На рис. 4 представлены кинетические кривые, полученные с применением ОЭК для трех видов органических жидкостей. Эта серия кривых демонстрирует ярко выраженную зависимость от формы молекулы временного профиля сигнала. В сигнале от высокосимметричной молекулы (рис. 2в и кривая 3 на рис. 4), которая в связи с этим обладает изотропной линейной поляризуемостью, преобладает мгновенный отклик, относящийся к чисто электронной гиперполяризуемости. Вместе с тем, эта кривая имеет небольшую экспоненциальную асимметрию в области положительных задержек и ярко выраженные осцилляции на протяжении нескольких пикосекунд. Эти осцилляции – результат когерентного возбуждения рамановской моды 183 см⁻¹ (см. рис. 3б, Фурье-преобразование сигнала, мнимая часть), соответствующей связи C-CN. Здесь следует подчеркнуть полное соответствие результатов времяразрешенных экспериментов и данных, полученных методом деполяризованного рамановского рассеяния.

Кинетические кривые от менее симметричных молекул (рис. 2а и б) имеют более сложный временной профиль (кривые 1 и 2 на рис. 4). Здесь также присутствует составляющая от электронной гиперполяризуемости, но появились дополнительные компоненты в форме сигнала. Теоретический анализ полученных экспериментальных данных позволил выявить четырехкомпонентную структуру молекулярного движения в жидкостях: 1) молекулярный отклик ($\tau_{1/c} \sim 1.5$ пс), который идентифицирован как диффузионная реориентация молекул [4], т.е. возвращение молекул в исходное состояние после частичного выстраивания относительно плоскости поляризации возбуждающего импульса; 2) более коротковременная составляющая (300–400 фс), связанная с переносом анизотропии и индуцированной межмолекулярным взаимодействием деформацией молекулярной поляризуемости; 3) быстро затухающая компонента ($\tau_{1/c} < 200$ фс) когерентно возбужденного либрационного движения; 4)

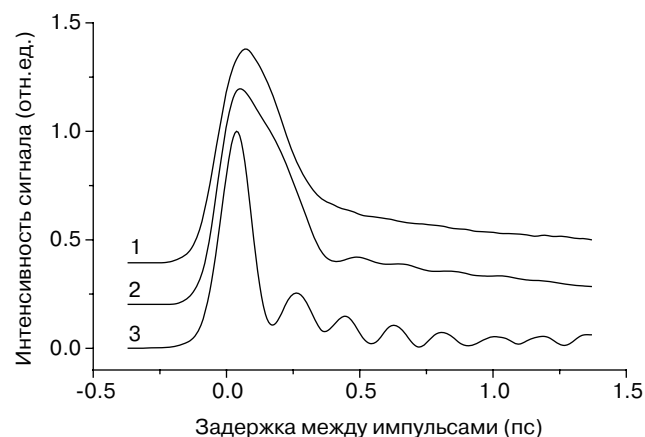


Рис. 4. Кинетические кривые исследуемых жидкостей, полученные методом оптического гетеродинамирования динамического эффекта Керра (1 – ацетонитрил, 2 – бензонитрил, 3 – третбутилнитрил).

мгновенный отклик, отслеживающий фронты автокорреляционной функции и существующий только при нулевой задержке пробного импульса, обязанный электронной гиперполяризуемостью.

На все четыре компоненты налагается колебательное движение ядер, возникающее благодаря сверхкороткому возбуждающему импульсу, Фурье-компоненты которого взаимодействуют с низкочастотными колебательными модами молекул. Математическая модель вполне удовлетворительно описывает временную функцию сигнала динамического эффекта Керра каждой исследованной жидкости.

Работа проводилась в лаборатории фотохимии при непосредственном участии член-корр. РАН Салихова К.М., Моисеева С.А. и Никифорова В.Г.

Литература

1. Kievelson D., Madden P.A.: Light scattering studies of molecular liquids. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **31**, 523–558 (1980)
2. Hellwarth R.W.: Third-order optical susceptibilities of liquids and solids. *Prog. Quantum Electronics* **5**, 1–68 (1977)
3. Ippen E.P., Shank C.V.: Picosecond response of high-repetition-rate CS₂ optical Kerr gate. *Appl. Phys. Lett.* **26**, 92–93 (1975)
4. McMorow D., Lotshaw W.T., Kenney-Wallace G.A.: Femtosecond optical Kerr studies on the origin of nonlinear responses in simple liquids. *IEEE J. Quantum Electronics* **24**, 443–453 (1988)
5. Eesley G.L., Leveuson M.D., Tolles W.M.: Optically heterodyned coherent Raman spectroscopy. *IEEE J. Quantum Electronics* **14**, 45–49 (1978)
6. Eesley G.L.: Polarization selective optical heterodyne detection for dramatically improved sensitivity in laser spectroscopy. *Appl. Phys.* **19**, 1–17 (1979)
7. McMorow D., Lotshaw W.T.: Separation of nuclear and electronic contributions to femtosecond four-wave mixing data. *Opt. Commun.* **86**, 236–244 (1991)

О возможности восстановления фотона, поглощенного средой

С. А. Моисеев

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Предлагается идея, как восстановить квантовое состояние фотона, поглощенного макроскопической системой атомов в газе с неоднородно уширенными резонансными оптическими переходами. Приводится квантовая теория эффекта и аналитическое решение для восстановленной волновой функции фотона. Анализируются физическая природа эффекта и свойства восстановленных состояний. Обсуждаются преимущества предлагаемого нового типа светового эха и перспективы его использования для решения проблемы квантовой памяти.

Рост интереса к квантовой информатике стимулирует постановку и решение новых задач квантовой динамики, нестационарного взаимодействия атомов, молекул и света (см. обзор [1]), благодаря чему значительно возросло внимание к слабым световым полям, квантовые состояния которых оказываются наиболее удобными для управления. Уже в настоящее время такие поля могут использоваться как в качестве носителей квантовой информации, так и для решения фундаментальных задач квантовой информатики. Освоение квантовых состояний света требует разработки новых методов оперирования состояниями одиночных фотонов при их генерации, записи, воспроизведении и т.д. Решению этих задач в настоящее время посвящаются значительные усилия [2–5]. Прежде всего необходимо научиться записывать квантовые состояния света в веществе и восстанавливать их с высокой точностью в нужный момент времени, не вызывая нежелательных помех (проблема “квантовой памяти”). Отметим особые успехи и надежды в использовании электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) для решения проблемы квантовой памяти [6, 7]. Для её решения нами предлагается идея [8], основанная на использовании нового типа фотонного эха. В качестве тестовой задачи ниже рассматривается сохранение и восстановление однофотонного волнового пакета, приводятся основные положения квантовой теории и аналитическое решение для состояния восстановленного поля. Обсуждается возможность восстановления состояния фотона с вероятностью близкой к единице, перспективы развития предлагаемой схемы фотонного эха, а также её специфические преимущества по сравнению с техникой, основанной на использовании ЭИП эффекта.

Предлагаемая техника светового эха в газах основана на использовании эффекта Доплера, при котором частотный сдвиг атомов оказывается противоположным для противоположных направлений распространения поглощаемого и переизлучаемого света. В качестве когерентной макроскопической среды рас-

сматривается система N трехуровневых атомов, расположенных внутри трубки с внешними координатами $z = 0$ и $z = L$. Полагаем, что все атомы первоначально находятся в основном состоянии $|1\rangle$. Из состояния $|1\rangle$ существует дипольно разрешенный переход в состояние $|3\rangle$, и также существует метастабильное состояние $|2\rangle$, на которое разрешен переход с уровня $|3\rangle$, при этом уровень $|2\rangle$ расположен близко к уровню $|1\rangle$. Пренебрегаем столкновениями между атомами. Таким образом, исходное состояние атомов газа примем в виде:

$$|A(t)\rangle = \prod_{j=1}^N |\phi(t)\rangle_j,$$

где $|\phi(t)\rangle_j = \delta^{1/2}(r_j - r_j^0(t))|1\rangle_j$ описывает внутреннее состояние отдельного атома и его перемещение в пространстве с постоянной скоростью, $\mathbf{r}_j^0(t) = \mathbf{r}_j^0(0) + \mathbf{v}^j t$.

Пусть на данную систему атомов падает однофотонный волновой пакет, распространяющийся вдоль z от $z = -\infty$, несущая частота фотона предполагается резонансной с центральной частотой перехода $|1\rangle$ - $|3\rangle$, а состояние фотона задается в виде:

$$|\psi_f(t \rightarrow -\infty)\rangle = \int dk f_k(-\infty) a_k^\dagger |0\rangle.$$

Примем также, что общая спектральная ширина $\delta\omega_{\text{ph}}$ волновой функции однофотонного состояния $f_k(-\infty) = f^m((\omega_k - \omega_{31})/c)$ оказывается уже спектральной ширины $\Delta_{31} \equiv \Delta_n$ перехода $|1\rangle$ - $|3\rangle$, определяемой тепловым движением атомов и эффектом Доплера, т.е. $\delta\omega_{\text{ph}} < \Delta_n$. Общее состояние поля и системы атомов до взаимодействия имеет вид:

$$|\psi(-\infty)\rangle = |A(t)\rangle |\Psi_f(-\infty)\rangle.$$

Квантовая динамика описывается в 1-мерном подходе с гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_f + V,$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_a &= E_3 \sum_{j=1}^N P_{33}^j + \hbar \Delta \sum_{j=1}^N P_{22}^j, \\ \mathcal{H}_f &= \int dk \hbar \omega_k a_k^+ a_k, \\ V &= \hbar g \int dk \sum_{j=1}^N [a_k P_{31}^j \exp(ikz_j(t)) + \text{h.c.}].\end{aligned}\quad (1)$$

В (1) приняты стандартные обозначения (см. также [9]). Полагаем, что фотон попадает в трубку с газом в момент времени $t = 0$, при этом общее решение для волновой функции поля+среды описывается выражением:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= |\psi_m(t)\rangle + |\psi_f(t)\rangle, \\ |\psi_f(t)\rangle &= \int dk f_k(t) a_k^+ |0\rangle |A(t)\rangle, \\ |\psi_m(t)\rangle &= \sum_{j=1}^N b_j(t) P_{31}^j |0\rangle |A(t)\rangle.\end{aligned}\quad (2)$$

Для реализации полного переноса информации из поля в систему атомов необходимо использовать оптически толстые среды ($\alpha L \gg 1$). В этом случае сразу после попадания фотона в среду общее состояние поля+среды в представлении взаимодействия сводится к состоянию возбужденной среды:

$$|\psi^i(t)\rangle \Big|_{\substack{t \gg \delta t_{\text{ph}} \\ \alpha L \gg 1}} = \sum_{j=1}^N \beta_0(\omega_{31}^j, z_j^0) \exp(i\omega_{31}^j z_j^0/c) P_{31}^j |0\rangle |A(t)\rangle, \quad (3)$$

где $\beta_0(\omega_{31}^j, z_j^0) = -i2\pi g \exp(-\alpha z_j^0) f^{\text{in}}((\omega_{31}^{j+} - \omega_{31})/c)$, $\omega_{mn}^{j+} \equiv \omega_{mn}^j(1 + v_z^j/c)$, $\alpha = 2\pi g^2 n_0/(c\Delta_n)$, n_0 – плотность атомов. Состояние (3) отражает факт полного и чистого проецирования состояния фотона на возбужденное состояние системы атомов.

Сохранение состояния (3) на долгое время возможно реализовать путем воздействия спустя время $t_1 = \tau \ll T_2^{(3)}$ ($T_2^{(3)}$ – время фазовой памяти состояния $|3\rangle$) коротким ($\delta t_1 \delta \omega_{\text{ph}} \ll 1$) лазерным π -импульсом ($\theta_1 = dE_{01} \hbar^{-1} \delta t_1 = \pi$) с электрическим полем вида $E_1(t, z) = E_{01}(t - \tau - z/c) \cos(\omega_{32}(t - \tau - z/c) + \phi_1)$, вызывающим переход атомов с уровня $|3\rangle$ на $|2\rangle$. В этом случае след, сформировавшийся в газе после попадания фотона, перенесется на возбужденные долгоживущие состояния атомов $|2\rangle$:

$$\begin{aligned}|\psi_m^i(\tau + \delta t_1)\rangle &= U_1(\theta_1 = \pi, \phi_1) |\psi_m^i(\tau)\rangle \\ &= i \sum_{j=1}^N \beta_0(\omega_{31}^j, z_j^0) \exp(-i(\omega_{32}^j \tau + \xi_j^i)) P_{21}^j |0\rangle |A(\tau + \delta t_1)\rangle.\end{aligned}\quad (4)$$

Здесь $\xi_j^i = \phi_1 - \Delta z_j^0/c$. Отметим очень важное свойство состояния (4), которое оказывается слабо зависящим от пространственных координат движущихся атомов, что обеспечивает возможность реализации долговременной квантовой памяти. Это важное свойство отсутствует в ЭИП эффекте.

Считывание записанного состояния является наиболее сложной проблемой квантовой памяти. В нашем случае эта проблема решается достаточно просто, путем воздействия вторым лазерным π -импульсом в момент времени $t_2 = T + \tau$ ($T < T_2^{(2)}$), распространяющимся в противоположном к фотону направлении ($k_2 = -k_1$, $\mathbf{k}_2 = -(\omega_{32}/c)\mathbf{e}_z$) с полем $E_2(t, z) = E_{02}(t - T - \tau + z/c) \cos(\omega_{32}(t - T - \tau + z/c) + \phi_2)$, переводящим возбужденные атомы со 2-го вновь на 3-й уровень. В результате воздействия состояние атомов сразу после лазерного импульса принимает вид:

$$\begin{aligned}|\psi_m^i(T + \tau + \delta t_2)\rangle &= \sum_{j=1}^N \beta_0(\omega_{31}^j, z_j^0) \exp(i\chi_j) \\ &\times P_{31}^j |0\rangle |A(T + \tau + \delta t_2)\rangle,\end{aligned}\quad (5)$$

где $\chi_j = \omega_{32}^{j-}(T + \tau - z_j^0/c) - \omega_{32}^{j+}\tau + \Delta z_j^0/c + \phi_2 - \phi_1$. Состояние (5) отличается от состояния атомов, возникающего сразу после поглощения фотона, лишь фазовым множителем $\exp(i\chi_j)$. Отметим, что фаза χ_j уже характеризует волну поляризации, распространяющуюся в обратном направлении к распространению фотона, попавшего в среду. Решая уравнение Шредингера для поля+системы атомов при начальных условиях (5), находим, что спустя время τ после второго лазерного импульса система атомов излучает сигнал эха. Сигнал эха распространяется в обратном направлении к попавшему в среду фотону. При этом решение для волновой функции для $t \gg T + 2\tau$ принимает вид:

$$\lim_{t \gg T + 2\tau} |\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk f^{\text{out}}((\omega_k - \omega_{31})/c) a_k^+ |0\rangle |A(t)\rangle, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned}f^{\text{out}}((\omega_k - \omega_{31})/c) &= \exp(i\Phi) f^{\text{in}}(-(\omega_k - \omega_{31})/c), \\ \Phi &= (\omega - \omega_{31})(T + 2\tau) + (\omega_{31} - \Delta)T + \phi_{12} + \pi/2.\end{aligned}\quad (7)$$

Решение (6), показывает, что в результате взаимодействия атомов среды с вакуумом происходит излучение фотона, волновая функция которого однозначно связана с исходным состоянием падающего фотона (7). Спектральная инверсия состояния восстановленного света отражает тот факт, что световой импульс является обращенным во времени по отношению к падающему однофотонному волновому пакету.

Таким образом, сигнал эха по интенсивности полностью воспроизводит записываемое световое поле. Данный эффект оказывается возможным благодаря тому, что в процессе генерации светового эха реализуется полное обращение во времени исходного процесса поглощения фотона. Отметим, что данное обращение возможно лишь в отсутствии релаксационных процессов и достаточной близости первых двух атомных уровней, т.е. при $\exp(2i\Delta/\alpha c) \cong 1$ и, соответственно, $\Delta < \alpha c/2$.

Рассмотренная трехимпульсная схема возбуждения среды позволяет реализовать полное обращение процесса поглощения первого светового импульса независимо от числа фотонов в нем. Поэтому очевидно, что данный тип светового эха может использоваться для записи и восстановления состояний достаточно интенсивных импульсных световых полей. Лишь при достижении импульсной площади полей до величины порядка π и больше будут возникать проблемы с записью и, соответственно, с воспроизведением состояния данных полей из-за проявления эффекта самоиндуцированной прозрачности.

В заключение отметим, что рассмотренная схема записи и восстановления квантовых состояний световых полей обладает еще одним важным преимуществом по сравнению со схемами, основанными на использовании ЭИП эффекта. В данном случае записываемые и воспроизводимые световые поля распространяются в среде при отсутствии других необходимых для реализации процесса интенсивных световых полей. Благодаря этому, можно значительно подавить оптические шумы и, таким образом, действительно реализовать оптическую ячейку для записи и восстановления квантовых состояний света, способную работать на уровне потока отдельных фотонов. Этому также может способствовать использование различных направлений распространения для записываемых квантовых полей и дополнительных сопутствующих лазерных импульсов. Данные схемы возбуждения можно реализовать, выбирая такие направления у лазерных импульсов, для которых будет сохраняться обращенный характер излучения фотонов в эхо-сигналах с достаточной точностью соблюдения условия пространственного синхронизма. Этого, например, можно добиться, используя 3х- и 4х-уровневые среды и варьируя начальные состояния атомов по этим уровням.

Интересно, что если квантовая информация будет записываться в спектральных компонентах однофотонных состояний, то предложенная новая схема светового эха сразу реализует квантовую операцию NOT над состоянием фотона (см. (7)). В этой связи пред-

ставляют интерес исследования возможностей реализации других более сложных квантовых алгоритмов, что, потребует рассмотрения взаимодействий двухфотонных и трехфотонных полей в когерентной резонансной среде, как это, например, рассматривалось в недавней работе [10].

Работа поддерживалась грантами Шведской Королевской Академии Наук и РФФИ № 01-01-00387. Автор признателен проф. В. С. Летохову за полезные обсуждения и проф. С. Кроллю за сотрудничество.

Литература

1. Килин С.Я.: Квантовая информация. УФН **169**, 507 (1999)
2. Duan L.-M., Cirac J.I., Zoller P.: Storage and processing of quantum light. Conf. Digest. IQEC (Nice, France, 10-15 Sept.), 212 (2000)
3. Kozhekin A.E., Molmer K., Polzik E.: Quantum memory for light. Phys. Rev. A **62**, 033809 (2000)
4. Phillips D.F., et al.: Storage of light in atomic vapor. Phys. Rev. Lett. **86**, 783 (2001); Fleischhauer M., Yelin S.F., Lukin M.D.: How to trap photon? Storing single-photon quantum states in collective atomic excitations. Opt. Commun. **179**, 395 (2000)
5. Vernac L., Pinard M., Giacobino E.: Quantum state transfer from light beams to atomic ensembles. Eur. Phys. J. D **17**, 125 (2001)
6. Lukin M.D., Imamoglu A.: Controlling photons using electromagnetically induced transparency. Nature **413**, 273 (2001)
7. Duan L.-M., Lukin M.D., Cirac J.I., Zoller P.: Long-distance quantum communication with atomic ensembles and linear optics. Nature **414**, 413 (2001)
8. Moiseev S.A., Kroll S.: Complete reconstruction of the quantum state of a single-photon wave packet absorbed by a doppler-broadened transition. Phys. Rev. Lett. **87**, 173601 (2001)
9. Moiseev S.A.: Time-delayed quantum interference and single-photon echo in coherent three-level systems. Quantum Electronics **31**, 557 (2001); Моисеев С.А., фон Борщисковский Х.: Интерференция и излучение пары фотонов в когерентных и трехуровневых средах. Изв. РАН. Сер. физич. **65**, 1050 (2001); Moiseev S.A.: Peculiarities of the detection of a single photon echo and time-delayed interference of a photon in a three-level medium. Optics and Spectroscopy **82**, 943 (1997); Moiseev S.A.: Theory of single photon (SP-) echo and the possibility of its experimental study in the gamma region. Hyperfine Interaction **107**, 345 (1997); Moiseev S.A.: Time-delayed interference of a photon and the one-photon echo in media with phase memory. Optics and Spectroscopy **83**, 280 (1997)
10. Franson J.D., Pittman T.B.: Quantum logic operations based on photon-exchange interaction. Phys. Rev. A **60**, 917 (1999)

Радиационно-стимулированное растворение диоксида кремния

А. А. Бухараев

Отдел химической физики, лаборатория физики и химии поверхности

Представлены результаты сравнения данных об имплантированном слое диоксида кремния, полученных при компьютерном моделировании ионной бомбардировки с помощью модифицированной программы DYNA, с экспериментальными характеристиками имплантированного слоя, полученными при изучении радиационно-стимулированного растворения диоксида кремния с помощью атомно-силового микроскопа.

Эффект увеличения скорости растворения веществ, подвергнутых ионному облучению (бомбардировке) известен достаточно давно [1, 2]. Однако природа радиационно-стимулированного растворения (РСР) до сих пор еще не выяснена. Обычно это явление связывают с формированием вдоль траектории проникновения иона в мишень большого числа дефектов и целых областей (кластеров) с нарушенной структурой, содержащих высокую концентрацию радиационных дефектов различного типа, образовавшихся за счет столкновения иона с атомами мишени. В соответствии с одной из ранних моделей [2] считалось, что за счет возникающих при облучении нарушений в структуре ближнего порядка (вакансий и атомов в междоузлиях) происходит деформация соответствующих связей между атомами, которая в свою очередь приводит к увеличению скорости растворения радиационно-поврежденного SiO_2 .

В последнее время интерес к этой проблеме заметно возрос. Это вызвано все более широким использованием РСР для практических целей, в частности, для формирования микро- и наноструктур на поверхности твердых тел в микроэлектронике и микромеханике, создания так называемых ядерных фильтров, т.е. пленок с калиброванными нанометровыми отверстиями, полученными после растворения треков от отдельных тяжелых ионов с энергией в сотни МэВ, которыми бомбардировали такие пленки. Актуальной задачей является создание химически радиационно-стойких материалов, используемых для длительного хранения ядерных радиоактивных отходов.

С появлением атомно-силовой микроскопии (АСМ), появились новые экспериментальные возможности для исследования РСР. С участием сотрудников Н. И. Нургазизова и А. А. Можановой было разработано несколько методик для наблюдения *in-situ* в реальном масштабе времени процессов растворения диоксида кремния [3–6]. Эти методики позволили визуализировать треки от отдельных ионов, проникнувших в мишень (рис. 1), определять абсолютные и относительные скорости травления, построить кривые, отражающие распределе-

ние скорости травления по глубине имплантированного слоя.

Глубина поверхностного слоя мишени, свойства которого изменяются при имплантации, распределение в этом слое атомов примеси и дефектов, образующихся во время облучения, количество вещества, распыленного при ионной бомбардировке – это основные параметры, с помощью которых можно охарактеризовать процесс ионной имплантации. Эти параметры можно рассчитать путем компьютерного моделирования процесса ионной имплантации, или, другими словами, проведением компьютерного эксперимента, получившего в последнее время достаточно широкое распространение в радиационной физике.

В связи с вышеизложенным, представляло интерес сравнить данные об имплантированном слое, полученные при компьютерном моделировании ионной бомбардировки, с результатами, полученными при изучении РСР диоксида кремния. Эти исследования были выполнены в 2001 году.

Аспирантом А. В. Сугоняко под руководством В. А. Жихарева (лаборатория радиационной физи-

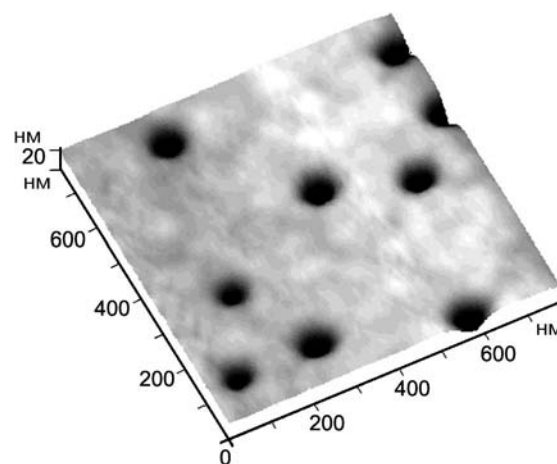


Рис. 1. Пример использования РСР – визуализация с помощью АСМ радиационно-поврежденных областей, образовавшихся после бомбардировки поверхности SiO_2 отдельными ионами криптона с энергией 245 МэВ (суммарная доза 10^9 ион/см²).

ки) было проведено компьютерное моделирование имплантации различных ионов в SiO_2 . Использованный ими алгоритм программы отражает процесс внедрения ускоренной частицы в мишень и развитие каскада атомных столкновений. При моделировании атомных столкновений в данной математической модели использовалось приближение парных столкновений в аморфном теле, которое лежит в основе широко известных программ SRIM [7] и DYNA [8]. Как и в упомянутых программах, в предложенной модели облучаемая мишень условно делилась по глубине на небольшие (порядка нанометра) слои. При определённом значении дозы облучения концентрации компонент мишени в каждом слое считались постоянными по всему объёму слоя. Нужная доза облучения разбивалась на некоторое количество шагов, после каждого из которых, как и в программе DYNA, происходил перерасчёт концентраций компонент мишени.

В отличие от существующих моделей расчётов, в которых рассматривается лишь этап развития каскадов столкновений, была принята во внимание и часть последующего этапа релаксации, связанная с рекомбинацией образовавшихся дефектов (вакансий и междоузельных атомов). Рекомбинация описывалась простейшими кинетическими уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_{\text{vac}}}{\partial \tau} = -\alpha_R N_{\text{vac}} N_{\text{Int}} \\ \frac{\partial N_{\text{Int}}}{\partial \tau} = -\alpha_R N_{\text{Int}} N_{\text{vac}} \end{cases}$$

где N_{vac} – число вакансий в слое, N_{Int} – число междоузельных атомов, α_R – эффективный безразмерный коэффициент рекомбинации. Расчет рекомбинации происходил после каждого шага по дозе.

Изменение структуры облучаемой мишени в данной программе моделировалось, исходя из следующих предположений: 1) на месте выбитого в процессе столкновений атома образуется пустое пространство – вакансия; 2) выбитый атом, потеряв необходимую для движения энергию, останавливается в междоузельной позиции, становясь междоузельным атомом. Появление междоузельных атомов и вакансий в слое в дальнейшем учитывалось путём изменения соответствующих параметров рассеяния и длин пролётов движущихся атомов.

Используя данную модель, мы получили информацию о пространственном распределении радиационных дефектов и имплантированных ионов внутри облучённого образца. Такие расчёты были проведены для различных ионов, имплантированных в диоксид кремния, с разными значениями энергии и дозы облучения. При сравнении экспериментальных и расчётных данных в качестве подгоночного параметра использовался эффективный коэффициент рекомбина-

ции (α_R), оптимальная величина которого отличалась для разных ионов.

В качестве примера на рис. 2 приведены рассчитанные на компьютере кривые распределения по глубине ионов аргона, имплантированных в SiO_2 , и образовавшихся радиационных дефектов (вакансий). Одновременно на этом же рисунке приведено распределение по глубине скорости травления, экспериментально полученное с помощью АСМ при травлении в водном растворе HF имплантированного аргоном образца диоксида кремния.

Из сравнения экспериментальных и теоретических кривых видно, что распределение скорости травления по глубине достаточно хорошо совпадает с модельными расчётами распределения вакансий, что согласуется с высказанным предположением о наличии связи между скоростью травления и количеством индуцированных радиационных дефектов в повреждённом слое образца. На основе приведенных на рис. 2 данных можно утверждать, что использование предложенной нами методики изучения РСП с помощью

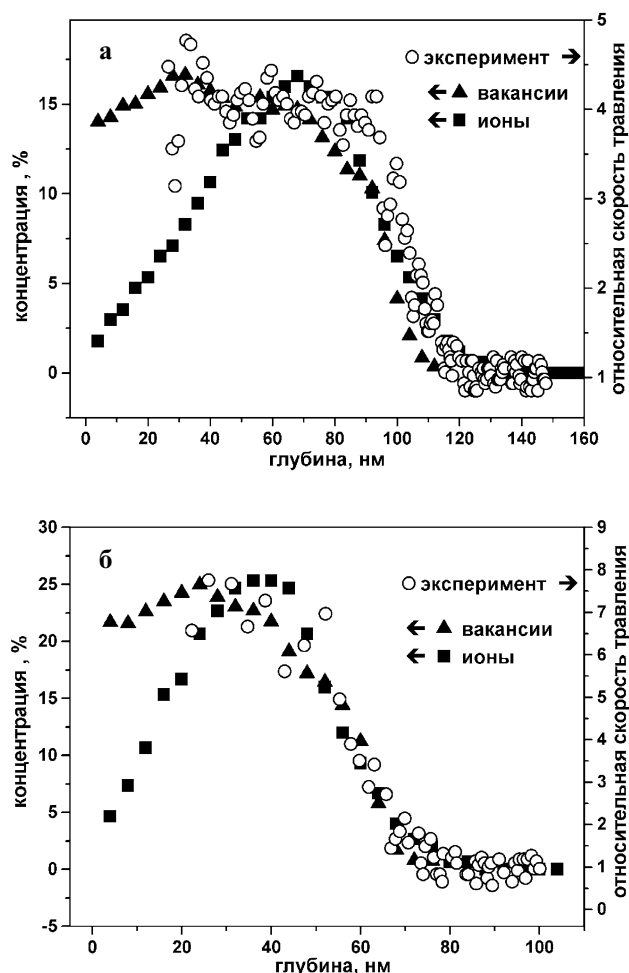


Рис. 2. Сравнение рассчитанных распределений концентраций вакансий и внедрённых ионов с распределением относительной скорости растворения, экспериментально определённой с помощью АСМ. Образец SiO_2 , имплантированный ионами Ag^+ , доза 10^{15} ион/см²; а энергия ионов 40 кэВ; б энергия ионов 25 кэВ.

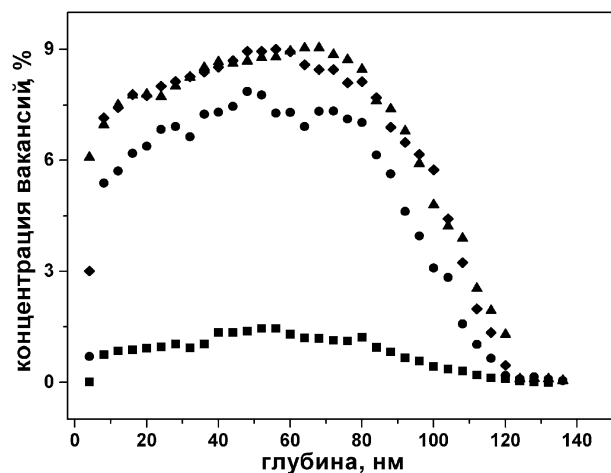


Рис. 3. Рассчитанные значения концентраций вакансий, полученные при моделировании имплантации ионов P^+ с энергией 40 кэВ в SiO_2 . ■ Доза 10^{13} ион/см²; ● доза 10^{14} ион/см²; ◆ доза $3 \cdot 10^{14}$ ион/см²; ▲ доза 10^{15} ион/см².

АСМ позволяет определять толщину радиационно-поврежденного слоя в имплантированном диоксиде кремния.

Расчёты имплантации ионов при разных значениях дозы облучения показали, что учёт рекомбинации приводит к чётко прослеживаемой тенденции к насыщению числа вакансий с ростом дозы облучения (рис. 3). После достижения дозы облучения, равной $3 \cdot 10^{14}$ ион/см², концентрация вакансий перестаёт сколько-нибудь заметно изменяться – эта доза соответствует насыщению. Эта тенденция хорошо согласуется с наблюдавшимся ранее экспериментальным фактом, который состоит в том, что скорость травления облучённого образца в определённый момент перестаёт расти при дальнейшем увеличении дозы [2, 3].

Разработанные нами методики изучения ионной модификации поверхности с помощью АСМ позволяют изучать распухание или распыление мишени [5]. При этом минимальная регистрируемая величина в изменении толщины образца, обусловленная этими эффектами, составляет всего 0.5 нм. В разработанной компьютерной модели величина распыления поверхности определяется коэффициентом распыления, который определяет количество атомов мишени, выбиваемое каждым падающим ионом. Величина распухания образца зависит от степени разрыхления материала мишени, которая в свою очередь, зависит от количества вакансий в слое, то есть от того, насколько эффективна рекомбинация. Таким образом, при моделировании процесса облучения изменение уровня поверхности обуславливается двумя параметрами:

коэффициентом распыления и коэффициентом рекомбинации. Анализ результатов вычислений показал довольно сильную зависимость соотношения распыления и распухания от коэффициента рекомбинации, тогда как варьируемый в разумных пределах коэффициент распыления вносит заметно меньший вклад в это соотношение. Кроме того, наблюдается достаточно узкая область значений α_R , в пределах которой при одном и том же коэффициенте распыления можно получить как распыление, так и распухание. Это указывает на существование некой критической величины α_R для конкретной системы ион-мишень и дает основание предположить, что также, как и для РСР, рекомбинация радиационных дефектов при имплантации играет существенную роль в процессах распыления и распухания.

Таким образом, использование атомно-силовой микроскопии для изучения эффектов распухания или распыления, увеличения скорости жидкостного травления образца после имплантации, сравнение полученных экспериментальных данных с расчетными позволяет более глубоко понять процессы происходящие при ионной бомбардировке твердых тел, сформулировать более точные физические модели, описывающие происходящие при этом явления.

Литература

1. Webb A.P., Houghton A.J., Townsend P.D.: Changes in the chemicals stability of ion-implanted silica glasses. *Radiat. Eff.* **30**, 177–182 (1976)
2. Валиев К.А., Данилов В.А., Дракин К.А., Пешехонов С.В., Раков А.В.: Физические процессы дефектообразования и травления при ионной литографии пленок двуокиси кремния. *Микроэлектроника* **11**, 323–328 (1982)
3. Бухараев А.А., Нургазизов Н.И., Можанова А.А., Овчинников Д.В.: Изучение с помощью атомно-силового микроскопа in situ кинетики жидкостного химического травления субмикронных пленок диоксида кремния. *Микроэлектроника* **28**, 385–394 (1999)
4. Nurgazizov N.I., Bukharaev A.A., Sugonyako A.V., Zhykharev V.A.: AFM investigation of radiation damage distribution in implanted silicon oxide. *Phys. Low-Dim. Struct.* **3-4**, 97–102 (2001)
5. Бухараев А.А., Нургазизов Н.И., Сугоняко А.В.: Мониторинг жидкостного травления имплантированного диоксида кремния с помощью атомно-силового микроскопа. *Микроэлектроника* **31**, (2002) принята в печать.
6. Бухараев А.А., Нургазизов Н.И., Овчинников Д.В., Можанова А.А.: Исследование in situ процессов химического травления имплантированного диоксида кремния в водных растворах HF при помощи атомно-силового микроскопа. *Журнал прикладной химии* **73**, 1260–1265 (2000)
7. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark: *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*. New York: Pergamon Press 1985.
8. Коноплев В.М.: Моделирование на ЭВМ имплантации больших доз ионов азота низкой энергии в кремний. *Поверхность* № 2, 68–73 (1987)

Применение компьютерного моделирования в магнитной силовой микроскопии

Д. В. Овчинников

Отдел химической физики, лаборатория физики и химии поверхности

В работе развивается метод компьютерного анализа экспериментальных МСМ-изображений малоразмерных ферромагнитных структур. Метод основан на моделировании МСМ-изображения от объекта с известной геометрией и заданным внутренним распределением намагниченности, которое в свою очередь определяется путем нахождения минимума внутренней магнитной энергии. Приведены первые результаты применения разработанного метода для установления доменной структуры и особенностей перемангничивания ферромагнитных полосок нанометровой толщины.

Бурное развитие информационных и компьютерных технологий, наблюдаемое в последние десятилетия, делает необходимым поиск новых сред и средств для записи и хранения информации. Несмотря на несомненные успехи в области создания оптических устройств хранения и записи, магнитные пленочные материалы не утратили своей актуальности. Причем их конкурентоспособность с оптическими средами возросла после создания ферромагнитных наноструктурированных тонкопленочных покрытий и улучшения их характеристик. Такие материалы обладают уникальными магнитными свойствами, которые обусловлены малостью размеров составляющих их отдельных структурных элементов. Например, малые магнитные объекты чаще всего обладают коэрцитивностью, существенно отличающейся от наблюдаемой для объемного материала. Ферромагнитные частицы с размером меньше определенного критического значения, но больше чем критический размер суперпарамагнитного состояния, и вовсе находятся в однодоменном состоянии и их перемангничивание вдоль оси магнитной анизотропии происходит скачкообразно [1]. Для ферромагнитных проводников малых размеров возможно аномальное поведение их проводимости при изменении внешнего магнитного поля – явление гигантского (или колоссального) магнитосопротивления, что используется для создания считывающих магнитных головок, высокочувствительных датчиков магнитного поля, специальных чипов памяти и т.д. [2].

Магнитные свойства, особенности процессов перемангничивания ферромагнитных объектов микронных и субмикронных размеров, в том числе процессы протекания электрического тока через ферромагнитные проводники в присутствии внешнего поля, зависят от внутренней микроструктуры намагниченности и ее трансформации при изменении величины и направления внешнего поля. Для исследования доменной структуры ферромагнитных микро- и нанообъектов, сформированных на поверхности твердого тела,

в последнее время все чаще применяются методы сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) [3]. Методы СЗМ основаны на “ощупывании” поверхности исследуемого объекта с помощью острой иглы-зонда, прикрепленной к концу гибкой консоли-кантилевера. Для увеличения чувствительности метода применяют режим работы СЗ микроскопа, в котором кантилевер приводится в колебания на своей резонансной частоте. Отклонение кантилевера либо изменение его резонансных характеристик, таких как частота, амплитуда или фаза колебаний при проходе вдоль поверхности образца позволяет детектировать величину взаимодействия между зондом микроскопа в каждой точке сканирования, что дает возможность в простейшем случае получить информацию о топографии сканируемого участка поверхности с высоким разрешением (вплоть до атомного), а при использовании зондов, обладающих особыми свойствами, получить информацию о других свойствах поверхности. Например, в методе магнитной силовой микроскопии (МСМ) в случае применения магнитного зонда можно детектировать магнитное взаимодействие иглы с поверхностью образца и тем самым изучать распределение намагниченности с высоким разрешением и чувствительностью [4]. Использование же специального режима двойного прохода зонда (lifting mode) дает возможность одновременного получения и топографии и магнитного изображения одного и того же участка поверхности.

Метод МСМ обладает рядом преимуществ перед другими методиками, позволяющими изучать внутреннюю магнитную микроструктуру малых ферромагнетиков, таких как магнито-оптическая микроскопия, Лоренцева микроскопия, порошковый метод и т.д. [5–7], поскольку не требует особых приготовлений образца перед измерением, не предъявляет жестких требований к его оптическим свойствам, но обладает высокой чувствительностью и разрешающей способностью. Так же важно отметить, что, разместив дополнительно электромагнит внутри зондового мик-

роскопа, можно изучать процессы перемангничивания *in-situ*, меняя направление и величину приложенного к образцу поля [8]. Такая методика была реализована в микроскопе Solver P47 сотрудниками лаборатории Бородиным П.А. и Бизяевым Д.А. под руководством Бухараева А.А.

Однако, изображения, получаемые методом МСМ, являются следствием магнитных далекодействующих сил между иглой микроскопа и полем, создаваемым исследуемой поверхностью. Поскольку это взаимодействие имеет сложный характер, не всегда удается трактовать экспериментальные данные, т.е. определить до-

менную структуру образца по его МСМ-изображению. Для решения данной проблемы и повышения достоверности данных, получаемых методом МСМ можно использовать компьютерный анализ экспериментальных изображений. В 2001 году нами был разработан метод компьютерного анализа МСМ-изображений.

Анализ данных МСМ экспериментов подразумевает компьютерное моделирование МСМ-изображений, основу которого составляет расчет взаимодействия иглы с магнитным полем, создаваемым поверхностными структурами исследуемого образца. Для

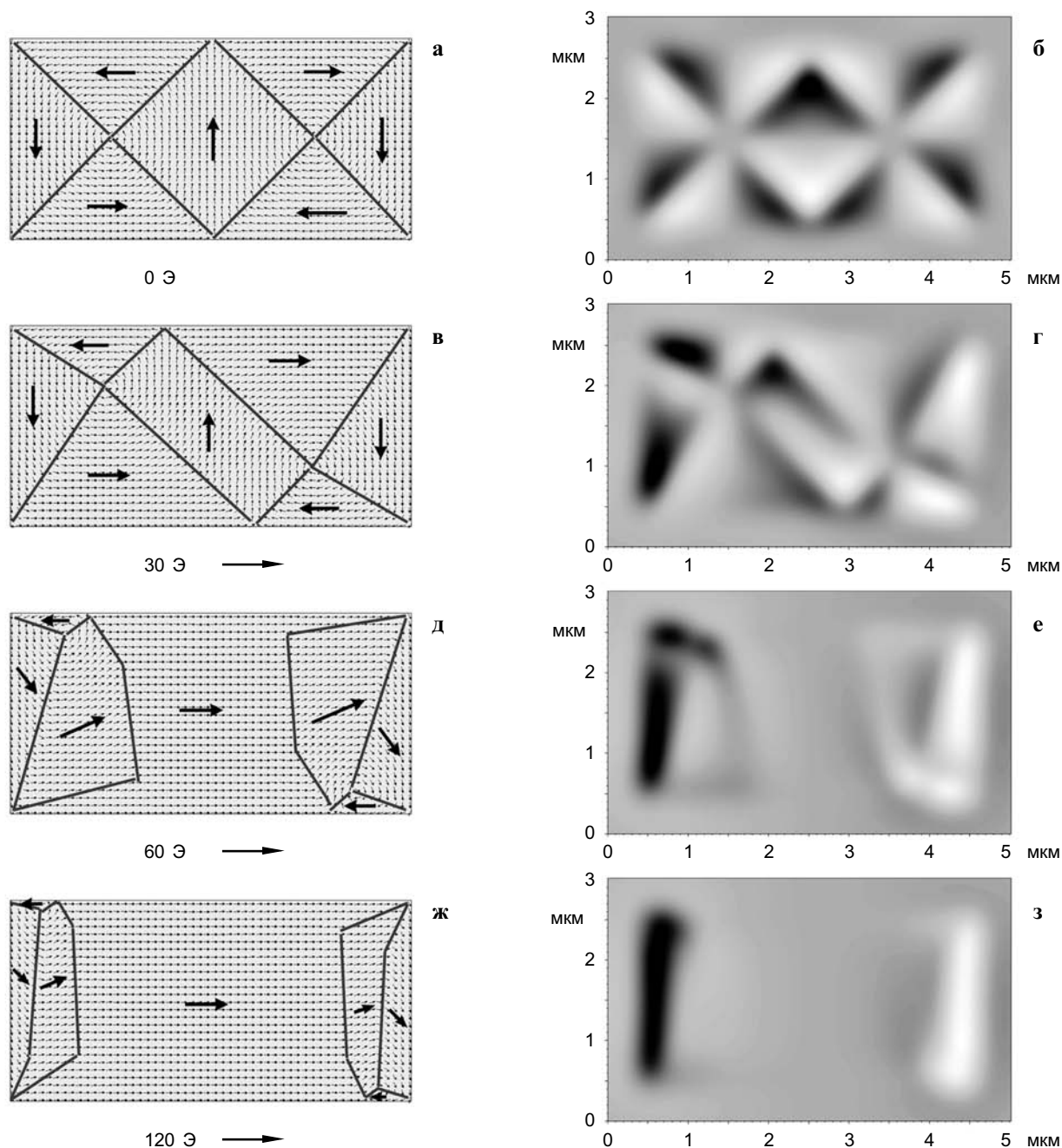


Рис. 1. Компьютерное моделирование процессов перемангничивания ферромагнитной полоски. а, в, д, ж распределения намагниченности полоски в различных по величине внешних магнитных полях; б, г, е, з соответствующие смоделированные МСМ-изображения.

расчета МСМ-изображения от объекта с известными геометрическими параметрами и структурой намагниченности была создана оригинальная программа. Алгоритм расчета основан на делении магнитного объема МСМ-иглы и образца на физически малые области, каждая из которых аппроксимируется точечным магнитным диполем, а взаимодействие между иглой микроскопа и исследуемым объектом представляет собой сумму взаимодействий между отдельными магнитными моментами [9]. Виртуальное перемещение МСМ-иглы в различные точки пространства над образцом на определенной высоте, имитирующее процесс сканирования в микроскопе, и вычисление магнитного взаимодействия в каждой точке позволяют получить модельное МСМ-изображение.

Предварительный расчет структуры намагниченности микрообъекта с заданными геометрическими и магнитными параметрами производился путем интегрирования уравнения Ландау-Лифшица для каждого i -го момента:

$$\frac{d\mathbf{M}_i}{dt} = -\gamma \mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\gamma\alpha}{M_s} \mathbf{M}_i \times (\mathbf{M}_i \times \mathbf{H}_{\text{eff}}), \quad (1)$$

где $\mathbf{M}_i$ – магнитный момент i -ой области, $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ – полное магнитное поле в данной области, γ – гиромагнитное соотношение, α – константа затухания, $\mathbf{H}_{\text{eff}} = -\mu_0^{-1} \partial E / \partial \mathbf{M}_i$, где E – полная магнитная энергия. Данное интегрирование аналогично минимизации полной магнитной энергии имеющейся системы магнитных моментов, в которую входят: Зеемановское взаимодействие с внешним магнитным полем, энергия магнитного размагничивания, обменное взаимодействие и энергия магнитной кристаллической анизотропии. Для расчета структуры намагниченности использовался программный комплекс OOMMF (Object Oriented Micromagnetic Framework) версии 1.0b, разрабатываемый и распространяемый через интернет (<http://math.nist.gov/oommf>) Национальным институтом стандартов и технологии, США. Данный программный продукт предназначен для расчетов микромагнитных характеристик планарных структур микронных и субмикронных размеров и нанометровой толщины, в том числе и для расчета распределения намагниченности [10].

С помощью программы OOMMF были произведены расчеты доменной структуры для планарных ферромагнитных структур с различными геометрическими и магнитными параметрами. Для изучения особенностей процессов перемагничивания были рассчитаны структуры намагниченности для одной и той же частицы во внешнем поле различной величины. Для рассчитанных конфигураций намагниченности были смоделированы МСМ-изображения.

Для моделирования МСМ-изображений игла, которая аппроксимировалась точечным диполем, поме-

щалась на определенном расстоянии от поверхности рассматриваемого образца. Было обнаружено, что разрешение смоделированных МСМ-изображений сильно зависит от выбора данной высоты, что подтверждается экспериментально. Для моделирования последующих МСМ-изображений было выбрано расстояние для МСМ-иглы, которое дает разрешение, сопоставимое с полученным экспериментально.

На рис. 1 приведены результаты моделирования для микрочастицы с отношением сторон 2:1. Было обнаружено, что конфигурация доменной структуры в нулевом поле и особенности трансформации ее в процессе перемагничивания зависят от магнитных характеристик вещества микрочастицы, в частности от константы и направления оси анизотропии. На рис. 2 приведены результаты моделирования для микрочастицы с отношением сторон 5:1. Сравнение распределений намагниченности в нулевом поле для этих частиц (рис. 2б и 1а) показывает, что имеется также зависимость магнитных свойств микрообъектов от формы и размеров. Кроме того, показано, что для планарных микрочастиц с достаточно большим отношением длины к ширине в нулевом поле характерна “полосатая” структура намагниченности, что подтверждается экспериментальными данными (рис. 3) [11]. Расчеты, проведенные дополнительно, дают основание утверждать, что характер доменной структуры слабо зависит от конкретных планарных размеров микрообъектов для определенных интервалов этих размеров, зависящих от корреляционных длин различных внутренних микромагнитных взаимодействий. Зави-

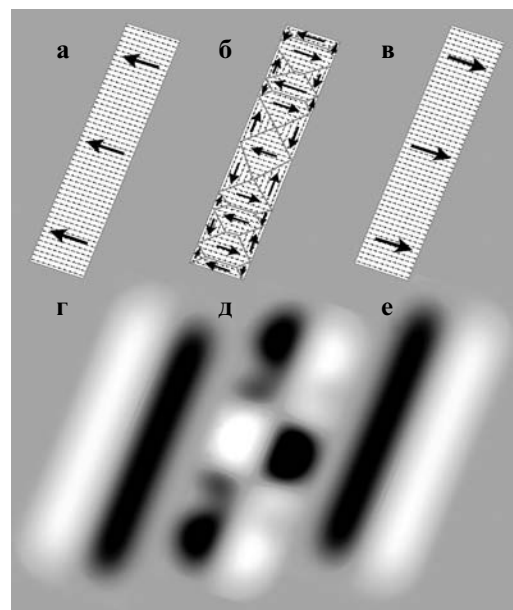


Рис. 2. Компьютерное моделирование процессов перемагничивания монокристаллической ферромагнитной полоски. а–в Распределение намагниченности: а, в насыщении, б в нулевом поле при перемагничивании из состояния а в состояние в. г–е Соответствующие МСМ-изображения.

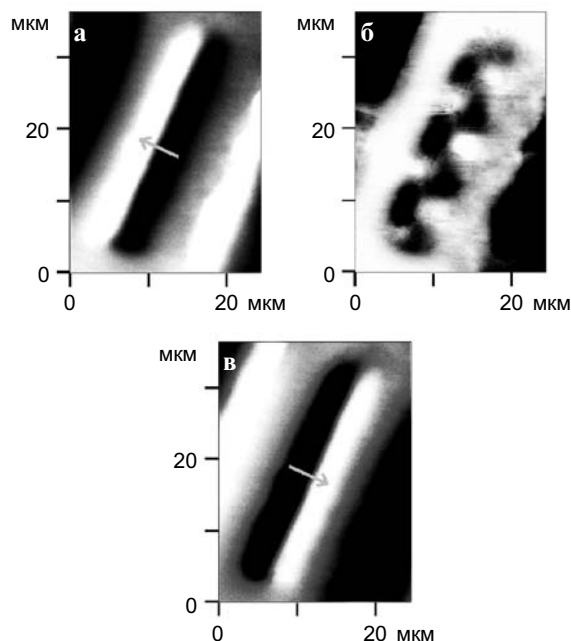


Рис. 3. Экспериментальные МСМ-изображения полоски кобальта с планарными размерами 1×20 мкм² и высотой около 70 нм в различных по величине внешних магнитных полях: **а** -100 Э, **б** 0 Э, **в** $+100$ Э (стрелки показывают направление поля). Изображения получены на микроскопе Solver P47 аспирантом лаборатории ФХП Бородиным П.А.

симость от соотношения сторон микрообъекта имеет гораздо более выраженный характер.

Таким образом, в данной работе представлен алгоритм компьютерного анализа экспериментальных МСМ изображений. Обнаружена зависимость структуры намагниченности от размера и формы микрообъекта. Получены первые результаты по расшифровке доменной структуры ферромагнитных полосок

металлов группы железа. Проведено сравнение экспериментальных и смоделированных МСМ-изображений сильно вытянутых частиц, имеющих полосатую доменную структуру в нулевом магнитном поле.

Литература

1. Girgis E., Schelten J., Shi J., Janesky J., Tehrani S., Goronkin H.: Switching characteristics and magnetization vortices of thin-film cobalt in nanometer-scale patterned arrays. *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3780 (2000)
2. Ebels U., Radulescu A., Henry Y., Piraux L., Ounandjela K.: Spin accumulation and domain wall magnetoresistance in 35 nm Co wires. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 983 (2000)
3. Бухараев А.А., Овчинников Д.В., Бухараева А.А.: Диагностика поверхности с помощью сканирующей силовой микроскопии (обзор). *Заводская лаборатория* **5**, 10 (1997)
4. Rugar D., Mamin H.J., Guethner P., Lambert S.E., Stern J.E., McFadyen I., Yogi T.: Magnetic force microscopy: General principles and application to longitudinal recording media. *J. Appl. Phys.* **68**, 1169 (1990)
5. Zuecco E., Rave W., Schafer R., Mertig M., Schultz L.: Observations of Fe surfaces with magnetic force and Kerr microscopy. *J. Magn. Magn. Mat.* **196–197**, 115 (1999)
6. Szmaja W.: Studies of the surface domain structure of cobalt monocrystals by the SEM type-I magnetic contrast and Bitter colloid method. *J. Magn. Magn. Mat.* **219**, 281 (2000)
7. Dan Dahlberg E., Proksch R.: Magnetic microscopies: the new additions. *J. Magn. Magn. Mat.* **200**, 720 (1999)
8. Gomez R.D., Burke E.R., Mayergoyz I.D.: Magnetic imaging in the presence of external fields: Technique and applications. *J. Appl. Phys.* **79**, 6441 (1996)
9. Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Компьютерное моделирование МСМ-изображений в рамках статической модели распределения намагниченности и диполь-дипольного взаимодействия. *ЖТФ* **71**, 85 (2001)
10. Dao N., Homer S.R., Whittenburg S.L.: Micromagnetic simulation of nanoshaped iron elements: Comparison with experiment. *J. Appl. Phys.* **86**, 3262 (1999)
11. Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A., Borodin P.A., Biziaev D.A.: In situ MFM investigation of magnetization reversal in Co patterned microstructures. *Phys. Low-Dim. Struct.* **3/4**, 103 (2001)

Влияние термического отжига в атмосфере азота на оптические свойства и колебательный спектр графеновых наноструктур

И. А. Файзрахманов, В. В. Базаров, Н. В. Курбатова, И. Б. Хайбуллин

Лаборатория радиационной физики

Проведены сравнительные исследования влияния термического отжига ($T = 400^\circ\text{C}$) в вакууме и в атмосфере азота на оптические свойства и спектры комбинационного рассеяния (КР) углеродных пленок. Обнаружены их аномальные изменения при отжиге в атмосфере азота: коэффициент поглощения пленок в видимой области спектра уменьшается приблизительно на два порядка, а в спектрах КР исчезает характерная полоса от графеновых нанокластеров и появляются несколько новых – узкие полосы на частотах 928, 968 и $2324\text{ (N}_2\text{) cm}^{-1}$ и широкая полоса в области $2200\text{--}2400\text{ cm}^{-1}$. Установлено, что эти изменения носят обратимый характер. Полученные результаты свидетельствуют о формировании нового типа углерод-азотных нанокластеров при определенных условиях термоотжига углеродных пленок.

Введение

Наноструктуры и нанокластерные системы по комплексу своих свойств существенно отличаются от массивных материалов. В последние годы интерес к ним значительно возрос с точки зрения их применения в нано- и оптоэлектронике, а исследования фундаментального характера привели к возникновению нового направления – физики наноструктур. Особое место в этих исследованиях занимают наноструктуры на основе углерода, к которым относятся и алмазоподобные пленки углерода. В них в качестве наноразмерных частиц выступают графеновые нанокластеры размером от 0.5 до 5 нм, которые встроены в алмазоподобную аморфную матрицу. Размерное квантование приводит к возникновению щели в электронном спектре графеновых нанокластеров, что определяет край оптического поглощения этих материалов. Характерным свойством этих материалов является их метастабильность. Термический отжиг при температурах $\sim 300^\circ\text{C}$ и выше приводит к графитизации алмазоподобной матрицы путем роста графеновых нанокластеров, что вызывает уменьшение оптической щели, увеличение на несколько порядков электропроводности пленок, ведет к характерным изменениям спектров комбинационного рассеяния.

Имеются две принципиальные возможности управления электронными свойствами наноструктурных материалов. Первая возможность заключается в управлении размерами и концентрацией наночастиц либо при синтезе наноструктур, либо путем последующих энергетических обработок. Другая возможность состоит в управлении электронной структурой графеновых нанокластеров путем введения примесных атомов. Основная масса работ в этом направлении посвящена допированию алмазоподобных пленок азотом. При этом установлено, что введение азота приводит к уменьшению оптической щели и активирова-

нию рамановских колебательных мод в ИК поглощение. Аналогичный эффект наблюдается и при допировании углеродных пленок медью. Однако в отличие от азота, который встраивается в структуру нанокластера, атомы меди взаимодействуют с нанокластерами по механизму интеркаляции. В результате переноса заряда от атома меди к нанокластеру происходит существенное перераспределение электронной плотности и нанокластеры приобретают свойства металла.

В ходе исследований алмазоподобных пленок нами было обнаружено аномальное поведение оптических свойств алмазоподобных пленок при их термическом отжиге в атмосфере азота. В результате такого отжига коэффициент оптического поглощения пленок в видимой области спектра уменьшался на несколько порядков и пленки становились практически прозрачными. Поскольку при использованных температурах отжига (400°C и ниже) азот практически инертен, то полученный результат был абсолютно непонятен, но интересен. В связи с этим возникла задача детального исследования этого нового эффекта. В данном сообщении приведены результаты, полученные в 2001 году.

Методика и техника экспериментов

Алмазоподобные пленки $\alpha\text{-C}$ толщиной $d \approx 300\text{ нм}$ осаждались методом ионно-лучевого распыления графита (рабочий газ Хе, $E = 1\text{ кэВ}$). В качестве подложек использовались плавленый кварц и пластины монокристаллического кремния. Исследовались оптические свойства и спектры комбинационного рассеяния (КР) ($\lambda = 488\text{ нм}$) исходных образцов и образцов, подвергнутых термическому отжигу при температуре 400°C в условиях вакуума ($\sim 10^{-3}\text{ Pa}$) и в потоке азота. Поток азота создавался путем испарения жидкого

азота, который содержит кислород ~1–2%. Толщина пленок определялась методом эллипсометрии. По спектрам отражения и пропускания пленок определялась спектральная зависимость коэффициента поглощения пленок в видимой и ближней УФ области спектра. С использованием этих данных строилась зависимость Тауца:

$$(\alpha E)^{1/2} = B(E - E_{gT}),$$

где α – коэффициент поглощения пленки, E – энергия фотона, E_{gT} – оптическая щель Тауца, которая определяется средним размером графеновых нанокластеров в пленке; B – параметр зависимости Тауца, который пропорционален концентрации графеновых нанокластеров в образце.

Спектры комбинационного рассеяния от углеродных пленок имеют характерные полосы: G (graphitic, 1575 cm^{-1}) полосу и D (disordered, 1360 cm^{-1}) полосу. Обе полосы связаны с колебательными модами атомов углерода графеновых нанокластеров. Отношение интенсивностей этих полос определяется размером нанокластера. Благодаря этому метод КР спектроскопии позволяет определять средний размер графеновых нанокластеров.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены зависимости Тауца для пленок углерода, подвергнутых термическому отжигу при различных условиях. Отжиг в вакууме приводит к известным изменениям оптического поглощения, что связано с увеличением размеров нанокластеров. Этот вывод подтверждается данными спектроскопии комбинационного рассеяния. На рис. 2 приведены спектры комбинационного рассеяния от исходного образца (1) и образца после термического отжига в вакууме (2). Видно, что для исходных образцов наблюдается характерный для алмазоподобных пленок спектр. Отжиг пленок в условиях вакуума ведет к увеличению отношения интенсивностей D и G пиков, что также свидетельствует об увеличении размеров нанокластеров.

Отжиг в атмосфере азота проходит, по крайней мере, в два этапа. На первом этапе формируется нанопористая пленка. Об этом свидетельствует существенное уменьшение показателя преломления пленок (от $n = 2$ до 1.5). При этом уменьшается и толщина пленки (от 300 до 200 нм). Причина заключается в химическом взаимодействии кислорода, который содержится в виде примеси в атмосфере отжига, с углеродом. На этом этапе отжиг также приводит к увеличению размеров оставшихся нанокластеров, о чем свидетельствуют данные оптических измерений (рис. 1, зависимость 3) и спектр КР (рис. 3, спектр 1), и в этом

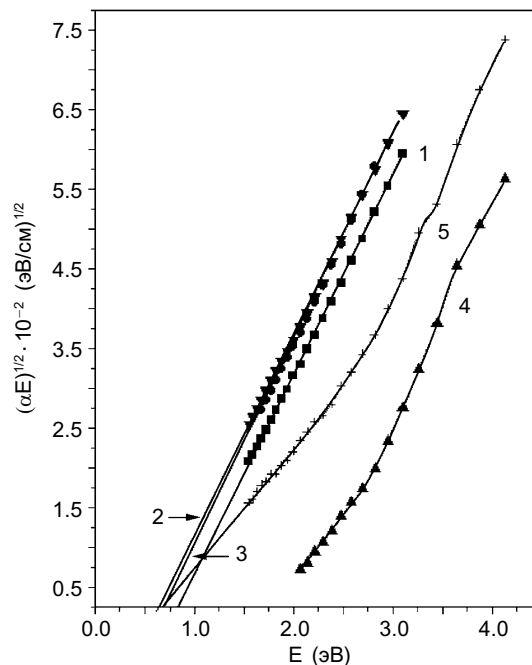


Рис. 1. Зависимость Тауца для пленок α -C при различных режимах отжига ($T = 400^\circ\text{C}$): 1 – исходный образец; 2 – отжиг в вакууме, 1 час; 3 – отжиг в N_2 , 10 мин; 4 – отжиг в N_2 , 35 мин; 5 – отжиг в N_2 и повторный отжиг в вакууме, 1 час.

отношении отжиг в атмосфере азота ничем не отличается от отжига в вакууме. Небольшое отличие состоит в том, что на спектре КР появляется пик на частоте 520 cm^{-1} от кремниевой подложки, что связано с уменьшением показателя преломления и толщины углеродной пленки.

На втором этапе происходит просветление пленки (рис. 1, зависимость 4) и значительное изменение спектра КР: G и D полосы исчезают, но появляются несколько новых, в том числе и от молекул азота (рис. 3, спектр 2). Отсутствие G и D полос и существенное изменение оптических свойств свидетельствуют в пользу того, что графеновые нанокластеры пропадают

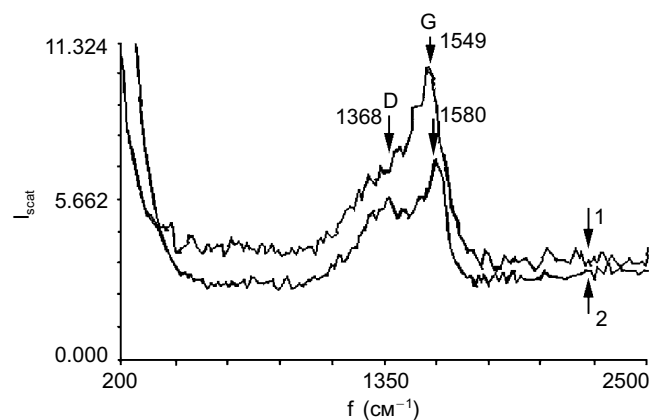


Рис. 2. Спектры КР от исходного образца (кривая 1) и после отжига в вакууме, 1 час (кривая 2).

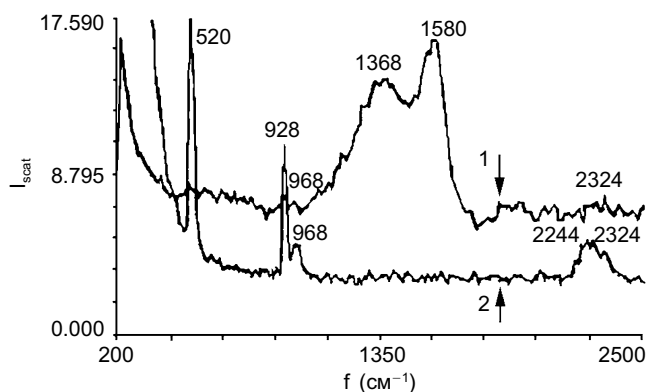


Рис. 3. Спектры КР от образцов после отжига в N₂: 10 мин (кривая 1) и 35 мин (кривая 2).

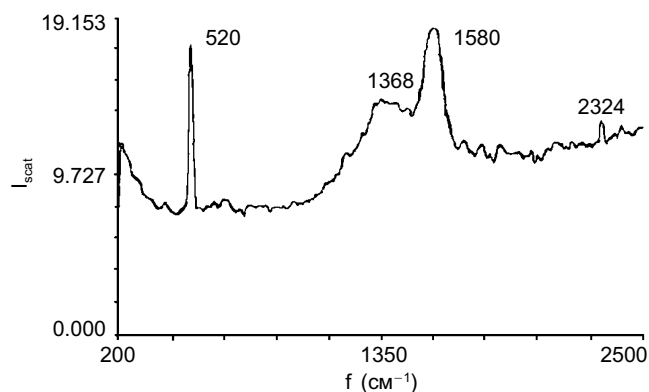


Рис. 4. Спектр КР после отжига в N₂, 35 мин, и последующего отжига в вакууме, 1 час.

ют. Однако это не так. Если провести повторный отжиг при той же температуре, но в условиях вакуума, то происходит частичное восстановление сначала оптических спектров (рис. 1, зависимость 5), а затем и спектров КР (рис. 4). Оптические свойства полностью восстанавливаются, если повторный отжиг в вакууме проводить при температуре $\sim 500^\circ\text{C}$. Энергия активации этого процесса составляет ~ 0.064 эВ.

Низкотемпературный и обратимый характер наблюдаемых изменений электронной и колебательной структуры нанокластеров с низкой энергией активации процесса восстановления указывают на то, что они связаны с адсорбцией молекул азота на графеновых нанокластерах. Для этого необходимо обеспечить доставку молекул азота к поверхности нанокластеров, что достигается за счет образования на первом этапе отжига нанопор, по которым азот проникает вглубь образца. Поэтому присутствие в потоке азота примесного кислорода является необходимым условием.

Молекулярный азот, как уже отмечалось, химически инертен и не может образовывать химическую связь с атомами углерода. Поэтому взаимодействие молекулярного азота с нанокластером должно идти по интеркаляционному механизму путем переноса электрона на кластер или, наоборот, от кластера. Направление переноса электрона определяется относительным положением основных и возбужденных уровней нанокластера и адсорбированной молекулы. Основное состояние нанокластера находится ниже уровня вакуума приблизительно на 1.5–2 эВ. Энергия ионизации и энергия возбуждения молекулы азота составляют 15.5 и 6.1 эВ соответственно, т.е. первое возбужденное состояние находится ниже уровня вакуума на 9.4 эВ. Поэтому можно предположить, что электронные системы нанокластера и адсорбированной молекулы азота приходят в равновесие за счет пере-

носа электрона от нанокластера к молекуле азота. В результате оптическая щель нанокластера существенно увеличивается.

Для изменения электронной структуры нанокластера достаточно одной адсорбированной молекулы азота, как в случае интеркаляции атомами меди. Когда таких молекул становится много, т.е. кластер покрывается как бы шубой из молекулярного азота, изменяется его колебательный спектр — он сдвигается в высокочастотную область (полоса в области 2100–2300 см⁻¹), и появляется дополнительная колебательная мода (полоса 900–1000 см⁻¹) за счет слабой связи молекул азота с нанокластером. Коренное изменение колебательного спектра свидетельствует о формировании нового типа углерод-азотных нанокластеров. Основываясь на этой модели, присутствие двух хорошо разрешенных пиков в области 900–1000 см⁻¹ можно объяснить наличием двух типов нанокластеров, скорее всего это нанокластеры с четным и нечетным количеством атомов углерода.

Выводы

Обнаружено аномальные изменения колебательного спектра и оптических свойств углеродных пленок при термическом отжиге ($T = 400^\circ\text{C}$) в атмосфере азота с примесью кислорода. Эти изменения носят обратимый характер. Установлено, что модификация пленок происходит в два этапа. На первом этапе формируется нанопористая углеродная пленка. На втором этапе происходит диффузия молекул азота в нанопоры. Предложена качественная модель, объясняющая наблюдаемые изменения взаимодействием молекул азота с графеновыми нанокластерами по интеркаляционному механизму с формированием нового типа углерод-азотных нанокластеров.

Ионно-лучевой синтез металлополимерных наноструктур

В. Ю. Петухов, М. И. Ибрагимова, Н. Р. Хабибуллина

Лаборатория радиационной физики

Методом ионно-лучевого синтеза получены тонкие металлополимерные пленки, состоящие из ансамбля металлических наночастиц в полимерной матрице. Установлены основные закономерности синтеза, механизмы зарождения и роста, а также влияние на эти процессы различных факторов, таких как тип исходного полимера, тип внедряемых ионов, режимы имплантации. В частности показано, что морфология синтезированных слоев изменяется подобным образом для всех типов полимеров, а процесс зарождения частиц зависит как от типа исходного полимера, так и от типа бомбардирующих ионов. Механизм роста металлических наночастиц обусловлен как диффузией отдельных атомов, так и, в случае имплантации ионов ферромагнитных металлов, миграцией отдельных синтезируемых наночастиц с последующей их коагуляцией. Соответствующий подбор структуры исходного полимера и режимов имплантации позволяет эффективно управлять фазовым составом, размерами наночастиц и их распределением в пленке.

Введение

Интерес к синтезу и свойствам наночастиц металлов, внедренных в полимерную матрицу, постоянно растет, что объясняется уникальными свойствами этих материалов и широкими возможностями их практического применения [1, 2]. В частности, при образовании ансамбля мелкодисперсных частиц, распределенных в ультратонком слое, вследствие межчастичных взаимодействий, могут проявляться особые свойства тонких металлополимерных пленок. Такие системы практически мало изучены и в настоящее время становятся объектом интенсивного исследования.

Ионная имплантация (ИИ) является одним из универсальных методов модификации физических свойств приповерхностных слоев практически любых конденсированных материалов. При высоких дозах ионной имплантации, когда локальная концентрация внедренных ионов становится сравнимой с концентрацией атомов в веществе, возможен синтез различных химических соединений [3, 4]. Ионно-лучевой синтез (ИЛС) позволяет получать тонкие пленки разного состава и структуры в различных матрицах, в том числе и в полимерах. Особый интерес представляют ферромагнитные тонкие металлополимерные пленки, что обусловлено возможностью их использования в качестве носителей для магнитной и магнитооптической записи и хранения информации с высокой плотностью.

Ранее высокодозной имплантацией однозарядных ионов переходных металлов в различные полимерные матрицы нами были получены тонкие металлополимерные пленки, состоящие из ансамбля малых металлических частиц [5, 6]. Однако, результаты, полученные при ИЛС металлополимерных наноструктур, синтезированных при различных комбинациях ион/мишень, зачастую оказывались разными.

Целью работы на этапе 2001 года явилось установление основных закономерностей ИЛС металлополимерных наноструктур, механизмов зарождения и роста, а также влияние на процесс ИЛС различных факторов, таких как тип исходного полимера, тип внедряемых ионов, режимов ИИ.

Для определения влияния структуры исходной матрицы на процесс ИЛС были выбраны следующие полимерные мишени:

- пластины промышленного полиметилметакрилата (ПММА), широко используемого в качестве базового материала при производстве магнитооптических дисков;
- пленки химически модифицированного ПММА (М-ПММА), полученные путем введения в полимерную цепь фосфорсодержащих фрагментов;
- пленки промышленного полиэтилентерефталата (ПЭТФ).

Для установления механизма зарождения и роста новой фазы в полимерах были проведены эксперименты по имплантации ионов Fe^+ и Cu^+ в широком интервале доз $\Phi = 10^{16} \div 6 \cdot 10^{17}$ ион/см². Режимы ИИ при ИЛС (плотность потока ионов, температура образца) поддерживались постоянными во всех экспериментах.

Определение состава, размера и структуры синтезированных частиц проводилось методами электронной и сканирующей зондовой микроскопии. С помощью метода ферромагнитного резонанса регистрировали появление магнитной фазы, а также определяли характер распределения и форму частиц в слое.

Результаты исследований

Исследование образцов ПММА и М-ПММА методом просвечивающей электронной микроскопии по-

казало, что при малых дозах облучения ионами 3d-металлов изменений в морфологии и структуре приповерхностных слоев не наблюдается вплоть до дозы $3 \cdot 10^{16}$ ион/см². С увеличением дозы на микрофотографиях появляются нанодисперсные частицы вторичной фазы. При этом наблюдается четкая зависимость формы и размера частиц не только от режимов имплантации, но и от структуры исходного полимера и типа бомбардирующих ионов.

Имплантация ионов Fe^+

На рис. 1 приведены последовательные микрофотографии, отражающие основные этапы роста тонких металлополимерных пленок, полученных имплантацией ионов Fe^+ в ПММА и в М-ПММА для интервала доз имплантации $3 \cdot 10^{16} \div 6 \cdot 10^{17} Fe^+/cm^2$.

При дозах облучения выше $3 \cdot 10^{16} Fe^+/cm^2$ происходит зарождение и рост новой фазы. Форма синтезированных частиц в плоскости пленки близка к кругу. По мере набора дозы происходит как укрупнение частиц, так и увеличение их плотности, и далее начи-

нается процесс коагуляции частиц, завершающийся образованием лабиринтной структуры. При этом по данным микродифракции основной фазой во всех случаях является α -Fe с небольшим содержанием оксидов, карбидов и алмазоподобной фазы.

Как видно из рисунков, основные этапы зарождения и роста для всех исследованных полимеров сходны, хотя численные значения размеров частиц и их плотности при равных дозах ИИ различны.

По данным атомно-силовой микроскопии синтезированные пленки остаются заглабленными до дозы $\Phi \sim 2 \cdot 10^{17} Fe^+/cm^2$, и влияние процессов распыления на микрорельеф поверхности проявляется лишь при больших дозах.

Появление линий поглощения в спектрах ферромагнитного резонанса (ФМР) при определенной дозе облучения указывает на формирование ферромагнитной фазы. Доза имплантации, при которой регистрируется появление сигнала ферромагнитного резонанса, зависит от типа исходной матрицы. Для ПЭТФ – это доза $\Phi > 2 \cdot 10^{16} Fe^+/cm^2$, для химически модифицированного ПММА – $\Phi > 4 \cdot 10^{16} Fe^+/cm^2$, а для ПММА эта доза значительно выше – $\Phi > 10^{17} Fe^+/cm^2$.

Если нанодисперсные металлические частицы представить как ансамбль ферромагнитных слабо взаимодействующих между собой сплюснутых эллипсоидов вращения, то угловую зависимость линий поглощения можно описать классической формулой Киттеля [8]

$$(\omega/\gamma)^2 = [H_0 \cos(\theta - \theta_H) - H_{eff} \cos 2\theta] \times [H_0 \cos(\theta - \theta_H) - H_{eff} \cos^2 \theta], \quad (1)$$

где H_0 – напряженность внешнего статического магнитного поля, H_{eff} – эффективное поле анизотропии, θ и θ_H – углы между вектором намагниченности или вектором внешнего магнитного поля и нормалью к поверхности соответственно.

Величины H_{eff} и гиромагнитного отношения γ (или g -фактора) можно тогда вычислить путем подстановки экспериментальных значений H_0 , получаемых при перпендикулярной и параллельной ориентации образца, в уравнение (1).

Основными компонентами, вносящими вклад в эффективное поле анизотропии H_{eff} в уравнении (1), могут быть поле кристаллографической анизотропии H_a , поле диполь-дипольного взаимодействия между частицами H_{d-d} и поле, связанное с анизотропией формы отдельных частиц H_f

$$H_{eff} = H_a + H_{d-d} + H_f. \quad (2)$$

Проведенные оценки показали, что максимальный вклад в величину H_{eff} от первых двух членов в уравнении (2) для образца, показанного на рис. 1е, составляет соответственно 4% и 5% от величины тре-

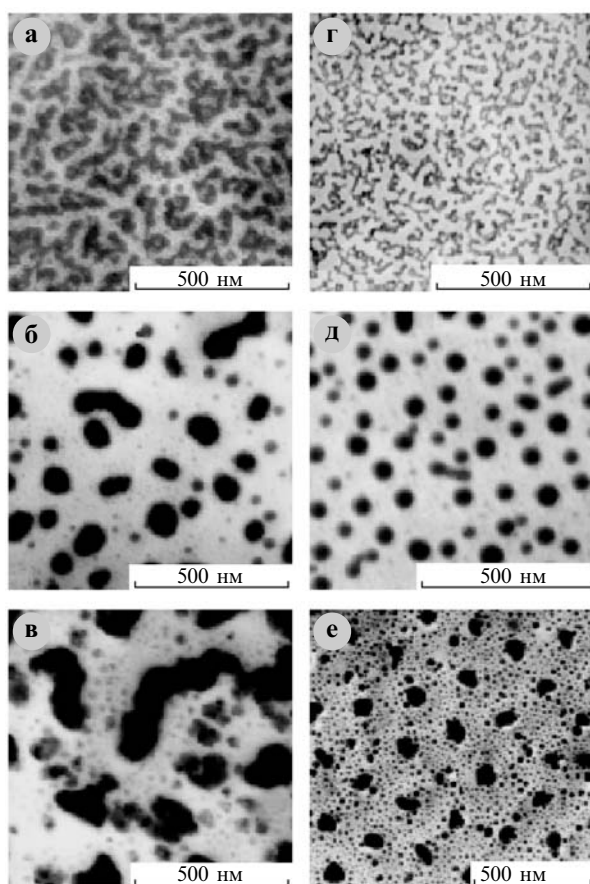


Рис. 1. Микрофотографии образцов М-ПММА (а-в) и ПММА (г-е), имплантированных ионами Fe^+ с плотностью ионного тока $j = 4$ мкА/см² при дозах: а, г $\Phi = 1.2 \cdot 10^{17} Fe^+/cm^2$; б, д $\Phi = 1.8 \cdot 10^{17} Fe^+/cm^2$; в, е $\Phi = 3 \cdot 10^{17} Fe^+/cm^2$ [7].

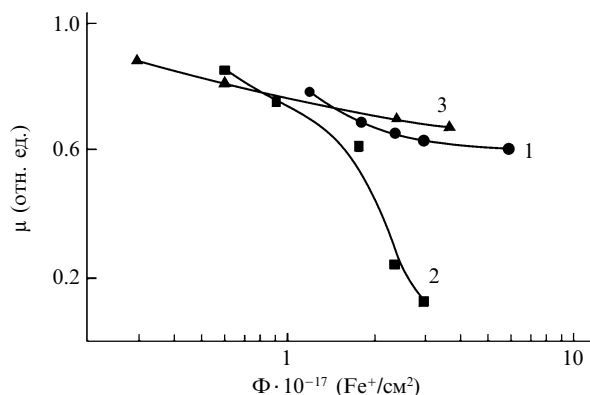


Рис. 2. Зависимость параметра эллиптичности μ от дозы ионного облучения Φ для имплантированных ионами Fe^+ образцов ПММА (кривая 1), химически модифицированного ПММА (кривая 2) и ПЭТФ (кривая 3). $j = 4 \text{ мкА/см}^2$ [7].

тьего члена. Поэтому можно считать, что основной вклад в анизотропию сигнала ферромагнитного резонанса вносит анизотропия формы индивидуальной частицы. Тогда выражение для эффективной намагниченности насыщения, вычисляемой из спектров ферромагнитного резонанса, можно записать в виде

$$M_{\text{eff}} = \Delta D M_s, \quad (3)$$

где ΔD – разность размагничивающих факторов вдоль большой и малой осей эллипсоида.

Принимая намагниченность насыщения M_s равной намагниченности $\alpha\text{-Fe}$, можно из значений для M_{eff} вычислить ΔD для сплюснутого эллипсоида вращения, а затем по формуле Осборна (4) определить величину параметра эллиптичности μ (отношение малой полуоси эллипсоида вращения к большой) [9]:

$$\Delta D = 4\pi \frac{2 + \mu^2}{2(1 - \mu^2)} - \frac{3}{2} \frac{\mu}{(1 - \mu^2)^{3/2}} \arcsin \sqrt{1 - \mu^2}. \quad (4)$$

На рис. 2 приведены зависимости $\mu = \mu(\Phi)$ для имплантированных однозарядными ионами железа образцов ПММА (кривая 1), М-ПММА (кривая 2) и ПЭТФ (кривая 3). Из этих экспериментов можно отметить два факта. Во-первых, доза, при которой появляется ферромагнитная фаза, различна для разных исходных полимеров. Во-вторых, с ростом дозы частицы становятся более плоскими, причем “сплюснутость” частиц сильно зависит от исходной мишени.

Имплантация ионов Cu^+

Как видно из рис. 3, в результате имплантации ионов меди в полимерах также наблюдается образование вторичной фазы. Однако даже при высоких дозах облучения синтезированные частицы имеют форму, близкую к сферической, причем их средний размер

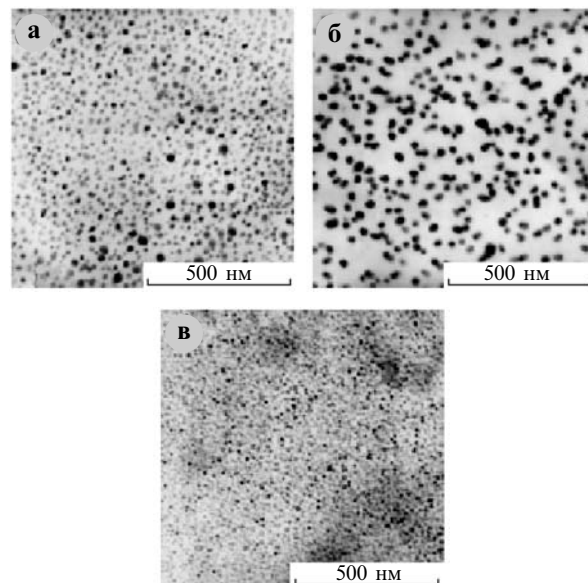


Рис. 3. Микрофотографии образцов ПММА (а, б) и химически модифицированного ПММА (в), имплантированных ионами Cu^+ с дозами $\Phi = 2.5 \cdot 10^{17}$ (а, в) и $3.7 \cdot 10^{17} \text{ Cu}^+/\text{см}^2$ (б). $j = 4 \text{ мкА/см}^2$ [7].

составляет всего $\sim 10 \text{ нм}$. Эта величина почти на порядок меньше, чем при ионном синтезе частиц железа. При этом не наблюдается коагуляция частиц с образованием конгломератов.

Фазоструктурный анализ показывает результаты, схожие с данными для полимеров, бомбардированных ионами железа: после ИИ образуются фазы металлической меди и алмазоподобной пленки в ПММА, тогда как в химически модифицированном ПММА наряду с Cu и следами алмазоподобного углерода наблюдается формирование Cu_2O .

Обсуждение результатов

Понимание вопроса об ионном синтезе новых фаз предполагает знание нескольких ключевых моментов, таких как зарождение новой фазы, механизм роста, фазовый состав.

Фазовый состав

Образование той или иной фазы при любом синтезе в конечном итоге определяется энергетическими соображениями.

При высоких дозах имплантации 3d-элементов в М-ПММА регистрировали образование трех фаз: металлической фазы, оксида и алмазоподобного углерода, тогда как в ПММА наблюдали наличие лишь двух фаз: металлической и алмазоподобного углерода. Такое различие, по всей видимости, связано с наличием фосфорсодержащих фрагментов в М-ПММА.

Это может быть обусловлено либо активацией кислорода при образовании комплексов с переносом заряда между ионами металлов и молекулой кислорода [10], либо высокой гидрофильностью фосфорильной группы, приводящей к сорбции воды и увеличению вероятности взаимодействия воды с мелкодисперсными частицами металла с образованием оксидов в процессе ИЛС [11].

Образование мелкодисперсного алмазоподобного углерода связано с деструкцией полимера. Отметим, что процесс карбонизации, возникающий вследствие ионного облучения полимеров, характерен для полимерных матриц [12].

Зарождение новой фазы

На начальном этапе происходит зарождение и рост малых кристаллитов. Тип бомбардирующих ионов при этом сказывается незначительно, тогда как структура исходного полимера определяет плотность зарождающихся частиц и, как следствие, их размер.

Зарождение новых фаз при ионно-лучевом синтезе обычно происходит по гетерогенному механизму на центрах нуклеации, которыми в полимерах могут быть как естественные микропустоты, так и радиационно-индуцированные центры. Количество таких центров определяет на начальном этапе плотность зарождающихся нанодисперсных частиц в слое и, в конечном итоге, их размер. Эксперименты по имплантации ионов меди в ПММА и М-ПММА подтверждают это. В М-ПММА центров зарождения больше, а размер частиц, соответственно, меньше, чем в ПММА. При одинаковой дозе ИИ в М-ПММА концентрация наночастиц в 4–5 раз больше и, соответственно, их размер в ~ 2 раза меньше, чем в ПММА. Этот факт объясняется тем, что М-ПММА имеет значительное количество естественных микропустот из-за довольно большого размера атомов фосфора и наличия циклических структур. Несмотря на то, что в М-ПММА содержалось всего 4.5 мол.% фосфорорганического мономера, даже этого количества оказалось достаточным для изменения процесса зарождения новой фазы.

Механизм роста

Предполагается, что рост новой фазы происходит по диффузионно-коагуляционному механизму. При таком механизме роста тонких металлополимерных пленок существенную роль играют как тип внедряемого иона, так и структура исходной матрицы.

Как показывают экспериментальные данные (рис. 1), при ионно-лучевом синтезе в полимерах процесс роста новой фазы определяется не только диффузией внедренных атомов, но и, в случае имплантации ионов

ферромагнитных металлов, миграцией отдельных сформировавшихся частиц. Например, при имплантации ионов железа образующиеся в полимерах крупные частички представляют собой конгломераты мелких частиц, в отличие от ансамбля частиц, полученного при имплантации ионов меди (рис. 3). Этот факт указывает на то, что мелкие частицы могут мигрировать в полимере при имплантации, а в случае ферромагнитных частиц, коагулировать. Сравнение этих экспериментов свидетельствует о том, что наиболее эффективной движущей силой миграции и коагуляции малых частиц является магнитное взаимодействие.

Для малых суперпарамагнитных частиц, частота флуктуаций магнитных моментов которых велика, в среднем направленного движения частиц нет. По мере роста объема частиц время флуктуации увеличивается, и частицы, магнитные моменты которых антипараллельны, успевают объединиться. Движение малых частиц в полимере эффективно стимулируется тем, что под действием имплантации появляется большое количество радиационных дефектов и, кроме того, температура полимера повышается, приводя к его размягчению, что, в конечном итоге, приводит к усилению процесса диффузии. Конгломераты частиц при этом неподвижны. Таким механизмом коагуляции хорошо объясняется как бимодальность в распределении ферромагнитных частиц, так и сверхструктурное упорядочение больших частиц (рис. 1е).

В случае имплантации ионов железа на процесс роста новой фазы существенное влияние оказывает исходная структура полимера. В частности, наличие дополнительных естественных микропустот в М-ПММА по сравнению с ПММА обуславливает ускоренную диффузию синтезированных частиц и их более эффективную коагуляцию. При этом магнитные частицы в М-ПММА растут быстрее, чем немагнитные. Кроме того, структура исходного полимера оказывает влияние на форму и размер ферромагнитных частиц. При одних и тех же условиях в ПММА происходит формирование частиц с формой, более близкой к сферической, тогда как в М-ПММА образуются сильно сплюснутые частицы и крупная лабиринтная структура, вплоть до образования квазисплошного в магнитном отношении слоя.

При использовании в качестве мишени ПЭТФ, обладающего высокой степенью кристалличности, высокой плотностью и радиационной стойкостью, формирование ферромагнитной фазы происходит при дозах в ~ 5 раз меньших, чем в ПММА, и в ~ 2 раза меньших, чем в М-ПММА. По всей видимости, это связано с тем, что в ПЭТФ образуется меньшее число центров зарождения, а рост частиц происходит в основном за счет диффузии внедренных атомов. Следствием этого является то, что при имплантации магнитных атомов в ПЭТФ синтезируемые частички раньше достигают размеров, достаточных для регистрации ферромагнитной фазы.

Выводы

Таким образом, с помощью имплантации ионов переходных металлов с высокими дозами в полимерах можно получать тонкие металлополимерные пленки, в том числе и ферромагнитные с регулируемой структурой. Морфология и фазовый состав таких пленок определяются как структурой исходного полимера, так и типом внедряемых ионов и режимами ионной имплантации: дозой, плотностью ионного тока и температурой. С ростом дозы морфология тонких металлополимерных пленок изменяется подобным образом для всех типов полимеров.

Механизм роста тонких ферромагнитных пленок обусловлен как диффузией имплантированных атомов, так и миграцией синтезированных частиц. Основной причиной миграции для ферромагнитных наночастиц является взаимодействие магнитных моментов однодоменных частиц.

Подбирая соответствующим образом структуру исходного полимера или вводя в полимерную цепь дополнительные функциональные группы, можно достаточно эффективно управлять фазовым составом тонких металлополимерных пленок, размерами отдельных частиц и их распределением по размерам.

Электронно-микроскопические исследования были выполнены при участии сотрудника лаборатории Осина Ю.Н.

Результаты работы полностью опубликованы в статье [7].

Литература

1. Волков А.В., Москвина М.А., Волинский А.Л., Бакеев Н.Ф.: Механизм образования и структура полимерных нанокомпозиций с сульфидами кадмия и меди. *Высокомолекулярные соединения А* **41**, 963–969 (1999)
2. Ogawa S., Hayashi Y., Kobayashi N., Tokizaki T., Nakamura A.: Novel preparation method of metal particles dispersed in polymer films and their third-order optical nonlinearities. *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, L331 (1994)
3. Akimchenko I.P., Krasnopevtsev V.V.: Proc. of the First USA-USSR Seminar on Ion Implantation, pp. 31–54. Albany, USA 1977.
4. Смирнова Л.С. (ред.): Вопросы радиационной технологии полупроводников. Новосибирск: Наука 1980.
5. Петухов В.Ю., Жихарев В.А., Хабибуллина Н.Р., Хайбуллин И.Б.: Магнитные свойства и структура поверхностных слоев, полученных в ПММА имплантацией ионов Fe⁺. *Высококачественные вещества* **3**, 45–48 (1993)
6. Петухов В.Ю., Жихарев В.А., Маковский И.Ф., Осин Ю.Н., Митряйкина М.А., Хайбуллин И.Б., Абдуллин С.Н.: Структура и фазовый состав тонких пленок, полученных имплантацией ионов железа в полиметилметакрилат. *Поверхность. Физика, химия, механика* **4**, 27–33 (1990)
7. Петухов В.Ю., Ибрагимова М.И., Хабибуллина Н.Р., Шульдин С.В., Осин Ю.Н., Жеглов Е.П., Вахонина Т.А., Хайбуллин И.Б.: Влияние структуры полимерной матрицы на ионно-лучевой синтез тонких металлополимерных пленок. *Высокомолекулярные соединения А* **43**, 1973–1983 (2001)
8. Kittel C.: Excitation of spin waves in ferromagnet by a uniform of field. *Phys. Rev.* **71**, 270–272 (1948)
9. Osborn J.A.: Demagnetizing factors of the general ellipsoid. *Phys. Rev.* **67**, 351–357 (1945)
10. Osada Z.: *Polym. Degrad. and Stab.* **20**, 203 (1988)
11. Гладышев Г.П., Ершов Ю.А., Шустова О.А.: Стабилизация термостойких полимеров. Москва: Химия 1979.
12. Попок В.Н.: Модификация поверхностных слоев полимеров ионными пучками. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **6**, 103–118 (1998)

Импульсный синтез дисилицида железа для кремниевой оптоэлектроники

Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов

Лаборатория радиационной физики

Синтез сплошных и мелкодисперсных слоев полупроводникового дисилицида железа (β -FeSi₂) для целей кремниевой оптоэлектроники проведен с использованием имплантации ионов Fe⁺ в Si с последующей наносекундной обработкой мощным ионным пучком. Показано, что импульсная обработка приводит к образованию смеси двух фаз: FeSi и β -FeSi₂ с сильно напряженными кристаллическими решетками. Последующий кратковременный термический отжиг приводит к полной трансформации фазы FeSi в фазу β -FeSi₂ с образованием текстурованного слоя. Синтезированный дисилицид имеет прямозонную структуру с величиной оптической щели $E_g \sim 0.83$ эВ. Показано, что сигнал фотолуминесценции в области 1.5 мкм, наблюдаемый вплоть до температуры 210 К, обусловлен прямыми межзонными переходами в синтезированных преципитатах β -FeSi₂.

Введение

Одним из главных направлений оптоэлектроники является создание кремниевых тонкопленочных структур, излучающих в области 1.5 мкм – “окне” прозрачности кремния и кварцевых волокон. Решение данной проблемы позволит интегрировать на одном кремниевом кристалле оптоэлектронные элементы с современными микроэлектронными приборами, что в свою очередь, открывает пути к созданию оптических компьютеров и к повышению емкости оптоволоконных линий связи.

Одним из основных подходов к решению проблемы является создание твердых растворов редкоземельных элементов, в частности эрбия, в кремнии. При этом слои Si:Er излучают на длине волны $\lambda = 1.54$ мкм на переходах $^4I_{13/2}$ - $^4I_{15/2}$ во внутренней 4f оболочке иона Er³⁺. Однако низкая растворимость редкоземельных элементов в Si и их тенденция к образованию оптически неактивных кластеров значительно ограничивают интенсивность внутрицентральной люминесценции при комнатной температуре.

Вторым, интенсивно развиваемым в последнее время подходом является синтез полупроводниковых соединений и их кластеров в Si. Одним из весьма ограниченного ряда подходящих соединений с кремнием является полупроводниковый дисилицид железа β -FeSi₂, имеющий прямозонную структуру с шириной оптической щели около 0.85 эВ, соответствующей длине волны близкой к 1.5 мкм. К настоящему времени продемонстрирована низкотемпературная (~ 200 К) фотолуминесценция (ФЛ) слоев β -FeSi₂ и уже созданы первые светодиоды с активной областью с преципитатами β -FeSi₂, работающие в режиме прямого смещения при 80 К [1] и при 300 К [2]. Основными методами создания диодных структур являются ионная имплантация и молекулярно-лучевая эпитаксия с использованием высокотемпературных ($\sim 900^\circ\text{C}$) и продол-

жительных (~ 20 ч) термообработок. Однако, такие термические воздействия препятствуют интеграции микро- и оптоэлектронных приборов, поскольку приводят к значительной диффузии атомов железа вглубь базового Si ($D \sim 5 \cdot 10^{-6}$ см²/с при $T \sim 1000^\circ\text{C}$), что ведет к деградации основных параметров кремниевых приборов [3].

Преодолеть указанные ограничения можно с использованием импульсных лучевых (лазерных, ионных, электронных) обработок, которые воздействуют только на приповерхностные слои материала (~ 1 мкм) в течение короткого интервала времени (< 1 мкс), что исключает нежелательную диффузию примеси в базовый материал. Характерными особенностями импульсной ионной обработки (ИИО) по сравнению с импульсной лазерной являются равномерное распределение потерь энергии излучения в приповерхностной области, приводящее к меньшему перегреву и нарушению поверхности, а также независимость от оптических свойств облучаемого материала [4].

На примере ИИО кремния, имплантированного ионами Eu⁺, нами показана возможность импульсного формирования твердых растворов редкоземельных элементов в кремнии [5], однако одновременно было установлено, что основным препятствием к повышению уровня люминесценции является сильное сегрегационное вытеснение редкоземельных атомов к поверхности кристалла.

Что касается синтеза соединений железа с кремнием, то сначала было показано [6], что в результате импульсного воздействия образуются текстурированные сильно напряженные слои дисилицида железа с прямой зонной структурой. В дальнейшем совместно с сотрудниками Физико-технического института РАН им. А. Ф. Иоффе исследованы фотолуминесцентные свойства синтезированных сплошных и мелкодисперсных пленок [7–9]. В данной работе приведены основ-

ные результаты структурных и оптических исследований синтезированных слоев дисилицида железа.

Эксперимент

Пластины монокристаллического Cz-Si p-типа с ориентацией (100) имплантировались ионами Fe^+ при 300 К с энергией 40 кэВ (плотность ионного тока 5 мА/см^2) и дозой $1 \cdot 10^{16} - 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$. После имплантации образцы подвергались ИИО мощным наносекундным пучком ионов углерода ($E = 300 \text{ кэВ}$, $t = 50 \text{ нс}$, $j \sim 50 \text{ А/см}^2$, 2–3 импульса). Общая доза ионов, вводимых в процессе ИИО, не превышала $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, однако данное воздействие приводило к интенсивному нагреву приповерхностной области материала вплоть до плавления имплантированного слоя с его последующей рекристаллизацией. Структура и фазовый состав синтезированных слоев исследовались методом скользящей рентгеновской дифракции (угол падения пучка $\varphi \sim 1^\circ$), используя $\text{Fe}_{K\alpha}$ излучение ($\lambda = 1.9373 \text{ \AA}$). Азимутальная зависимость наиболее интенсивного дифракционного пика записывалась путем фиксации детектора на позиции данного рефлекса с последующим проведением азимутального сканирования в диапазоне углов $\chi = 0 - 360^\circ$. ИК спектроскопия в режиме отражения и пропускания в области 1000–2000 нм применялась для определения ширины запрещенной зоны сформированного силицида. ФЛ синтезированных пленок $\beta\text{-FeSi}_2$ исследовалась в ближней ИК области спектра ($\lambda = 1.0 - 1.7 \text{ мкм}$) в диапазоне температур 77–250 К. Возбуждение сигнала ФЛ проводилось с использованием аргонового лазера ($\lambda = 514.5 \text{ нм}$, $P = 50 \text{ мВт}$), а регистрация сигнала осуществлялась охлаждаемым до 77 К германиевым фотодиодом.

Результаты и обсуждение

Непосредственно после ионной имплантации в спектре рентгеновской дифракции (не показан) отсутствуют какие-либо рефлексы, что свидетельствует о полной аморфизации имплантированного слоя. На рис. 1 приведены спектры рентгеновской дифракции образцов имплантированных двумя дозами ионов Fe^+ ($1 \cdot 10^{16}$ и $1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$) после ИИО. Из рис. 1а видно, что непосредственно после ИИО образуется смесь фаз: металлической FeSi и полупроводниковой $\beta\text{-FeSi}_2$. Наиболее интенсивный пик на спектре обусловлен брэгговским отражением от плоскостей (202)/(220) $\beta\text{-FeSi}_2$. Положение данного пика ($2\theta = 36.2^\circ$) существенно отличается от табличного значения ($2\theta = 36.9^\circ$), что объясняется напряженным состоянием кристаллической решетки дисилицида, которое вызвано быстрой жидкофазной кристаллизацией имплантированного слоя. Для снятия напряжения решетки, а также для полной трансформации остаточного количества

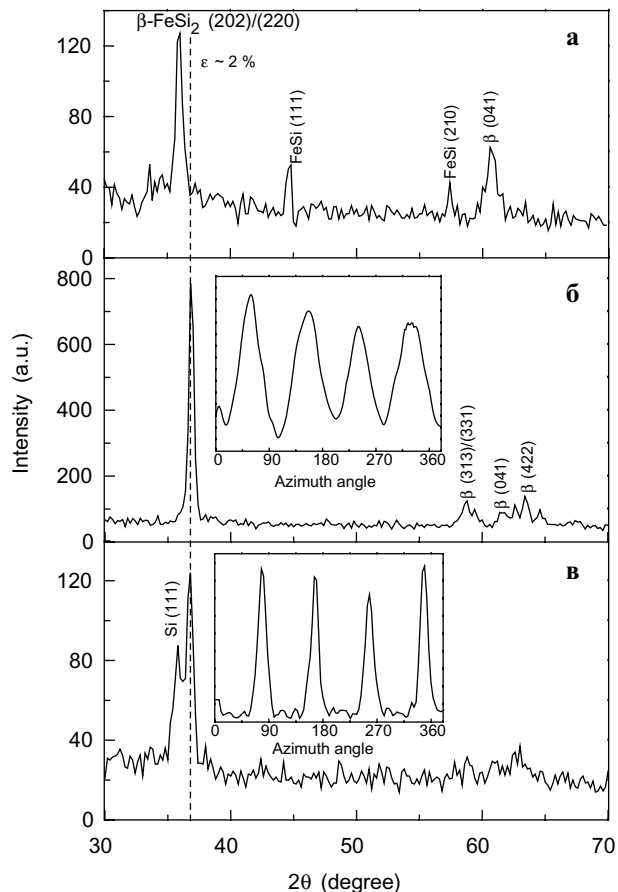


Рис. 1. Спектры скользящей рентгеновской дифракции Si, имплантированного ионами Fe^+ с дозой $1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ (а, б) и дозой $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ (в): а после ИИО, б и в после ИИО и дополнительного ТО. На вставках показаны азимутальные зависимости дифракционного пика $\beta (202)/(220)$ [6, 8].

фазы FeSi в фазу $\beta\text{-FeSi}_2$ был проведен кратковременный термический отжиг (ТО) при 800°C в течение 20 мин в азотной атмосфере. Спектр рентгеновской дифракции после ТО показан на рис. 1б. Видно существенное увеличение интенсивности пика (202)/(220) и его смещение к величине $2\theta = 36.9^\circ$, что свидетельствует о снятии напряжений в решетке дисилицида. Кроме этого, видно исчезновение рефлексов фазы FeSi. Соотношение интенсивностей пиков $I_{220} : I_{422} = 8.5$, в то время как в случайно ориентированных порошках $\beta\text{-FeSi}_2$ это соотношение равно 1.25. Данный факт свидетельствует о наличии в слое $\beta\text{-FeSi}_2$ преимущественной ориентации зерен (текстуры). На вставке рис. 1б показана азимутальная зависимость пика (220), характеризующаяся четырьмя интенсивными максимумами, обусловленными ориентированным ростом слоя $\beta\text{-FeSi}_2$ на Si (100). Необходимо заметить, что в случае только ТО имплантированного Si наблюдалась очень слабая текстура, а интенсивность основного дифракционного пика была почти в 3 раза меньше (не показан). На рис. 1в показан спектр рентгеновской дифракции Si имплантированного с меньшей дозой

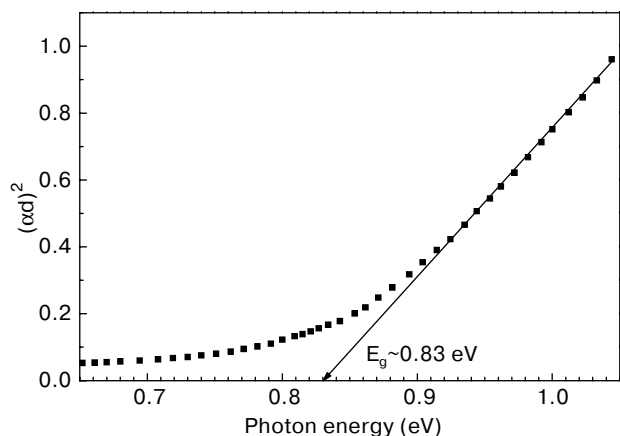


Рис. 2. Зависимость квадрата экспоненты поглощения от энергии фотона (точки) для Si, имплантированного ионами Fe⁺ с дозой $1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ после ИИО и дополнительного ТО. Сплошная линия – экстраполяция экспериментальных данных для нахождения ширины запрещенной зоны силицида.

($1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) после ИИО и ТО. Видно присутствие в спектре рефлексов фазы $\beta\text{-FeSi}_2$ (без включений металлической фазы FeSi), а также рефлекса от Si матрицы (111), который свидетельствует о том, что приповерхностные участки Si матрицы имеют поликристаллическую структуру. Вставка на рис. 1в указывает на предпочтительную ориентацию преципитатов $\beta\text{-FeSi}_2$ в направлении $\langle 110 \rangle$. Расчеты среднего размера преципитатов $\beta\text{-FeSi}_2$ дают величину $d \sim 40 \text{ нм}$.

Для определения типа и ширины запрещенной зоны сплошных пленок и преципитатов синтезированного дисилицида железа проводились измерения спектров пропускания (T) и отражения (R) в спектральном диапазоне 1000–2000 нм, соответствующем прозрачности кремниевой подложки. На рис. 2 показана зависимость квадрата экспоненты поглощения $(\alpha d)^2$ (d – толщина слоя силицида), определяемой как $\alpha d = \ln[(1 - R)/T]$, от энергии фотонов для синтезированной сплошной пленки дисилицида. Участок спектра 0.8–1.0 эВ соответствует зонной щели $\beta\text{-FeSi}_2$ и аппроксимируется выражением для прямых межзонных переходов:

$$\alpha = C(E - E_g^d)^{1/2}, \quad (1)$$

где α – коэффициент поглощения, E – энергии фотона, C – константа, связанная с особенностями зонной структуры, E_g^d – величина прямой зонной щели. Полученные результаты свидетельствуют о прямозонной структуре полупроводника и дают значение ширины зонной щели $\sim 0.83 \text{ эВ}$.

На рис. 3 показан спектр ФЛ, записанный при 77 К в диапазоне 0.7–1.2 эВ для пленки $\beta\text{-FeSi}_2$, синтезированной имплантацией Si ионами Fe⁺ с дозой $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Спектр ФЛ образца с дозой $1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$, соответствующей образованию сплошного слоя, был сравним с фоном при 77 К. Его низкий уровень

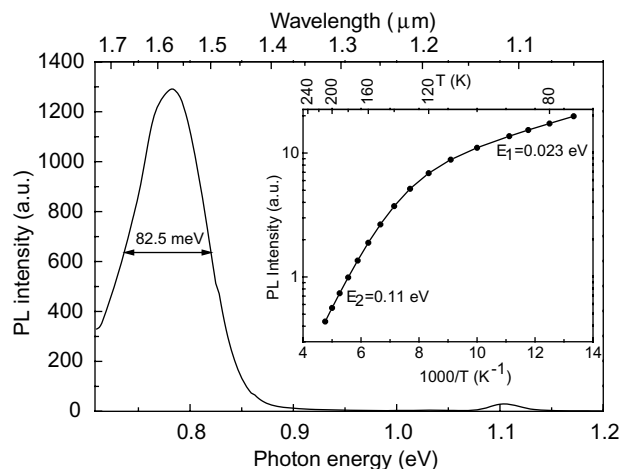


Рис. 3. Спектр ФЛ Si, имплантированного ионами Fe⁺ с дозой $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ после ИИО и дополнительного ТО, записанный при 77 К и мощности возбуждения 50 мВт. На вставке показана температурная зависимость интенсивности сигнала ФЛ с двумя энергиями активации (E_1 , E_2), найденными аппроксимацией экспериментальных данных (точки) выражением (2) [7].

объясняется повышенной степенью дефектности синтезированного сплошного слоя $\beta\text{-FeSi}_2$, которая определяет преимущественно безызлучательный механизм рекомбинации электронно-дырочных пар.

В спектре ФЛ видны два максимума при ~ 0.78 и $\sim 1.11 \text{ эВ}$. Второй максимум ($E \sim 1.11 \text{ эВ}$) связан с непрямыми переходами в запрещенной зоне Si. Наиболее интенсивная линия в спектре с максимумом при 0.78 эВ (1.58 мкм) обусловлена прямыми межзонными переходами в пределах зонной щели $\beta\text{-FeSi}_2$. Необходимо заметить, что в данном спектре отсутствуют пики ФЛ от дислокационных линий D2–D4, которые наблюдались в низкотемпературных спектрах ФЛ при обычном ионном синтезе преципитатов $\beta\text{-FeSi}_2$ [10, 11]. Что касается наиболее интенсивной дислокационной линии D1, положение которой (0.81 эВ) близко к положению наблюдаемого максимума ФЛ (0.78 эВ), то ее вклад можно определить из температурной зависимости спектра ФЛ, которая хорошо аппроксимируется выражением, содержащим две энергии активации (E_1 и E_2):

$$I_{\text{PL}}(T) = \frac{I(0)}{1 + A \exp(-E_1/kT) + B \exp(-E_2/kT)}, \quad (2)$$

где A и B – парные коэффициенты, $I(0)$ – интенсивность ФЛ при температуре, близкой к абсолютному нулю. Найденные значения энергий активации (23 и 110 мэВ) значительно отличаются от известных значений для дислокационной линии D1 ($\sim 10 \text{ мэВ}$). Таким образом, сигнал ФЛ в области 1.5 мкм не связан с введением дислокаций в процессе имплантации и импульсной обработки и обусловлен прямыми межзонными переходами в преципитатах $\beta\text{-FeSi}_2$.

Заключение

Впервые синтез сплошных слоев и мелкодисперсных пленок β -FeSi₂ осуществлен путем имплантации ионов Fe⁺ в кремний с последующей наносекундной обработкой мощным ионным пучком. Показано, что импульсная обработка приводит к образованию смеси двух фаз: FeSi и β -FeSi₂ с сильно напряженными кристаллическими решетками. Последующий кратковременный термический отжиг приводит к полной трансформации фазы FeSi в фазу β -FeSi₂ с образованием текстурованного слоя. Синтезированные слои дисилицида имеют прямозонную структуру с величиной оптической щели $E_g \sim 0.83$ эВ. Показано, что сигнал фотолюминесценции при $\lambda \sim 1.58$ мкм, наблюдаемый вплоть до температуры 210 К, обусловлен прямыми межзонными переходами в синтезированных преципитатах β -FeSi₂.

Литература

1. Homewood K.P., Reeson K.J., Gwilliam R.M., Kewell A.K., Lourenco M.A., Shao G., Chen Y.L., Sharpe J.S., McKinty C.N., Butler T.: Ion beam synthesized silicides: growth, characterization and devices. *Thin Solid Films* **381**, 188–193 (2001)
2. Suemasu T., Negishi Y., Takakura K., Hasegawa F.: Room temperature 1.6 μ m electroluminescence from a Si-based light emitting

- diode with β -FeSi₂ active region. *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, L1013–L1015 (2000)
3. Kolbesen B.O., Cerva H.: Defects due to metal silicide precipitation in microelectronic device manufacturing: the unlovely face of transition metal silicides. *Phys. Stat. Sol. (b)* **222**, 303–317 (2000)
4. Bayazitov R.M., Antonova L.Kh., Khaibullin I.B., Remnev G.E.: Pulsed ion beam formation of highly doped GaAs layers. *Nucl. Instr. Meth. B* **139**, 418–421 (1998)
5. Stepanov A.L., Bayazitov R.M., Hole D.E., Khaibullin I.B.: Annealing of europium-implanted silicon by nanosecond ion-beam pulses. *Philos. Mag. Lett.* **81**, 29–38 (2001)
6. Bayazitov R.M., Batalov R.I.: X-ray and optical characterization of β -FeSi₂ layers formed by pulsed ion-beam treatment. *J. Phys.: Condens. Matter.* **13**, L113–L118 (2001)
7. Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Рентгеновский и люминесцентный анализ мелкодисперсных пленок β -FeSi₂ сформированных в Si импульсной ионной обработкой. *ФТТ* **43**, 1569–1572 (2001)
8. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х., Weiser G., Kuehne H.: Импульсный синтез слоев β -FeSi₂ на кремнии, имплантированном ионами Fe⁺. *ФТП* **35**, 1320–1325 (2001)
9. Batalov R.I., Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh.: Pulsed ion-beam synthesis of β -FeSi₂ precipitate layers in Si(100). *Nanotechnology* **12**, 409–412 (2001)
10. Grimaldi M.G., Coffa S., Spinella C., Marabelli F., Galli M., Miglio L., Meregalli V.: Correlation between structural and optical properties of ion beam synthesized β -FeSi₂ precipitates in Si. *J. Lumin.* **80**, 467–471 (1999)
11. Oyoshi K., Lenssen D., Carius R., Mantl S.: Study of structure and optical properties of β -FeSi₂ precipitates formed by ion-implantation of Fe⁺ in Si(100) and effects of co-implantation of Fe⁺ and Si⁺ in amorphous SiO₂. *Thin Solid Films* **381**, 194–201 (2001)

Нелинейно-оптические свойства металлических наночастиц, синтезированных в стекле ионной имплантацией

А. Л. Степанов

Лаборатория радиационной физики

Исследуются кварцевые стекла, содержащие медные наночастицы, синтезированные ионной имплантацией при облучении ионами меди при низкой энергии, высокой плотности ионного тока и строгом контроле температуры подложки. Данные о нелинейно-оптических характеристиках композиционных слоев получены методом вырожденного четырехфотонного смешения частот. Для данных композиционных образцов зарегистрировано значение нелинейной кубической восприимчивости $\chi^{(3)} \approx 10^{-7}$ ед. СГСЭ, измеренное вблизи длины волны 590 нм плазменного резонанса медных наночастиц, которое является одним из самых высоких известных из литературы для подобных материалов. Кроме того, установлено, что время нелинейно-оптического отклика оказывается короче 2 пс. Обсуждение полученных результатов основывается на особенности выбранных условий ионной имплантации.

Введение

Нелинейное оптическое поведение малых металлических частиц, внедренных в диэлектрические материалы, представляет как научный, так и практический интерес. Такие композиционные материалы характеризуются высокими показателями нелинейной кубической восприимчивости $\chi^{(3)}$ для пикосекундных и более коротких времен, причем значения $\chi^{(3)}$ определяются как типом металла и диэлектрика, так и структурными параметрами наночастиц, т.е. их размерами, распределением по размерам, формой и фактором заполнения диэлектрика металлом.

Впервые оптические нелинейности металлических коллоидных частиц Au и Ag в водных растворах наблюдались Рикардом с коллегами в 1985 году, и регистрируемые значения $\chi^{(3)}$ составляли $1.5 \cdot 10^{-8}$ ед. СГСЭ для Au частиц и $2.4 \cdot 10^{-9}$ ед. СГСЭ для Ag частиц [1]. Эти величины примерно на два порядка выше, чем у объемных металлических материалов. В случае меди $\chi^{(3)}$ заметно превышает значения, соответствующие Au и Ag [2], что обуславливает практический интерес к исследованию Cu наночастиц.

Несмотря на то, что для композитных материалов с металлическими наночастицами теоретические оценки предсказывают величины $\chi^{(3)}$ порядка 10^{-6} ед. СГСЭ, реально, на практике, из-за низкой концентрации частиц величина $\chi^{(3)}$ составляет не более 10^{-8} ед. СГСЭ. Возникает очевидная задача создания композиционных материалов на основе диэлектрических слоев с высоким фактором заполнения металлическими наночастицами.

Существуют различные способы синтеза металлических наночастиц, одним из которых является ионная имплантация, характеризующаяся возможностью внедрения примеси в субстрат сверх равновесного значения и получения высокой концентрации нано-

частиц [3–5]. К тому же эта техника успешно используется для создания оптических диэлектрических волноводов [5].

Ранее [2] при имплантации ионов Cu^+ в SiO_2 стекла были получены композиционные слои с $\chi^{(3)} \approx 10^{-8} \div 10^{-9}$ ед. СГСЭ. Невысокие значения $\chi^{(3)}$ объяснялись широким разбросом по размерам синтезированных наночастиц Cu. В настоящей работе был использован новый подход [4] к условиям Cu-имплантации в кварцевое стекло, заключающийся в строгом контроле температуры обучаемой матрицы, с целью получения более высокой концентрации частиц меди при их меньшем среднем размере и разбросе по размерам.

Методика эксперимента

Для получения композиционного материала в качестве подложки было использовано стекло SiO_2 (Heraeus, Германия), характеризующиеся оптической прозрачностью $\sim 90\%$ в спектральном диапазоне $320 \div 900$ нм. Имплантация проводилась ионами Cu^+ с энергией 50 кэВ и дозой $8 \cdot 10^{16}$ ион/см² при плотности тока в ионном пучке 10 мкА/см² в вакууме 10^{-5} Торр на имплантаторе Whickham. Облучаемые стекла крепились теплопроводящей краской к массивной металлической пластине, температура которой контролировалась и стабилизировалась при помощи системы, состоящей из резистивного нагревателя и газового охладителя [4]. Температура этой пластины при имплантации составляла 20°C.

Полученные композиционные образцы анализировались при мало-угловом рентгеновском рассеянии под скользящим лучем (GISAXS) на рентгеновском рефлектометре в режиме угловой дисперсионной моды [6]. Измерение оптических спектров отражения и про-

пускания проводилось на однолучевой оптоволоконной установке Monolith в спектральной области от 390 до 800 нм. Нелинейно-оптические характеристики образцов ($\chi^{(3)}$) определялись методом вырожденного четырехфотонного смешения частот (degenerate four-wave mixing, DFWM) на длине волны второй гармоники 585 нм импульсного (13 пс) лазера на красителях Rhodamine 6G. Частота импульсов составляла 400 кГц при выделяемой энергии в импульсе ~ 10 нДж, что предотвращало разогрев стекла. DFWM эксперименты проводилось по стандартной схеме сравнением оптического сигнала от образца с эталоном CS_2 , характеризующегося $\chi^{(3)} = 2 \cdot 10^{-12}$ ед. СГСЭ [7]. Также была измерена эволюция оптического DFWM сигнала в субпикосекундном диапазоне, для чего 13 пс импульсы были компрессированы до 450 фс по ранее описанной методике [8].

Результаты и обсуждение

Распределение имплантируемой меди по глубине в объеме стекла моделировалось при помощи DYNA алгоритма [9]. Установлено, что ионная имплантация при низких энергиях приводит к статистически-неоднородному распределению внедряемых ионов металла по глубине в стекле и отличается от типичного симметричного гауссового профиля. Ранее [10] методом резерфордского рассеяния показано, что при распределении имплантируемых ионов металла в силикатных стеклах максимум концентрации примеси располагается вблизи облучаемой поверхности при дальнейшем монотонном уменьшении доли металла в глубь образца. Ширина профиля распределения ионов Cu^+ на половине его высоты составляет ~ 40 нм. Данное значение согласуется с экспериментально определяемой GISAXS анализом величиной условной толщины имплантируемого слоя 41.0 ± 0.3 нм и может служить для оценки длины оптического пути нелинейной среды.

На рис. 1 приведена типичная картина измеренного GISAXS сигнала композиционного образца, показывающая симметричную форму распределения интенсивности рассеяния, что соответствует отклику

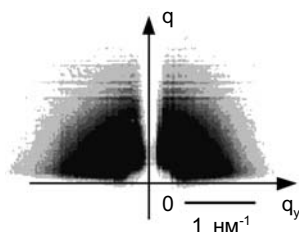


Рис. 1. GISAXS рассеяние для имплантированного ионами Cu^+ SiO_2 . Серая шкала показывает распределение интенсивности рассеяния относительно $q = 4\pi \sin \theta / \lambda$, где θ – угол рассеяния, а λ – рентгеновская длина волны (0.154 нм).

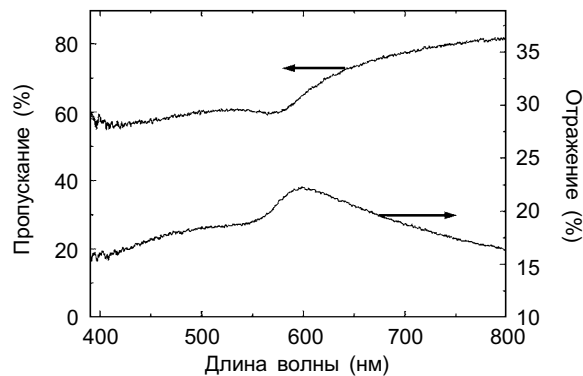


Рис. 2. Спектры оптического пропускания и отражения имплантированного ионами Cu^+ SiO_2 .

от сферических наночастиц Cu . Интегрирование интенсивности $I(\mathbf{q})$, где $\mathbf{q}$ – вектор рассеяния, по всему циркулярному сектору [6] позволяет оценить средний размер наночастиц, равный 4.0 ± 0.5 нм, и указывает на узкую функцию их распределения по размерам.

Экспериментальные оптические спектры отражения и пропускания образцов представлены на рис. 2. Наблюдаемые широкие селективные полосы вблизи 590 нм вызваны формированием наночастиц Cu и обусловлены явлением поверхностного плазменного резонанса [10, 11]. Ранее было показано [11], что металлические частицы начинают проявлять оптический плазменный резонанс, когда их радиус превышает ~ 2 нм, что согласуется с размерами наночастиц, оцениваемыми по GISAXS методике. Таким образом, в наших экспериментах по ионному синтезу реализованы условия, приводящие к образованию высокой концентрации Cu частиц с наименьшим возможным, но полезным размером. При измерении нелинейно-оптических характеристик на образцах с данным типом Cu наночастиц была достигнута величина $\chi^{(3)} \approx 10^{-7}$ ед. СГСЭ, что как минимум на порядок превышает ранее известные значения $\chi^{(3)}$ для SiO_2 стекол, имплантированным ионами Cu^+ [2, 12, 13]. Диаграмма эволюции во времени DFWM сигнала показана на рис. 3. Как следует из рисунка, сигнал резко нарастает, начиная с момента падения фронта импульса возбуждения, а затухает намного медленнее, приводя к ассиметричной форме кривой с шириной ~ 1.4 пс [14].

Отличия нелинейно-оптических свойств силикатных стекол с Cu наночастицами, синтезируемыми в настоящей работе, от подобных композиционных материалов, очевидно, следует искать в различных условиях синтеза наночастиц Cu . Во всех предыдущих исследованиях по имплантации, несмотря на прикладываемые энергии 60 кэВ [13] или 160 кэВ [2, 12], синтезировались материалы, характеризующиеся широким разбросом Cu наночастиц по размерам, к тому же вариации среднего размера составляли от 5 до 25 нм с большой долей крупных частиц. Известно, что

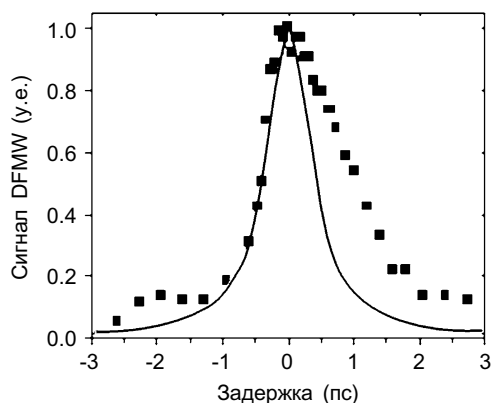


Рис. 3. Эволюция во времени DFMW сигнала, измеренного для импульсов лазера длительностью 450 фс (■). Сплошная линия соответствует расчетному распределению Лоренца [14].

разброс наночастиц по размерам приводит к уширению спектра линейного оптического поглощения плазменного резонанса, сопровождающегося снижением интенсивности в максимуме полосы поглощения по сравнению со случаем однородных по размеру частиц [11]. Следовательно, уменьшается и величина $\chi^{(3)}$ на длине волны максимума оптического резонанса. Однако, для полученных нами образцов величина оптической плотности на длине волны 585 нм составляет ≈ 0.1 , что заметно превышает значение, характерное для SiO_2 с наночастицами меди размером 5 нм [2]. Это обусловлено малым разбросом наночастиц по размерам, что, в свою очередь, позволяет использовать высокую дозу имплантации и добиться более высокого фактора заполнения стекла наночастицами, чем в предыдущих работах. Следует отметить важность контроля температуры стекла, поскольку неоднородный разогрев образца во время имплантации приводит к большому разбросу размеров наночастиц [4]. Применяемая в настоящей работе техника контроля и поддержания температуры стекла при 20°C позволила практически полностью избежать влияния этого фактора.

Поскольку величина $\chi^{(3)}$ напрямую связана с фактором заполнения [11], очевидно, что увеличение параметра заполнения приведет к повышению $\chi^{(3)}$, что и наблюдается в наших экспериментах.

Заключение

Установлено, что использование высокодозовой имплантации ионов Cu^+ в SiO_2 при низких энергиях, высоком ионном токе и строгом контроле температуры стекла во время облучения позволяет синтезировать композиционные слои с наночастицами меди, характеризующиеся высокими факторами заполнения металлом при узкой функции распределения данных

частиц по размерам при сохранении малого размера (4 нм). Для сформированных композиционных материалов зарегистрировано наиболее высокое, из известных на сегодняшний день в литературе, значение $\chi^{(3)} \approx 10^{-7}$ ед. СГСЕ, измеренное вблизи длины волны 590 нм плазменного резонанса Cu наночастиц. Достигнутое значение $\chi^{(3)}$ является максимально приближенным к теоретически предсказываемым предельным величинам.

Хотелось бы поблагодарить за финансовую поддержку научный фонд им. Александра Гумбольдта (Германия) и РФФИ (99-02-17767 и 00-15-96615), а также поблагодарить за помощь в исследовании и обсуждении результатов научные коллективы, возглавляемые проф. П. Д. Таунсендом (Университет Су-секса, Англия), проф. К. Н. Афонсо (Институт оптики, Мадрид) и проф. А. Наудомом (Университет Пой-терса, Франция).

Литература

1. Ricard D., Roussignol Ph., Flytzanis Chr.: Surface-mediated enhancement of optical phase conjugation in metal colloids. *Opt. Lett.* **10**, 511–513 (1985)
2. Haglund Jr. R.F., Yang L., Magruder R.H. III, Wittig J.E., Becker K., Zuhre R.A.: Picosecond nonlinear optical response of a Cu:silica nanocluster composite. *Opt. Lett.* **18**, 373–375 (1993)
3. Arnold G.W.: Near-surface nucleation and crystallization of an ion-implanted lithia-alumina-silica glass. *J. Appl. Phys.* **46**, 4466–4473 (1975)
4. Stepanov A.L., Hole D.E., Townsend P.D.: Formation of silver nanoparticles in soda-lime silicate glass by ion implantation near room temperature. *J. Non-Cryst. Solids* **260**, 65–74 (1999)
5. Townsend P.D., Chandler P.J., Zhang L.: Optical effects of ion implantation. Cambridge: Cambridge University 1994.
6. Dureuil V., Ricolleau C., Gandais M., Grigis C., Lacharme J.P., Nadon A.: Growth and morphology of cobalt nanoparticles on alumina. *J. Cryst. Grow.* **233**, 737–748 (2001)
7. Шен И.П.: Принципы нелинейной оптики. Москва: Наука 1989.
8. Nikolaus B., Grischowsky D.: 90-fs tunable optical pulses obtained by two-stage pulse compression. *Appl. Phys. Lett.* **43**, 228–230 (1983)
9. Stepanov A.L., Zhikharev V.A., Hole D.E., Townsend P.D., Khaibullin I.B.: Depth distribution of Cu, Ag and Au ions implanted at low energy into insulators. *Nucl. Instr. Meth. B* **166**, 26–30 (2000)
10. Степанов А.Л.: Оптическое отражение от диэлектрических слоев, содержащих металлические наночастицы, сформированные ионной имплантацией. *Опт. и спектр.* **89**, 444–449 (2000)
11. Kreibitz U., Vollmer M.: Optical properties of metal clusters. Berlin: Springer 1995.
12. Magruder R.H. III, Haglund Jr. R.F., Yang L., Wittig J.E., Zuhre R.A.: Physical and optical properties of Cu nanoclusters fabricated by ion implantation in fused silica. *J. Appl. Phys.* **76**, 708–715 (1994)
13. Takeda Y., Gritsyna V.T., Umeda N., Lee C.G., Kishimoto M.: Linear and nonlinear optical properties of Cu nanoparticles fabricated by high-current Cu-implantation in silica glass. *Nucl. Instr. Meth. B* **148**, 1029–1033 (1999)
14. Olivares J., Requejo-Isidro J., del Coso R., de Nalda R., Solis J., Afonso C.N., Stepanov A.L., Hole D., Townsend P.D., Nadon A.: Large enhancement of the third-order optical susceptibility in Cu-silica composites produced by low-energy high-current ion implantation. *J. Appl. Phys.* **90**, 1064–1066 (2001)

ФМР исследования композитных пленок, формируемых имплантацией ионов железа в вязкую силаксановую подложку

Р. И. Хайбуллин, Б. З. Рамеев

Лаборатория радиационной физики

Представлены спектры магнитного резонанса новых композитных материалов, полученных путем высокодозной имплантации ионов железа в вязкую силаксановую подложку, находящуюся на различных стадиях процесса отверждения. Анализ регистрируемых спектров указывает на формирование магнитной гранулярной пленки железа в имплантированном слое полимера. Акцент в работе сделан на исследование влияния вязкости облучаемой силаксановой мишени на параметры наблюдаемых сигналов ФМР и намагниченность формируемой композитной системы.

Введение

Композитные материалы на основе полимеров, содержащих дисперсию малых магнитных частиц, широко используются в настоящее время в качестве магнитных носителей записи и хранения информации, магнитных сенсоров и оптических фильтров. Область их практического применения постоянно расширяется, что обуславливает постоянный научный интерес к разработке новых методик синтеза магнитных частиц в полимерной матрице и изучению их физических свойств.

В 1982 году Ковач и Винсетт [1] публикуют первые результаты по синтезу металлических наночастиц, заглубленных в полимерной основе, методом вакуумного термического осаждения атомов металла на поверхность размягченного полимера. Широкое распространение получают методы плазменной полимеризации органического материала с легированием металлической примесью, совместного магнетронного распыления магнитного материала с полимером и другие.

В 1984 году Кун и др. [2] впервые осуществляют синтез магнитной гранулярной пленки железа в различных полимерных и углеродных матрицах путем высокодозной имплантации ионов железа. Легкий и прецизионный контроль над количеством внедряемой примеси и возможность формирования скрытой гранулярной пленки практически любого металла в органической матрице определили перспективность методики ионного синтеза для формирования новых металл/полимерных композитных систем.

Однако существует ряд проблем, ограничивающих широкое внедрение ионно-лучевой технологии в практику получения наноструктурированных композитных материалов. В частности, к ним относится неоднородное распределение синтезируемых металлических включений по размерам, низкая радиационная

стойкость полимеров по отношению к ионному пучку и т.п.

Недавно мы предложили принципиально новый подход к проблеме ионного синтеза гранулярных пленок металла в полимерах [3]. Суть подхода заключается в формировании металлических наночастиц путем имплантации ионов различных металлов в органическую подложку, находящуюся в момент облучения в вязко-текучем состоянии. После имплантации, в результате процесса полимеризации облученная мишень переходит в твердое (стеклообразное или вязкоупругое) состояние и ионно-синтезированные наночастицы металла фиксируются в объеме полимера.

Первые результаты наших исследований процесса ионного синтеза металлической нанофазы кобальта, железа и серебра в вязкой эпоксидной [3, 4] или силаксановой [5, 6] матрице показали, что реализация предложенного подхода, при определенных режимах и условиях эксперимента, позволяет обеспечить однородность по размерам металлических частиц, синтезировать гранулярные пленки металлов с различными размерными параметрами, морфологией и геометрией, а также контролировать, в некоторой степени, радиационное повреждение полимерной основы. С научной стороны предложенный подход позволяет существенно расширить возможности исследования процесса зарождения и роста металлической фазы в объеме полимера путем варьирования вязкости облучаемой органической мишени.

В настоящей работе кратко описана методика ионного синтеза гранулярных пленок железа в вязкой силаксановой композиции, находящейся на различных стадиях процесса полимеризации (отверждения). Представлены результаты магнитно-резонансных измерений, выполненных в 2001 г. с целью исследования влияния величины вязкости облучаемой силаксановой мишени на магнитные характеристики формируемой композитной системы.

Методика эксперимента и методы исследования

Композиция промышленной радиационно-стойкой фенил-метил силаксановой смолы марки СКТН-Ф с отверждающим агентом, дилауратом олова, была использована в качестве вязкой подложки, подвергнутой ионному облучению. Величина динамической вязкости (η), измерения которой проводилось на вискозиметре Реотест-2 при комнатной температуре, являлась параметром, характеризующим кинетику полимеризации (отверждения) силаксановой композиции во времени. Исходя из экспериментальных вязко-кинетических характеристик различных силаксановых композиций (рис. 1), в качестве модельной в наших экспериментах была выбрана композиция с отношением объемных концентраций силаксановой смолы и отвердителя 98,5% к 1,5%, соответственно. Выбор был обусловлен большой длительностью начальной стадии полимеризации композиции (~ 70 мин) с почти неизменной вязкостью 7–15 Па·с, что позволило провести предварительную обработку полимерных подложек и выйти на заданные режимы ионного облучения.

Для проведения экспериментов по ионному облучению, на первом этапе были получены вязкие силаксановые пленки (~ 150 мкм) на стеклянной подложке с использованием центрифуги MPW-310. Затем была получена серия образцов для последующих магнитных измерений путем имплантации ионов Fe^+ с энергией 40 кэВ в вязкие силаксановые пленки, находящиеся на различных стадиях процесса отверждения, при постоянных значениях дозы облучения $1,25 \cdot 10^{17}$ ион/см² и плотности ионного тока 4 мкА/см². Имплантация проводилась на ионно-лучевом ускорителе ИЛУ-3 при комнатной температуре на кассете с водяным охлаждением в остаточном вакууме 10^{-5} Торр. Полу-

ченные образцы характеризовались значением времени отверждения облучаемой мишени (t), отсчет которого производился от момента механического перемешивания исходной силаксановой смолы с отвердителем к моменту начала ионной имплантации. Отметим, что ранее в [5, 6], были выполнены эксперименты по имплантации ионов железа как в вязкие исходные силаксановые смолы без отвердителя с вязкостью $\eta = 7$ Па·с, так и в полностью затвердевшую силаксановую композицию ($\eta \cong 10^3$ Па·с [7]) при аналогичных режимах и параметрах ионного облучения.

Магнитные свойства имплантированных силаксановых образцов после полного их затверждения исследовались методом магнитной радиоспектроскопии. Регистрация спектров магнитного резонанса проводилась при комнатной температуре на промышленных спектрометрах Varian E-7 и Bruker EMX в радиочастотном X-диапазоне (9,5 ГГц). Как обычно, первая производная поглощаемой мощности радиочастотного поля (dP/dH) была записана как функция приложенного магнитного поля (H). Значение величины резонансного поля (H_0) определялась в точке пересечения кривой dP/dH с нулевой линией регистрируемого спектра.

Результаты и их обсуждение

В результате проведенных магнитных исследований было установлено, что во всех имплантированных железом силаксановых подложках наблюдается интенсивный сигнал магнитного резонанса. Изучение угловой зависимости резонансных спектров показало, что форма и положение регистрируемых сигналов магнитного резонанса зависят от величины полярного угла θ , где θ – угол между вектором нормали к плоскости облучения подложки и направлением приложенного магнитного поля. На рис. 2 представлены спектры магнитного резонанса, записанные при двух крайних значениях ориентации магнитного поля по отношению к вектору нормали и регистрируемые в силаксановых подложках, имплантированных на различных стадиях процесса отверждения. Как видно из рисунка, для перпендикулярной ориентации ($\theta = 90^\circ$) сигналы магнитного резонанса в имплантированных образцах регистрируются в низкополевой области спектра, а для параллельной ($\theta = 0^\circ$) – в высокополевой области спектра. Другим важным результатом исследования угловой зависимости спектров магнитного резонанса является то, что положение наблюдаемых сигналов также зависит от времени отверждения силаксановой подложки в начальный момент имплантации. Данная “временная” зависимость носит немонотонный характер. На начальной стадии, с ростом времени отверждения, сигнал магнитного резонанса смещается в область более высоких магнитных полей для ориентации

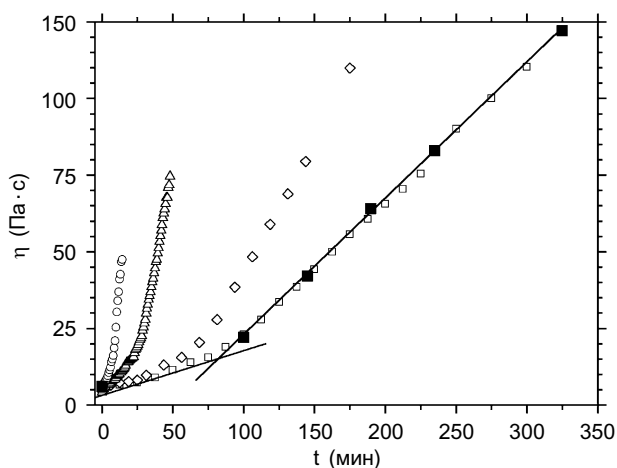


Рис. 1. Зависимость вязкости силаксановой композиции от времени отверждения при комнатной температуре для различных объемных концентраций отвердителя: 1,53% (□), 1,88% (◇), 2,51% (△) и 7,65% (○). Значения вязкости модельной композиции, при которых были выполнены эксперименты по высокочастотной имплантации ионов железа, обозначены символами ■.

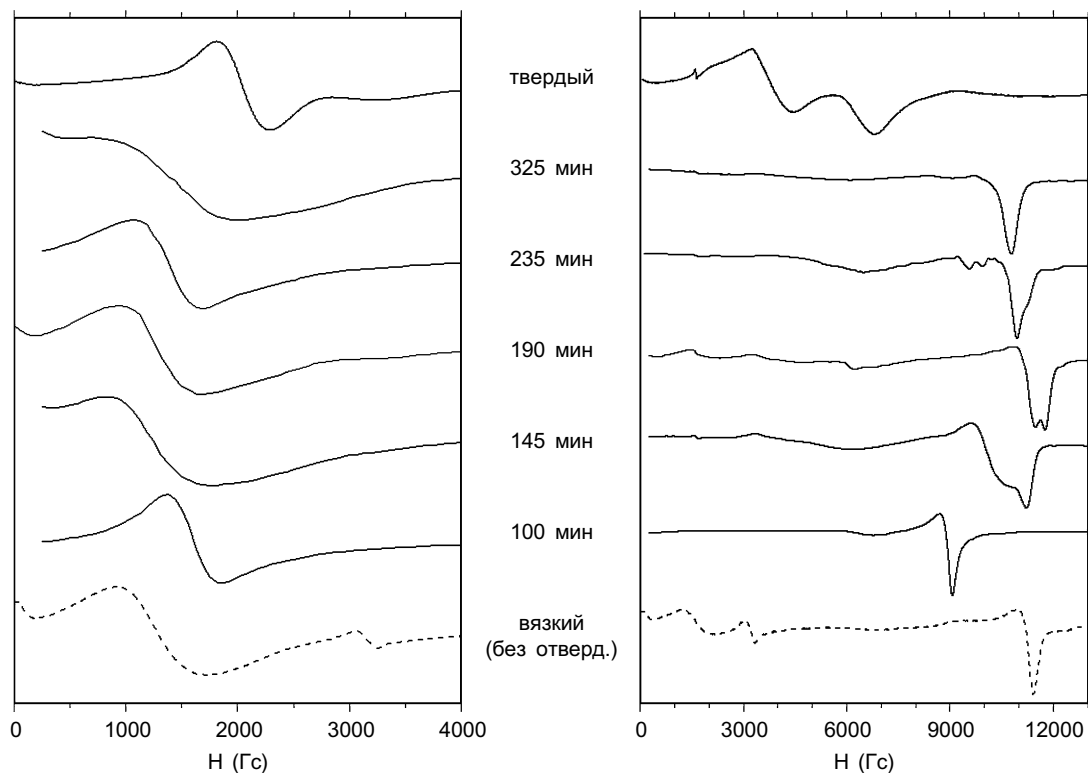


Рис. 2. Спектры ФМР силасановых подложек, имплантированных ионами железа на различных стадиях процесса отверждения с дозой $1.25 \cdot 10^{17}$ ион/см², для двух предельных значений полярного угла: $\theta = 90^\circ$ – левая панель и $\theta = 0^\circ$ – правая панель, соответственно. Время отверждения силасановой подложки в начальный момент имплантации приведено между панелями.

$\theta = 0^\circ$, и в область более низких значений поля для ориентации $\theta = 90^\circ$. Достигая экстремальных положений для обоих значений ориентации поля в спектре образца, полученном при $t = 190$ мин, характер движения резонансных сигналов по полю с ростом времени t меняется на противоположный. Кажущимся исключением из этой зависимости являются сигналы, наблюдаемые в исходной вязкой смоле без отвердителя [6]. Однако заметим, что эти образцы были и остаются в вязко-текучем состоянии после имплантации и, следовательно, не могут быть охарактеризованы временем отверждения t .

Ранее в [5, 6], методами электронной микроскопии нами было показано, что имплантация ионов железа при указанной дозе как в вязкую исходную смолу, так и в полностью затвердевшую силасановую композицию ведет к формированию гранулярных пленок железа в тонком (~ 100 нм) приповерхностном слое облученной подложки. Более того, представленные на рис. 2, угловые зависимости спектров магнитного резонанса типичны для тонкой магнитной пленки [8, 9]. Основываясь на этих двух фактах, можно полагать, что во всех силасановых образцах, имплантированных ионами железа на различных стадиях их отверждения, в облученном слое полимера формируются гранулы металлического железа, а наблюдаемые сигналы являются сигналом ферромагнитно-

го резонанса (ФМР) в тонкой гранулярной магнитной пленке.

Анализ экспериментальных спектров ФМР был сделан в приближении эффективной магнитной среды [9, 10]. В основе приближения лежит положение, что магнитно-резонансные свойства гранулярной пленки, заглубленной в полимере, можно описать, введя понятия эффективных величин: намагниченности M_{eff} и g -фактора композитной магнитной среды g_{eff} . Используя формулы Киттеля [11], описывающие угловую зависимость поведения резонансного поля сигнала ФМР в тонкой магнитной пленке, для двух предельных значений угла θ имеем:

$$\omega_0 = \gamma(H_0 - 4\pi M_{\text{eff}}) \quad \text{для } \theta = 0^\circ,$$

$$\omega_0 = \gamma\sqrt{H_0(H_0 + 4\pi M_{\text{eff}})} \quad \text{для } \theta = 90^\circ, \quad (1)$$

где ω_0 – циклическое значение резонансной частоты, H_0 – величина магнитного резонансного поля и $\gamma = g_{\text{eff}}\mu_B/\hbar$ – гиромагнитное отношение. Система из двух уравнений (1) позволяет легко рассчитать неизвестные значения эффективной намагниченности и g -фактора синтезированных железо/силасановых композитных пленок, используя экспериментальные значения величин резонансного поля и резонансной частоты.

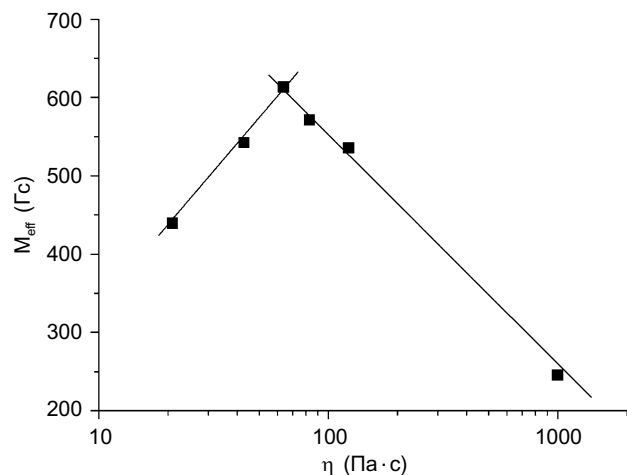


Рис. 3. Зависимость эффективной намагниченности синтезированной железо/силасановой композитной пленки от величины начальной вязкости силасановой подложки, подвергнутой имплантации ионами железа с дозой $1.25 \cdot 10^{17}$ ион/см².

Рассчитанная во всех наших образцах величина $g_{\text{eff}} = 2.05 \pm 0.07$ близка к g -фактору сплошной железной пленки $g_{\text{Fe}} = 2.1$ [11]. Этот факт дает основание предположить, что большинство имплантированных ионов Fe^+ находится в металлическом состоянии, формируя наноструктуры железа в приповерхностном слое облученного полимера.

Зная вязкостно-кинетические свойства полимера (рис. 1), можно также выявить корреляцию рассчитанных значений M_{eff} с величиной вязкости облученной силасановой подложки. Из представленной на рис. 3 зависимости видно, что изменение M_{eff} с ростом η имеет экстремальный пиковый характер, отражая поведение регистрируемых сигналов ФМР. Следовательно, варьируя вязкость силасановой подложки, можно контролировать магнитные характеристики (в частности, намагниченность) синтезируемых композитных материалов в широких пределах. При этом максимум величины $M_{\text{eff}} = 610$ Гс достигается при имплантации силасановой подложки, характеризующейся значением вязкости, равным 70–80 Па·с. Отметим, что значительно меньшая величина эффективной намагниченности ~ 250 Гс наблюдается в композите, полученном путем имплантации ионов железа в полностью отвержденную силасановую подложку.

Заключение

Осуществлен синтез гранулярных пленок железа в силасановом полимере путем высокодозной имплан-

тации ионов железа в вязкую органическую подложку, находящуюся на различных стадиях процесса отверждения. Проведены ФМР исследования магнитных свойств полученных композитных материалов и изучено влияние вязкости облучаемой подложки на их магнитные характеристики. Выявлено значение вязкости полимера, при которой величина магнитной анизотропии (типа легкая плоскость) и намагниченность композитного материала имеют максимальные значения. Проведенные исследования представляются важными для решения ряда практических задач тонкопленочной технологии с точки зрения формирования новых материалов для индустрии магнитной записи и хранения информации с повышенной плотностью.

Данная работа была поддержана РФФИ, грант 99-03-32548, и фондом НИОКР РТ. Авторы выражают благодарность сотрудникам КФТИ: Валееву В.Ф., Жеглову Е.П., Жихареву В.А., Нуждину В.И. и Хайбуллину И.Б. за помощь в проведении имплантации, магнитных измерений и дискуссию полученных результатов.

Литература

1. Kovacs G.J., Vincett P.S.: Subsurface particle monolayer and film formation in softenable substrates: Techniques and thermodynamic criteria. *Thin Solid Films* **111**, 65–77 (1984)
2. Koon N.C., Weber D., Penrsson P., Schindler A.I.: Magnetic properties of iron implanted polymers and graphite. *Mat. Res. Soc. Proc.* **27**, 445–448 (1984)
3. Хайбуллин Р.И., Абдуллин С.Н., Степанов А.Л., Осин Ю.Н., Хайбуллин И.Б.: Ионная имплантация в вязкие среды. *Письма в ЖТФ* **22**, 48–53 (1996)
4. Khaibullin I.B., Khaibullin R.I., Abdullin S.N., Stepanov A.L., Osin Yu.N., Bazarov V.V., Kurzin S.P.: Ion metal synthesis in viscous organic matter. *Nucl. Instr. Meth. B* **127/128**, 685–690 (1997)
5. Khaibullin R.I., Osin Y.N., Stepanov A.L., Khaibullin I.B.: Synthesis of metal/polymer composite films by implantation of Fe and Ag ions in viscous and solid state silicone substrates. *Nucl. Instr. Meth. B* **148**, 1023–1028 (1999)
6. Khaibullin R.I., Zhikharev V.A., Osin Y.N., Zhiglov E.P., Khaibullin I.B., Rameev B.Z., Aktas B.: Structural and magnetic properties of iron and cobalt implanted silicone polymers. *Nucl. Instr. Meth. B* **166/167**, 897–902 (2000)
7. Шетц М.М.: Силиконовый каучук. Ленинград: Химия 1975; Силасановый каучук, ТУ 38 103129-77.
8. Скроцкий Г.В., Курбатов Л.В. в: Современные проблемы физики: Ферромагнитный резонанс. (Вонсовский С.В., ред.). Москва: ФизМатЛит 1961.
9. Netzelmann U.: Ferromagnetic resonance of particulate magnetic recording tapes. *J. Appl. Phys.* **68**, 1800–1807 (1990)
10. Kakazei G.N., Kravets A.F., Lesnik N.A., de Azevedo M.M.P., Pogorelov Y.G., Sousa J.B.: Ferromagnetic resonance in granular thin films. *J. Appl. Phys.* **85**, 5654–5656 (1999)
11. Киттель Ч.: Введение в физику твердого тела. Москва: Наука 1978.

Изинговское обменное взаимодействие оптических двухуровневых систем

А. Р. Кессель

Лаборатория резонансных явлений

Показано, что косвенная связь между оптическими двухуровневыми системами (ДУС) через поле излучения имеет форму изинговского обменного взаимодействия, если связь атомов и поля осуществляется через электрические квадрупольные взаимодействия. Можно ожидать, что парное взаимодействие ДУС проявится в виде неоднородной ширины оптического перехода и в кинетике неравновесных оптических процессов.

Введение

Благодаря обязанной лазерам высокой точности измерений, знание механизмов уширения оптических линий и передачи возбуждений, является актуальной проблемой квантовой оптики. В оптике часто имеет место ситуация, когда оптические переходы возбуждаются между определенной парой уровней энергии атома (обычно это основной E_g и один из возбужденных E_e уровней энергии), а все остальные уровни в физических процессах не участвуют. Удобное описание таких ситуаций дает использование понятия ДУС (двухуровневая система) и представления псевдоспина: изучаемая пара уровней энергии отдельного атома задается как собственные значения и состояния некоторого гамильтониана:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_j^i &= \hbar\omega_0^i \hat{S}_j^z, \\ \hbar\omega_0^i &= E_e^i - E_g^i,\end{aligned}\quad (1)$$

имеющего форму оператора зеемановской энергии для частицы с эффективным псевдоспином $S_j = 1/2$ [1].

Из соображений четности (изучаемые состояния ψ_g и ψ_e обычно обладают различной четностью) можно заключить, что проекция оператора электрического дипольного момента атома $\mathbf{d}_j = e\mathbf{r}_j$ на состояния ДУС может содержать только недиагональные матричные элементы. Для атома в аксиально-симметричном электрическом кристаллическом поле решетки можно считать, что $\mathbf{d}_j = \mathbf{d}S_j^x$. В такой ситуации двухчастичное диполь-дипольное взаимодействие атомов будет содержать только произведения недиагональных операторов типа $\hat{S}_j^x \hat{S}_k^x$ [2].

Между тем, ниже будет показано, что в дополнение к этому существует обменное взаимодействие псевдоспинов изинговского типа $\hat{S}_j^z \hat{S}_k^z$. Оно будет получено как косвенное взаимодействие диагональных, энергетических составляющих псевдоспинов через электромагнитное поле вакуума [3].

Гамильтониан решаемой проблемы

Для простоты записи будем считать, что уровни энергии ДУС определяются атомной оболочкой, содержащей один электрон: e , m , $\mathbf{p}$ – заряд, масса и импульс электрона. Гамильтониан атома j в поле излучения есть [4]:

$$\mathcal{H}^j = \mathcal{H}_0^j + \mathcal{H}_1^j + \mathcal{H}_2^j, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0^j &= \mathcal{H}_{e0}^j + \mathcal{H}_{ph}^0, \\ \mathcal{H}_{e0}^j &= \mathbf{p}_j^2/2m + eV(\mathbf{R}_j),\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_1^j &= -\mathbf{d}_j \mathbf{E}(\mathbf{R}_j, t), \\ \mathcal{H}_2^j &= Q_j \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{E}(\mathbf{R}_j).\end{aligned}\quad (4)$$

Здесь использовано мультиплетное разложение, причем $\mathcal{H}_1$ соответствует электрическому дипольному, а $\mathcal{H}_2$ – электрическому квадрупольному взаимодействию атомного электрона с электромагнитным полем, $\mathcal{H}_{e0}^j$ есть основной гамильтониан атома j (ниже будет использоваться только “проекция” этого гамильтониана на состояния ДУС в форме (1)). $\mathbf{d}_j = e\mathbf{r}_j$ и $Q_j = e\mathbf{r}_j \mathbf{r}_j / 2$ – операторы дипольного и квадрупольного момента атома j , $\mathbf{R}_j$ и $\mathbf{r}_j$ – радиус-векторы ядра j и электрона, соответственно. Используя определение напряженности электромагнитного поля: $\mathbf{E}(\mathbf{R}_j, t) = -(1/c)\partial \mathbf{A}(\mathbf{R}, t)/\partial t$, представим $\mathcal{H}_2^j$ в форме:

$$\mathcal{H}_2^j = -\frac{e}{2c} \sum_{\alpha, \beta} r_{\alpha}^j r_{\beta}^j \frac{\partial^2 A_{\alpha}(\mathbf{R}_j, t)}{\partial R_{\beta} \partial t}. \quad (5)$$

Выражение (4) для $\mathcal{H}_1$ получено в дипольном приближении. Гамильтониан $\mathcal{H}_1$, будучи рассмотренным по методике, описанной в предыдущем разделе, приводит к известному выражению для оператора диполь-дипольной связи, содержащему парные операторы вида $\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x$, $\hat{S}_i^y \hat{S}_j^y$ [2].

Оператором $\mathcal{H}_2$ во многих случаях оказывалось возможным пренебречь. Тем не менее, ниже будет показано, что вклад этого взаимодействия в парную связь ДУС отнюдь не мал и может влиять на наблюдаемые физические свойства.

Подставив выражение векторного потенциала в представлении взаимодействия

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\mu}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} [a_{\mathbf{k}\mu}(t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) + a_{\mathbf{k}\mu}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R})]$$

в выражение для $\mathcal{H}_2^j$, можно получить

$$\mathcal{H}_2^j = -\frac{e}{2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \omega_{\mathbf{k}}^{1/2} (a_{\mathbf{k}\mu}(t) - a_{\mathbf{k}\mu}^+(t)) \times \sum_{\alpha, \beta} (r_{\alpha}^j e_{\mathbf{k}\mu}^{\alpha}) (r_{\beta}^j k_{\beta}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_j), \quad (6)$$

где $a_{\mathbf{k}\mu}^+$ и $a_{\mathbf{k}\mu}$ есть операторы рождения и уничтожения фотона поляризации μ ($\mu = 1, 2$), с энергией $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$, волновым вектором $\mathbf{k}$, $e_{\mathbf{k}\mu}^{\alpha}$ есть α -компонента вектора поляризации, V – объем квантования поля излучения.

Поскольку, как отмечалось выше, собственные состояния ψ_g и ψ_e обладают разной четностью, то четные относительно пространственных отражений операторы обладают только диагональными матричными элементами, что позволяет представить произведение $r_{\alpha}^j r_{\beta}^j$ для оптической ДУС в виде матрицы:

$$\begin{aligned} \|r_{\alpha}^j r_{\beta}^j\| &= (\rho_{\alpha}^j \hat{S}_z^j + \rho_{\alpha}^j \hat{E}) \delta_{\alpha\beta}, \\ \hat{S}_z &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \\ \hat{E} &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \\ \rho_{\alpha}^j &= \langle \psi_e | (r_{\alpha}^j)^2 | \psi_e \rangle - \langle \psi_g | (r_{\alpha}^j)^2 | \psi_g \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Слагаемое, пропорциональное операторной единице $\hat{E}$, не порождает наблюдаемых эффектов и поэтому ниже не рассматривается. Поскольку выбор основного гамильтониана пропорциональным z -компоненте псевдоспина нарушает сферическую симметрию, следует считать, что, вообще говоря, $\rho_x = \rho_y \neq \rho_z$. Такое нарушение симметрии есть результат взаимодействия атома с электрическим полем кристаллической решетки. Ось z системы координат определяется этим выбором и не может быть ориентирована произвольно.

Перейдем к рассмотрению системы двухуровневых атомов. Подставляя первое соотношение из формул (7) в выражение (6) и суммируя по всем атомам об-

разца, представим гамильтониан системы ДУС, взаимодействующих с полем, в форме

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 &= -e \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2V}} \sum_j S_j^z \sum_{\mathbf{k}, \mu} G_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{R}_j) D_{\mathbf{k}\mu}(t), \\ D_{\mathbf{k}\mu}(t) &= a_{\mathbf{k}\mu}(t) - a_{-\mathbf{k}\mu}^+(t), \\ G_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{R}_j) &= \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{\alpha} (k_{\alpha} e_{\mathbf{k}\mu}^{\alpha}) \rho_{\alpha} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j). \end{aligned} \quad (8)$$

Оператор энергии электромагнитного поля в представлении вторичного квантования, как известно, имеет вид

$$\mathcal{H}_f = \hbar \sum_{\mathbf{k}, \mu} \omega_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}\mu}^+ a_{\mathbf{k}\mu} + \frac{1}{2} \right). \quad (9)$$

И наконец, оператор $\mathcal{H}_{e0}^j$ может иметь большой набор собственных состояний ψ_{α}^j , пара из которых ψ_g^j и ψ_e^j выделена нами в качестве оптической ДУС и характеризуется в представлении псевдоспина гамильтонианом (1).

Парное взаимодействие двухуровневых оптических систем

Для вывода оператора парного взаимодействия воспользуемся методом, использованным Фрелихом для получения оператора взаимодействия электронов в теории сверхпроводимости БКШ [5]. Для физической системы описанной в разделе 2, получается следующее выражение для оператора взаимодействия ДУС:

$$W_{SS} = \hbar \sum_{ij} U_2(\mathbf{R}_{ij}) S_i^z S_j^z, \quad (10)$$

$$U_2(\mathbf{R}_{ij}) = -\frac{e^2}{2\hbar V} \sum_{\mathbf{k}, \mu} \left[\sum_{\alpha} (k_{\alpha} e_{\mathbf{k}\mu}^{\alpha}) \rho_{\alpha} \right]^2 \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)), \quad (11)$$

где $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \equiv \mathbf{R}$. Таким образом, видно, что рассмотренный здесь механизм привел к обменному взаимодействию ДУС изинговского типа. Насколько нам известно, взаимодействие такого типа применительно к оптическим ДУС ранее не рассматривалось.

После стандартных упрощений выражение для обменного интеграла приобретает вид

$$U_2(R) = \hbar^{-1} \left[\frac{2\pi e(\rho_z - \rho_x)}{R} \right]^2 \frac{\cos(2\pi R/r_a)}{2r_a^3} \cos^2 \Theta_R \sin^2 \Theta_R, \quad (12)$$

где Θ_R – полярный угол между кристаллической осью z и вектором $\mathbf{R} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$, r_a – радиус атома.

Таким образом, потенциал (12), осциллируя, убывает как R_{ij}^{-2} . Такое убывание связано с уменьшением в точке R_j плотности фотонов, взаимодействующих с ДУС в точке R_i . Периодическая зависимость присуща многим косвенным взаимодействиям, наиболее известным из которых является взаимодействие ядерных спинов через электроны проводимости в металлах [6].

Парное взаимодействие в форме (10) может быть так же получено, если в качестве контакта атома и поля излучения выбирается квадратичное по векторному потенциалу слагаемое гамильтониана Паули $\mathcal{H}_3 = (e^2/2mc^2)\mathbf{A}^2$, обычно используемое для описания слабого диамагнетизма атомов. После некоторого унитарного преобразования этот оператор приобретает форму [7]:

$$\mathcal{H}_3 = -\frac{e^2}{2mc^2} \sum_{\alpha\beta\gamma} r_{\alpha}^i r_{\beta}^j \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial r_{\gamma}} \frac{\partial A_{\beta}}{\partial r_{\gamma}} \quad \text{при } \alpha, \beta, \gamma = x, y, z,$$

которая позволяет непосредственно применять схему вывода оператора W_{ss} предшествующего раздела. В результате получается оператор вида (10), потенциал которого есть

$$U_3(R) = \left(\frac{e^2}{2\pi m} \right)^2 J_{00} \left(\rho_x^2 (1 + \cos^4 \Theta_R) + \rho_z^2 \sin^4 \Theta_R + \frac{1}{2} \rho_x \rho_z \sin^2 2\Theta_R \right),$$

$$J_{00} = 0.26 \frac{1}{c^3 R^3} \left(\frac{\pi}{r_a} \right)^4 \left(\sin a + 4 \frac{\cos a}{a} \right). \quad (13)$$

Для его упрощения использовались те же приближения, что и для расчета потенциала $U_2(R)$ (12).

Наконец, как уже отмечалось во введении, слагаемое $\mathcal{H}_1^j$ (4) приводит к косвенному взаимодействию поперечных компонент псевдоспинов с потенциалом $d = |\mathbf{d}|$ [8]:

$$U_1(R) = \frac{d^2}{R^3} (3 \cos^2 \Theta_R - 1) \quad \text{при } \omega_0 R/c \rightarrow 0.$$

Оценка потенциала обменного взаимодействия ДУС

Приступим к оценке потенциала изинговского взаимодействия (11). Для оценки порядка величины ρ_{α} (7) проведем расчет матричного элемента r_{α}^2 в простейшем частном случае. Выберем в качестве состояния ψ_g и ψ_e состояния (1,0,0) и (2,1,1) атома водорода (указаны тройки квантовых чисел (n, l, m)) [1]. Если использовать известные функции состояния $\psi_{2,1,1}$ и $\psi_{1,0,0}$ для водорода, то $\rho_x = \rho_y = 5r_B^2$, $\rho_z = 11r_B^2$, где r_B – Боровский радиус. Выбрав в качестве других параметров зна-

чения $r_a \sim 10^{-8}$ см и $R \sim 10^{-6}$ см, приходим к следующему значению изинговского обменного взаимодействия $U_2(R) = 10^{12}$ рад/сек.

При этих же приближениях и значениях параметров другие потенциалы оказываются равными $U_1(R) = 10^8$ рад/сек, $U_3(R) \sim 10^6$ рад/сек.

И, наконец, естественная ширина линии спонтанного излучения определяется формулой $\gamma = 2d^2\omega_0^2/3\hbar c^3$ [9] и для оптических частот $\omega_0/2\pi = 3 \cdot 10^{14}$ Гц приблизительно равна $\gamma = 2 \cdot 10^5$ Гц. Сравнение показывает, что потенциал косвенного взаимодействия $U_2(R)$ значительно превосходит потенциалы другой природы и ширину спонтанного излучения.

Возникает вопрос, по какой причине потенциал U_2 оказывается больше всех остальных потенциалов? В более острой форме: почему связь между ДУС за счет мультипольного момента второго порядка U_2 существенно превосходит величину связи за счет мультипольного момента первого порядка U_1 ? Причина лежит в особенностях взаимодействий $\mathcal{H}_2$ и $\mathcal{H}_1$, и в природе квантовомеханической теории возмущений. Оператор W_{ss} (10) по своей сути есть поправка второго порядка к оператору энергии. Согласно теории возмущений, такая поправка должна иметь порядок $V_{sf}^2(\Delta E \pm \hbar\omega_k)^{-1}$, где ΔE – интервал между уровнями энергии динамической системы, между которыми вычисляется матричный элемент оператора возмущения V_{sf} . В случае дипольной связи атома и поля излучения оператор $V_{sf} = \mathcal{H}_1$ имеет только недиагональные матричные элементы в пространстве псевдоспина, и $\Delta E = \hbar\omega_0$, где ω_0 – частота оптического перехода. В случае связи через взаимодействие $\mathcal{H}_2$ оператор V_{sf} имеет только диагональные матричные элементы и $\Delta E = 0$. Большая величина отношения $V_{sf}/\hbar\omega_0$ по сравнению с $V_{sf}^2(\Delta E \pm \hbar\omega_k)^{-1}$ и определяет численное превосходство U_2 над U_1 . Малость потенциала U_3 и спонтанной ширины, обусловленных взаимодействиями другой природы, можно было ожидать заранее.

Возможные проявления парного взаимодействия ДУС

Как взаимодействие (10) может проявиться в свойствах оптически активных веществ?

При неупорядоченном расположении ДУС в веществе взаимодействие W_{ss} может привести к так называемому неоднородному уширению оптического перехода, поскольку на каждом атоме j порождает смещение

$$\Delta\omega_j = \sum_i U_2(R_{ij}) \langle S_j^z \rangle \quad (14)$$

резонансной частоты, которое является случайной величиной. Среднее $\langle S_j^z \rangle$ в (14) соответствует приближе-

нию молекулярного поля для псевдоспиновых операторов, часто используемому при оценке сдвигов резонансных линий. Мерой ширины может служить среднеквадратичная величина $\overline{\Delta\omega_j}$

$$\overline{\Delta\omega_j} = \frac{\sqrt{2n}}{3\sqrt{35}} \left[\left(\frac{2\pi}{r_a} \right)^3 \frac{e^2(\rho_z - \rho_x)^2}{\hbar} \right] \times \frac{\cos(2\pi R_0/r_a)}{\sqrt{\pi R_0}} \langle S_j^z \rangle,$$

где $\langle S_j^z \rangle$ есть температурное среднее значение z -компоненты псевдоспина j при температуре эксперимента, которое, вообще говоря, можно считать не зависящим от точки к точке, R_0 – ближайшее возможное расстояние между ДУС и n – их концентрация. При $n = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, получим $\overline{\Delta\omega_j} = 10^{12} \text{ рад/сек}$.

Более интересные проявления изинговского обменного взаимодействия можно ожидать при упорядоченном расположении ДУС в кристаллической решетке. Как известно, в изинговском магнетике возникают дополнительные резонансные пики, если обменный интеграл больше естественной ширины линии [10]. В этих условиях величины $\Delta\omega_j$ перестают быть случайными, принимают несколько определенных значений в соответствии с числом неэквивалентных положений, где могут находиться соседние обменно-связанные ДУС. Это порождает дополнительные пики поглощения. Количество пиков зависит от числа обменно-связанных атомов. Например, в линейной изинговской системе при обменном взаимодействии ближайших соседей, расположенных на расстоянии R_0 друг от друга, существуют три резонансные частоты: ω_0 и $\omega_0 \pm U_2(R_0)$ [10].

Интегральные интенсивности этих линий проявляют характерную температурную зависимость, в частности, при приближении температуры к нулю все линии вымораживаются за исключением одной, интенсивность которой растет. К сожалению, расстояние между оптическими уровнями энергии $E_e - E_g$ настолько велико, что практически всегда в равновесии реализуется предел нулевой температуры. Поэтому дополнительные пики следует искать в неравновесных условиях.

Эксперименты такого рода хорошо известны в магнитном резонансе. При воздействии на неоднородно уширенную линию ЭПР узкополосным сильным переменным полем последующее прохождение контура линии другим слабым полем выделяет широкий контур с “выжженной дырой” [11]. Форма линии ЭПР

претерпевает сложные преобразования при восстановлении равновесия, по кинетике этого процесса судят о релаксационных свойствах изучаемого объекта.

Другой пример: при интенсивном узкочастотном насыщении однородно уширенной линии ЭПР ее контур сложным образом меняется вплоть до появления участков отрицательного поглощения. Сложная кинетика этого процесса, обязанная существованию резервуара магнитных диполь-дипольных взаимодействий, хорошо изучена экспериментальными методами [11].

Для экспериментального обнаружения изинговского обменного взаимодействия оптических ДУС следует вывести эту физическую систему из термодинамического равновесия, например, посредством импульса или интенсивного стационарного облучения, с последующим сканированием широкой оптической линии ДУС монохроматическим, перестраиваемым по частоте лазерным лучом. В такой ситуации можно ожидать появления дополнительных пиков, проявляющих сложную кинетику. Спектральное выжигание провалов в неоднородно уширенной оптической линии наблюдалось экспериментально [12].

Работа выполнена совместно с И. С. Донской [3, 13].

Литература

1. Алан Л., Эберли Дж.: Оптический резонанс и двухуровневые атомы. Москва: Мир 1978.
2. Кессель А.Р., Попов В.А.: Микроскопический вывод кинетических уравнений для взаимодействующих оптических двухуровневых систем. Оптика и спектроскопия **88**, 270 (2000)
3. Кессель А.Р., Донская И.С.: Обменное взаимодействие изинговского типа для оптических ДУС. Письма в ЖЭТФ **74**, 283 (2001)
4. Лоудон Р.: Квантовая теория света. Москва: Мир 1976.
5. Frohlich H.: Theory of the superconducting state I. The ground state of the absolute zero of temperature. Phys. Rev. **79**, 845 (1950)
6. Ruderman M.A., Kittel C.: Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. Phys. Rev. **96**, 99 (1954)
7. Люиселл У.: Излучение и шумы в квантовой электронике. Москва: Наука 1972.
8. Agarwal G.S.: Quantum Optics. Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 70. Springer: Berlin 1974.
9. Ораевский А.Н.: Спонтанное излучение в резонаторе. УФН **164**, 415 (1994)
10. Кессель А.Р., Берим Г.О.: Магнитный резонанс изинговских магнетиков. Москва: Наука 1982.
11. Азаркин В.А.: Динамическая поляризация ядер в твердых диэлектриках. Москва: Наука 1980.
12. Drobizhev M., Korotki A., Rebane A.: Femtosecond time- and space-domain holography by one and two photon transitions. Chem. Phys. Lett. **334**, 76 (2001)
13. Кессель А.Р., Донская И.С.: Изинговское обменное взаимодействие оптических ДУС. ЖЭТФ **121**, №3 (2002)

Стабилизация вычислительного базиса квантового компьютера при кодировании кубитов в представлении виртуального спина

А. Р. Кессель

Лаборатория резонансных явлений

Предлагается сопоставить кубитам квантовой информатики, основанной на ЯМР, не состояния отдельных спинов, а их коллективные состояния с учетом взаимодействия между ними, которое может не быть малым. Такой подход позволяет ввести устойчивый вычислительный базис в ЯМР твердого тела и на его основе – универсальный набор логических вентилей.

Введение

ЯМР явился отличным полигоном для опробования различных идей квантовой информатики. Благодаря сочетанию развитой теории и изощренной техники эксперимента оказалось возможным реализовать простейшие квантовые алгоритмы на серийно выпускаемых спектрометрах ЯМР. На сегодняшний день достижения квантовой информатики в ЯМР жидкого состояния (ЯМР ЖС) далеко обошло другие возможные экспериментальные реализации квантовых вычислений.

Успех квантовой информатики в ЯМР ЖС связан, в частности, с тем, что абстрактному понятию квантово-механического бита – кубита – было найдено ясное физическое соответствие – ядерный спин S . Две возможные ориентации спина сопоставляются двум состояниям кубита $|0\rangle$ и $|1\rangle$. В качестве вычислительного базиса берутся собственные функции $|m\rangle$ z -компонент ядерных спинов, которые коммутируют с полным гамильтонианом. Например, для двухспиновой системы таким базисом является

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |m_1 = -1/2, m_2 = -1/2\rangle, \\ |01\rangle &= |m_1 = -1/2, m_2 = +1/2\rangle, \\ |10\rangle &= |m_1 = +1/2, m_2 = -1/2\rangle, \\ |11\rangle &= |m_1 = +1/2, m_2 = +1/2\rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

где m_1 и m_2 есть собственные значения z -компонент ядерных спинов.

Однако сейчас уже вырисовываются пределы возможностей ЯМР ЖС для квантовой информатики [1, 2]. На повестке дня переход к ЯМР твердого тела (ЯМР ТТ). Существенной особенностью ЯМР ТТ является наличие в гамильтониане спин-спиновых взаимодействий ядер (обменных и диполь-дипольных), не усредняемых тепловым движением и содержащих не только Z , но и X , Y компоненты спинов. Из-за этого ориентация отдельного спина становится плохим интегралом движения, то есть стационарные со-

стояния спиновой системы не соответствуют определенному значению z -компоненты спинов, а функции (1) не являются стационарными. Поэтому, чтобы ввести надежный вычислительный базис, связанный с сопоставлением кубиту ориентации отдельного спина, требуются специальные усилия для подавления спин-спинового взаимодействия [2]. Это может быть достигнуто непрерывным облучением ТТ последовательностями импульсов, разработанными в ЯМР, например, известной последовательностью WАНУНА [3], состоящей из четырех резонансных импульсов для каждого спина.

В данной работе демонстрируется тот факт, что в системе взаимодействующих спинов в условиях, когда z -компоненты спинов не коммутируют с полным гамильтонианом, можно ввести устойчивый вычислительный базис, не требующий для своей стабильности непрерывного импульсного воздействия. Суть предложения состоит в том, что одному кубиту сопоставляется не ориентация отдельного спина, как это интерпретируется при использовании функций (1), а пара стационарных состояний полного спинового гамильтониана с учетом спин-спинового взаимодействия. На языке спиновых ориентаций это означает, что кубиту ставится в соответствие ориентация виртуального спина [4]. Это предложение находится в рамках развиваемого нами подхода “Много уровней вместо многих частиц” [5] и в данном случае отличается тем, что виртуальные спины вводятся не на уровнях отдельной частицы (как это сделано ранее для спинов $3/2$ и $7/2$), а на коллективных состояниях взаимодействующих частиц. В таком случае кубиты оказываются “делокализованными” и, вообще говоря, теряется прямое соответствие между кубитом и отдельным спином.

Поясним идею стабильности на примере из двух взаимодействующих спинов. Пусть гамильтониан такой системы есть

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_1 + V_2 + V_3 + \dots,$$

где $\mathcal{H}_0$ – основной гамильтониан невзаимодействующих спинов с собственными функциями (1), а $V_1 \gg V_2 \gg V_3 \gg \dots$ есть иерархия других взаимодействий, включая внутренние. В том случае, когда кубиты кодируются на собственных состояниях $|m_1, m_2\rangle$ зеemannовского гамильтониана $\mathcal{H}_0$, они остаются стабильными только на временах $t_1 \ll h/V_1$, после чего состояния кубитов начинают изменяться под влиянием гамильтониана V_1 . Если взаимодействие V_1 включить в основной гамильтониан и на собственных функциях оператора $\mathcal{H}_0 + V_1$ осуществить кодирование кубитов, то стабильность такого вычислительного базиса будет сохраняться на временах $t_2 \ll h/V_2$ и т.д. В силу определения иерархии взаимодействий $t_2 \gg t_1$ и т.д. Иными словами, включение в определение кубита все более и более слабых взаимодействий увеличивает интервалы стабильности вычислительного базиса. Таким образом теоретически проблема сводится к задаче кодирования кубитов в произвольном наборе состояний некоторого гамильтониана $\mathcal{H}$. Ответ состоит в кодировании кубитов в представлении виртуального спина.

Простая модель взаимодействия двух спинов

Универсальный набор вентилей состоит из однокубитных вращений и двухкубитного вентиля CNOT [6]. Поэтому имеет смысл рассмотреть простую модель взаимодействия двух неэквивалентных ядерных спинов $I = 1/2$ и $S = 1/2$, связанных изотропным обменным взаимодействием.

Гамильтониан такой системы есть

$$\mathcal{H} = \hbar\omega_0(\mathbf{I}_z + \mathbf{S}_z) + (\hbar\delta/2)(\mathbf{I}_z - \mathbf{S}_z) + \hbar J(\mathbf{I}\mathbf{S}),$$

$$\omega_0 = (1/2)(\gamma_I + \gamma_S)H_0, \quad \delta = -(\gamma_I + \gamma_S)H_0, \quad (2)$$

где γ_I и γ_S – гиромагнитные отношения ядер, J – обменный интеграл, H_0 – постоянное внешнее магнитное поле.

Собственными функциями этого гамильтониана являются

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |++\rangle \equiv |m_I = +1/2, m_S = +1/2\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= p|+-\rangle + q|-+\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= p|-+\rangle - q|+-\rangle, \\ |\psi_4\rangle &= |--\rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

где $p = \cos(\phi/2)$, $q = \sin(\phi/2)$. Им соответствуют собственные значения

$$\begin{aligned} E_1 &\equiv \hbar\varepsilon_1 = \hbar\omega_0 + (1/4)\hbar J, \\ E_2 &\equiv \hbar\varepsilon_2 = -(1/4)\hbar J + (1/2)\hbar\theta, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_3 &\equiv \hbar\varepsilon_3 = -(1/4)\hbar J - (1/2)\hbar\theta, \\ E_4 &\equiv \hbar\varepsilon_4 = -\hbar\omega_0 + (1/4)\hbar J, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\theta^2 = J^2 + \delta^2$. В такой системе существуют четыре разрешенных перехода на частотах

$$\begin{aligned} \varepsilon_{12} &= \omega_0 + (1/4)J - (1/2)\theta, \\ \varepsilon_{13} &= \omega_0 + (1/4)J + (1/2)\theta, \\ \varepsilon_{24} &= \omega_0 - (1/4)J - (1/2)\theta, \\ \varepsilon_{34} &= \omega_0 - (1/4)J + (1/2)\theta \end{aligned} \quad (5)$$

с относительной интенсивностью

$$\begin{aligned} P_{24} = P_{12} &\propto |\langle\psi_1|I_x + S_x|\psi_2\rangle|^2 = 1 + \sin\phi, \\ P_{34} = P_{13} &\propto |\langle\psi_1|I_x + S_x|\psi_3\rangle|^2 = 1 - \sin\phi. \end{aligned} \quad (6)$$

Вычислительный базис в представлении виртуальных спинов

Четырехмерное гильбертово пространство, натянутое на собственные функции (3), можно рассматривать как прямое произведение двух двухмерных гильбертовых пространств виртуальных спинов $R = 1/2$ и $S = 1/2$ [6]. Это означает, что в качестве вычислительного базиса для двухкубитной системы берутся собственные функции (3) гамильтониана (2), то есть

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |\psi_1\rangle, & |01\rangle &= |\psi_2\rangle, \\ |10\rangle &= |\psi_3\rangle, & |11\rangle &= |\psi_4\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

В такой записи отдельным кубитам соответствуют виртуальные спины, то есть

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |m_Q = -1/2\rangle, & |1\rangle &= |m_Q = +1/2\rangle, \\ |0\rangle &= |m_R = -1/2\rangle, & |1\rangle &= |m_R = +1/2\rangle, \end{aligned}$$

а связанным состояниям двух кубитов – вычислительный базис

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |m_Q = -1/2, m_R = -1/2\rangle, \\ |01\rangle &= |m_Q = -1/2, m_R = +1/2\rangle, \\ |10\rangle &= |m_Q = +1/2, m_R = -1/2\rangle, \\ |11\rangle &= |m_Q = +1/2, m_R = +1/2\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Теперь резонансный переход между какими-либо двумя реальными состояниями физической системы интерпретируется как переориентация виртуальных спинов. Например, облучение перехода $\langle\psi_1|\leftrightarrow|\psi_2\rangle$ в представлении виртуальных спинов можно интерпретировать как вращение спина Q и т.д. Используя результаты работ [5, 4], можно показать, что в данной

Таблица 1. Универсальный набор квантовых вентилях в системе из двух виртуальных кубитов. $CNOT_{R-Q}$ означает операцию NOT на кубите Q , контролируемое состоянием кубита R , а π -импульс есть поворот виртуального спина Q на угол π .

Логическая операция	Возбуждаемые переходы
Вращение виртуального спина Q	$\langle \psi_1 \leftrightarrow \psi_2 \rangle$ и $\langle \psi_3 \leftrightarrow \psi_4 \rangle$
Вращение виртуального спина R	$\langle \psi_1 \leftrightarrow \psi_3 \rangle$ и $\langle \psi_2 \leftrightarrow \psi_4 \rangle$
Контролируемая инверсия спина Q	π -импульс на переходе
Контролируемая инверсия спина R	π -импульс на переходе
$CNOT_{R-Q}$	$\langle \psi_3 \leftrightarrow \psi_4 \rangle$
$CNOT_{Q-R}$	$\langle \psi_2 \leftrightarrow \psi_4 \rangle$

системе из двух виртуальных кубитов универсальный набор вентилях реализуется посредством возбуждения резонансных переходов импульсами подходящей частоты и длительности (таблица 1).

Из таблицы видно, что указанные квантовые вентили могут быть реализованы одним радиочастотным импульсом, причем для реализации вращения кубита требуется двухчастотное заполнение импульса, а для контролируемого отрицания – одночастотное.

Заключение

Таким образом, переход к кодировке информации на виртуальных спинах позволяет простым образом построить универсальный набор квантовых вентилях в системе двух взаимодействующих реальных спинов в твердом теле. Преимущества такой кодировки состоят в том, что взаимодействие между реальными спинами может иметь при этом любую величину, и что отпадает потребность подвергать твердое тело непрерывному импульсному воздействию для поддержания стабильности вычислительного базиса. Кроме того,

время срабатывания такого вентиля целиком контролируется экспериментатором и может быть сделано достаточно коротким, тогда как при кодировке на реальных спинах это время определяется величиной обменного взаимодействия (свойствами вещества) и, вообще говоря, может быть длинным.

Отметим, что предложенный здесь подход может быть полезен и в ЯМР ЖС в случае, когда обменное взаимодействие не усредняется до z -компонент спинов. Кроме того, он может быть использован для кодировки информации на любом кластере взаимодействующих частиц другой природы, если для введения кубитов среди его стационарных состояний можно найти подходящие, обладающие необходимыми для устройства вентилях правилами отбора для возбуждения резонансных переходов. Пример введения виртуальных спинов на оптических состояниях отдельного атома можно найти в работе [7].

Эти исследования поддержаны грантом фонда НИОКР Республики Татарстан № 14-29 и опубликованы А. Р. Кесселем и В. Л. Ермаковым [8].

Литература

1. Jones J.A.: NMR quantum computation: a critical evaluation. LANL, e-print: arXiv: quant-ph/0002085, 1998.
2. Cory D.G., Laflamme R., Knill E., Viola L., Havel T.F., Boulant N., Boutis G., Fortunato E., Lloyd S., Martinez R., Negrevergne C., Pravia M., Sharf Y., Teklemariam G., Weinstein Y.S., Zurek W.H.: NMR based quantum information processing: achievements and prospects. LANL, e-print arXiv: quant-ph/0004104, 2000.
3. Waugh J.S., Huberlen L.M., Haeberlen U.: Approach to the high resolution NMR in solids. Phys. Rev. Lett. **20**, 180–182 (1968)
4. Кессель А.Р., Ермаков В.Л.: Многокубитный спин. Письма в ЖЭТФ **70**, 59–63 (1999)
5. Кессель А.Р., Ермаков В.Л.: Виртуальные кубиты – многоуровневость вместо многочастичности. ЖЭТФ **117**, 517–525 (2000)
6. Barenco A., Bennett C.H., Cleve R., et al.: Elementary Gates for Quantum Computation. Phys. Rev. A **52**, 3457–3467 (1995)
7. Ermakov V.L., Kessel A.R., Samartsev V.V.: Four atomic optical energy levels as a two-qubit quantum computer register. SPIE Proceedings **4061**, 79–84 (<http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/0001090>)
8. Kessel A.R., Ermakov V.L.: Coding of the quantum information on virtual qubits. SPIE Proceedings **4605**, 107 (2001)

Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$

Х. Г. Богданова

Лаборатория резонансных явлений

В работе приведены результаты измерений акустических, магнитных и электрических свойств и данные рентгеновского микроанализа монокристаллического образца $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$. Обнаружены аномалии коэффициентов затухания и скорости звука вблизи температуры Кюри T_c , где существует эффект колоссального магнитосопротивления. Рентгеновский микроанализ не выявил неоднородностей химического состава по La, Sr и Mn размером $d > 1$ мкм, поэтому акустические аномалии не удается связать с фазовым расслоением. Магнитные измерения подтвердили влияние магнитного поля на магнитную текстуру манганитов лантана при охлаждении от T_c , которое ранее наблюдалось на образцах другого состава. Кроме того, обнаружен участок аномального поведения магнитной восприимчивости $\chi(T)$ для незакрепленного образца. Аномалии проявляются в убывании $\chi(T)$ с ростом T при $T < T_c$, вместо стандартного для ферромагнетиков возрастания. Измерения электросопротивления не выявили каких-либо аномалий по сравнению с опубликованными данными других авторов на манганитах такого состава. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 99-02-16268).

Введение

Вслед за высокотемпературными сверхпроводниками медно-оксидной группы в последнее десятилетие возрос интерес к изучению другого класса окислов переходных металлов – манганитов лантана типа $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$, где A – двухвалентный элемент (Ca, Ba, Sr, ...). Это связано, прежде всего, с обнаружением в них эффекта колоссального магнитосопротивления (КМС) при комнатной температуре [1]. Оно наблюдается в интервале концентраций x , где существует ферромагнитная металлическая фаза, и состоит в том, что сопротивление ρ уменьшается при приложении магнитного поля H . Величина эффекта $\Delta\rho/\rho$ в полях порядка 1 Тл может достигать десятков процентов. Максимальный эффект возникает в окрестности температуры Кюри T_c . Этот “сверхэффект” может служить основой технического применения.

Вскоре выяснилось, что КМС в этих соединениях сосуществует с особенностями не только электрических и магнитных, но также структурных свойств. Это стимулировало их изучение различными экспериментальными методиками (см., например, обзоры [2, 3]), в том числе и акустическими [4–6]. Наибольшее внимание было уделено манганитам состава $\text{La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{MnO}_3$ ($0.16 \leq x \leq 0.18$), которые обладают максимальными значениями КМС. Несмотря на значительное количество исследований нет полной ясности в природе КМС и даже о характере температурных аномалий электрических, магнитных и акустических характеристик данных материалов. Физические свойства манганитов оказались настолько богатыми и разнообразными, что интерес на данное время как со стороны экспериментаторов, так и теоретиков к ним велик.

Нами были проведены экспериментальные исследования акустических, магнитных, электрических свойств, рентгеноструктурный и рентгеноспектральный анализы на монокристалле манганита лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$. Полученные результаты сопоставлялись с известными литературными данными с точки зрения структурных и магнитных фазовых переходов, имеющих место в данной системе.

Ультразвуковые исследования

Согласно фазовой диаграмме (см., например, [7]) кристаллическая структура лантан-стронциевых манганитов слегка отличается от кубической. Предполагается, что ниже температуры $T = 200$ К эти искажения соответствуют орторомбической симметрии, выше – ромбоэдрической. Имеются также данные [8], что обе фазы состоят из мелких двойников с различной ориентацией указанных искажений. Такое двойникование обеспечивает восстановление кубической симметрии для образца в целом, которая и проявляется при стандартном рентгеноструктурном анализе.

Измерения скорости и затухания продольных и поперечных акустических волн были выполнены в образце, имеющем вид прямоугольного параллелепипеда с гранями вдоль осей [100], [010] и [001]. Для акустических исследований использовался импульсный акустический спектрометр с частотой заполнения импульсов 770 МГц [9]. Ультразвуковые волны в виде коротких импульсов с длительностью $t \sim 1$ мкс распространялись вдоль оси [100] образца.

Ярко выраженные аномалии в затухании и скорости продольных и поперечных ультразвуковых волн

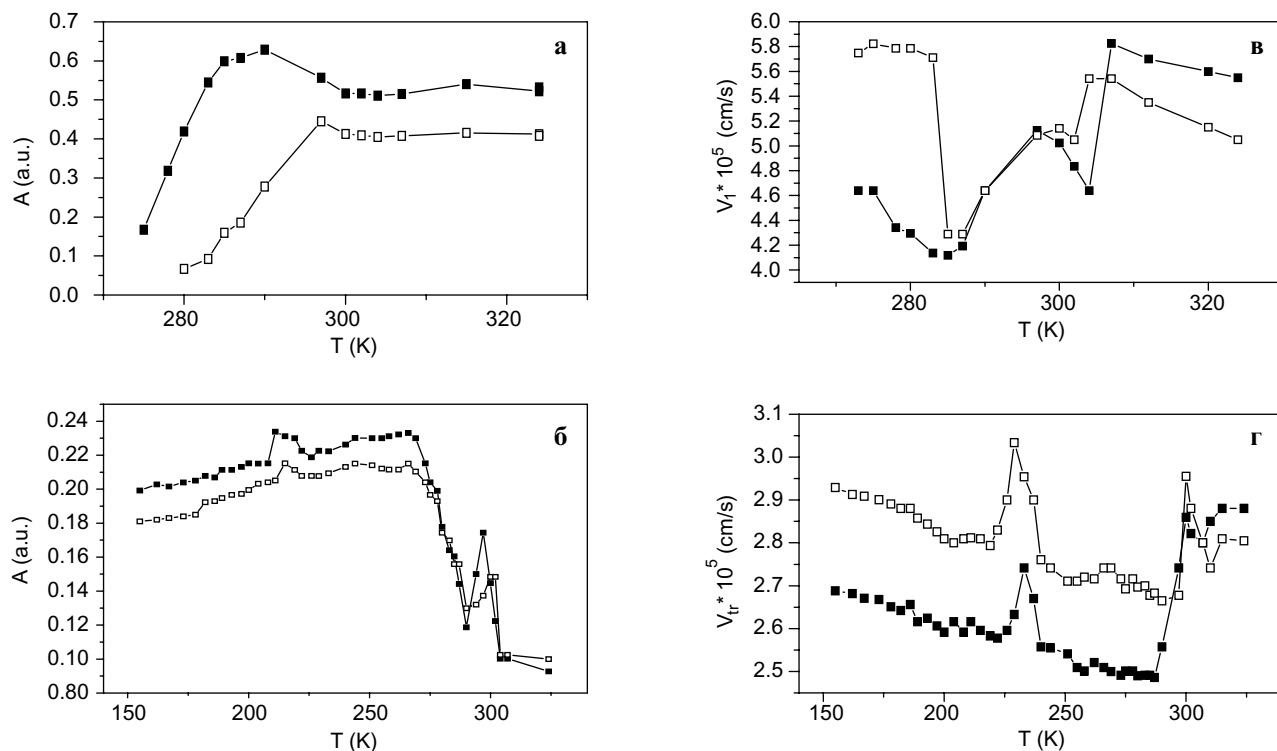


Рис. 1. Температурные зависимости амплитуды продольных (а), амплитуды поперечных (б), скорости продольных (в) и скорости поперечных (г) мод акустических колебаний в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ в поле $H = 0$ кЭ (■) и $H = 10$ кЭ (□).

наблюдались в интервалах температур 310–300, 290–280 и 230–200 К. Также следует отметить увеличение акустической жесткости образца при наложении магнитного поля, а также смещение $A(T)$ приблизительно на ~ 5 К в сторону больших температур (рис. 1).

Поскольку акустические исследования манганитов лантана на частоте 770 МГц были проведены нами впервые, то следовало выяснить, связаны ли обнаруженные аномалии с какими-либо аномалиями других (структурных, магнитных, электрических) свойств исследуемого образца. Поэтому поиск объяснения полученных результатов мы решили начать с изучения структурных и магнитных свойств нашего образца и сравнения их с литературными данными. Это было необходимо сделать для того, чтобы выяснить, нет ли у него каких-либо особенностей по сравнению с образцами манганитов лантана такого же состава, которые исследовались другими авторами.

Рентгеноспектральный анализ

Рентгеноспектральный микроанализ химического состава по La, Sr и Mn проводился на микроанализаторе Superprobe-733 фирмы JEOL. Он позволил исследовать наличие неоднородностей химического состава, размеры которых превышают 0.5 мкм, что значительно меньше длины волны ультразвука ($\lambda = 5$ мкм для частоты 770 МГц). Ни по одному из перечислен-

ных элементов таких неоднородностей выявить не удалось. Это означает, что объяснение акустических аномалий следует связывать со свойствами вещества манганитов, а не с индивидуальными особенностями исследуемого образца.

Магнитные исследования

Магнитные исследования проводились на SQUID-магнитометре фирмы Quantum Design, позволяющем измерять магнитные моменты с точностью до 0.01%. Измерения проводились на незакрепленном образце $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ весом 6.06 мг. На рис. 2 представлены кривые намагничивания, снятые в поле $H = 2$ кЭ в зависимости от температуры при различных режимах охлаждения. Различие кривых $M(H, T)$ для образцов, охлажденных в поле $H = 2$ кЭ и при $H = 0$, означает, что во втором случае возникает магнитная текстура, которая обусловлена разбросом осей легкого намагничивания, а не температур T_c . Таким образом температура 140 К блокирует возникновение магнитной текстуры. Также следует отметить гистерезис в области температур 215–175 К.

Приложение переменного магнитного поля на частоте 80 Гц с амплитудой 4 Э позволило измерить магнитную восприимчивость $\chi = \partial M / \partial H$ исследуемого образца при различных значениях постоянного магнитного поля H (рис. 3).

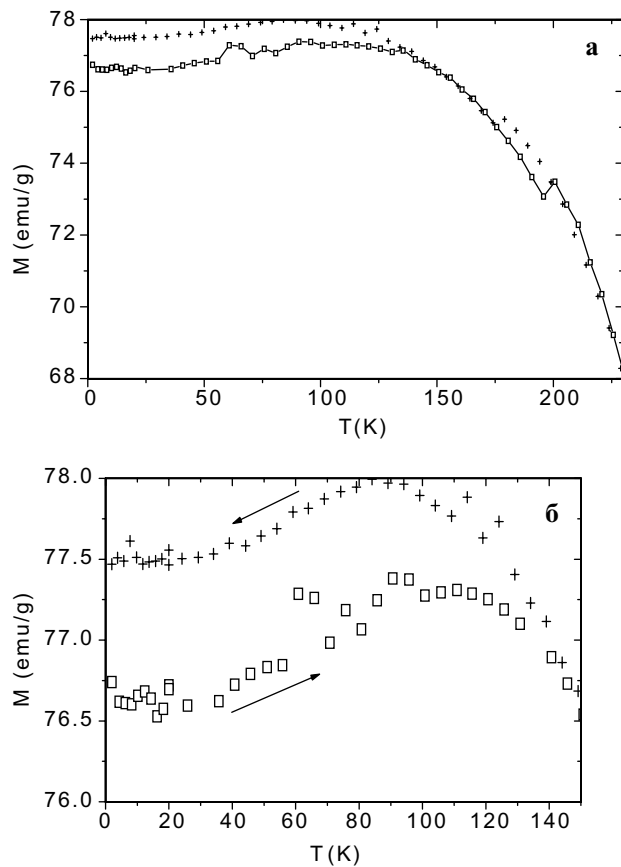


Рис. 2. а Температурные зависимости намагниченности образца $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ при $H = 2$ кЭ при различных режимах охлаждения ($\square$ нагрев образца, охлажденного при $H = 0$; $+$ охлаждение). б Те же данные в увеличенном масштабе.

Поведение $\chi(T)$ на участке от 100 до 250 К для ферромагнетика считается аномальным, так как при намагничивании вдоль легкого направления $\chi(T)$ должно расти, а вдоль трудного направления – не зависеть от T . Для выяснения природы обнаруженной аномалии требуются дополнительные исследования.

Выводы

Совместный анализ температурных акустических аномалий и результатов магнитных измерений позволил сделать однозначный вывод о том, что в окрестностях температур 305 и 210 К в образце с $x = 0.175$ происходит структурный фазовый переход из ромбоэдрической к орторомбической симметрии. Именно эти температурные области структурных фазовых переходов проявляются как пиковые значения КМС [7]. Различие в характере переходов состоит в том, что первый из них (305 К) возникает выше T_c в парамагнитной фазе, а второй

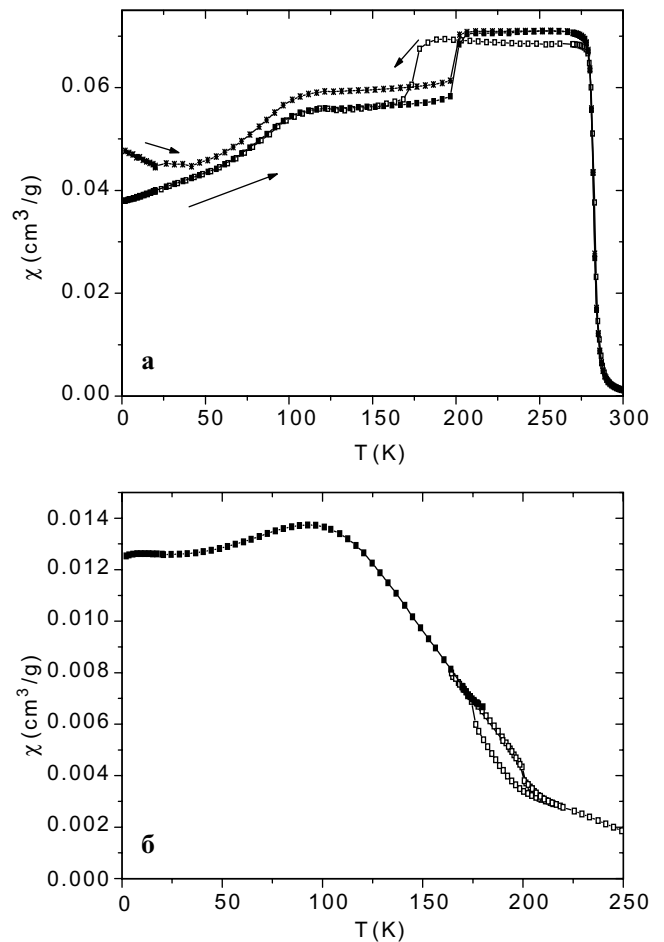


Рис. 3. Зависимость действительной части магнитной восприимчивости в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ от температуры в магнитных полях 0.1 кЭ (а) и 2 кЭ (б) при различных режимах охлаждения: $\blacksquare$ нагрев образца, охлажденного при $H = 0$; $\square$ охлаждение, $*$ нагрев образца, охлажденного при $H = 2$ кЭ.

(210 К) – в ферромагнитной фазе. Резкое затухание продольной моды ниже T_c находит объяснение в магнон-фононном механизме поглощения, по которому затухание для продольных волн пропорционально квадрату частоты.

Приложение магнитного поля практически не влияет на акустические характеристики образца выше T_c , но является причиной увеличения акустической жесткости ниже T_c .

В заключении хотелось бы отметить необходимость продолжения этих исследований с целью изучения зависимости обнаруженных аномалий от амплитуды ультразвука, его частоты, ориентации образца и т.д. Только после этого можно будет делать уверенные выводы о причине наблюдаемых аномалий.

Работа выполнена совместно с Булатовым А.Р., Голенищев-Кутузовым В.А., Капраловым А.В., Куркиным М.И., Шакирзяновым М.М.

Литература

1. Helmolt R., Wecker J., Holzapfel B., Shultz L., Samwer K.: Giant negative magnetoresistance in perovskitelike $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_x$ ferromagnetic films. *Phys. Rev. Lett.* **14**, 2331–2333 (1993)
2. Нагаев Э.Л.: Манганиты лантана и другие магнитные проводники с гигантским магнитосопротивлением. *УФН* **166**, 833–857 (1996)
3. Локтев В.М., Погорелов Ю.Г.: Особенности физических свойств и колоссальное магнитосопротивление манганитов. *ФНТ* **26**, 231–261 (2000)
4. Гайдуков Ю.П., Данилова Н.П., Мухин А.А., Балбашов А.М.: Поведение скоростей звука соединений $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ в окрестности магнитных и структурных фазовых переходов. *Письма в ЖЭТФ* **68**, 141–146 (1998)
5. Darling T.W., Migliori A., Moshopoulon E.G., Trugman A., Neumeier J.J., Sarrao J.L., Bishop A.R., Thomson J.D.: Measurement of the elastic tensor of a single crystal of $\text{La}_{0.83}\text{Sr}_{0.17}\text{MnO}_3$ and its response to magnetic fields. *Phys. Rev. B* **57**, 5093–5097 (1998)
6. Fujishiro H., Ikebe M., Konno Y., Fukase T.: Sound velocity anomaly associated with polaron ordering in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$. *J. Phys. Soc. Japan* **66**, 3703–3705 (1997)
7. Urushibara A., Moritomo Y., Arima T., Asamitsu A., Kido G., Tokura Y.: Insulator-metal transition and giant magnetoresistance in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$. *Phys. Rev. B* **51**, 14103–14109 (1995)
8. Moussa F., Hennion M., Rodrigner-Carvajal J., Moudén H., Dinsard L., Rovcolevischi A.: Spin waves in the antiferromagnet perovskite LaMnO_3 : neutron-scattering study. *Phys. Rev. B* **54**, 15149–15155 (1996)
9. Богданова Х.Г., Голенищев-Кутузов В.А., Леонтьев В.Е., Назипов М.Р., Шакирзянов М.М.: Спектрометр для исследования магнитного резонанса и нелинейных акустических явлений. *ПТЭ* **4**, 60–62 (1997)

Высокочастотная ЭПР спектроскопия пар Cr^{3+} - Cr^{3+} в синтетическом форстерите

В. Ф. Тарасов, Г. С. Шакуров

Лаборатория резонансных явлений

В частотном диапазоне 65–90 ГГц исследованы спектры ЭПР димерных центров примесных ионов хрома в октаэдрически координированных позициях М1 синтетического форстерита. Измерения выполнены при 4.2 К в магнитном поле от -0.04 до 0.3 Тл. Непосредственно в нулевом магнитном поле измерено расщепление между спиновыми подуровнями димера Cr^{3+} - Cr^{3+} $\Delta_{01} = 71.5$ ГГц и $\Delta_{02} = 73.0$ ГГц. Анализ параметров спинового гамильтониана показал, что димерный центр состоит из пары Cr^{3+} ионов с Mg^{2+} вакансией между ними. При этом происходит замена трех ионов Mg^{2+} , расположенных в квазиодномерной цепочке, вытянутой параллельно кристаллической оси c . Определено, что взаимодействие между ионами в димере имеет обменный характер ферромагнитного типа с параметрами $J_z = 0.47$ ГГц и $J_t = 0.69$ ГГц.

Большой интерес к синтетическому форстериту, активированному хромом, возник в конце восьмидесятых годов, когда в нем была обнаружена перестраиваемая лазерная генерация в диапазоне около 1.2 мкм [1]. Кристаллическая структура форстерита имеет ромбическую симметрию с пространственной группой P_{bnn} . Элементарная ячейка кристалла включает 4 формульных группы Mg_2SiO_4 . В структуре форстерита имеется 2 кристаллографически различных типа кислородных октаэдров, внутри которых находятся ионы магния. Эти позиции ионов Mg^{2+} обозначаются М1 и М2. Имеется также тетраэдрически координированная позиция кремния. Ионы хрома могут замещать как ионы магния, так и кремния. Для позиции М1 (C_i) $K_a/K_M = 4/4$, для позиции М2 (C_s) $K_a/K_M = 4/2$, где K_a и K_M кристаллографическая и магнитная кратности соответственно. Кислородные тетраэдры, внутри которых находятся ионы Si^{4+} , также сильно искажены. Точечная группа симметрии кристаллического поля для катиона в этой позиции C_s .

Значительное внимание было уделено характеристике примесных ионов хрома в форстерите. В первых работах [2–4] основное внимание уделялось изучению ионов Cr^{3+} , замещающих Mg^{2+} в позициях М1 и М2. Изучались также парные центры Cr^{3+} - Al^{3+} , в которых ионы Al^{3+} замещают Si^{4+} в ближайшей к Cr^{3+} тетраэдрической позиции. Отмечено, что концентрация парных центров существенно превышала статистическую для данных концентраций ионов Cr^{3+} и Al^{3+} .

После открытия в синтетическом форстерите с хромом эффективной лазерной генерации основное внимание было направлено на идентификацию и изучение активных лазерных центров. Вскоре было установлено, что за генерацию лазерного излучения ответственны ионы Cr^{4+} , замещающие Si^{4+} в тетраэдрической позиции [5–7].

Помимо иона Cr^{4+} и Cr^{3+} , наблюдались резонансные переходы, обязанные другим ионам Cr с целым

спином. В работе [8] было установлено, что эти сигналы обязаны ионам Cr^{2+} в позициях М1 и М2.

Наши эксперименты по высокочастотной ЭПР спектроскопии проводились на монокристаллическом образце Mg_2SiO_4 , активированном хромом. Концентрация ионов Cr определялась с помощью атомно-адсорбционного анализа ($5 \cdot 10^{-3}$ масс.%).

Мы использовали ЭПР спектрометр, перестраиваемый по частоте в диапазоне 65–535 ГГц [9]. Эксперименты проводились при температуре образца 4.2 К в магнитных полях от -0.04 до 0.3 Тл.

Нами наблюдалось большое число резонансных переходов в диапазоне частот 65–90 ГГц, с различными расщеплениями в нулевом поле (РНП). Запись спектров на различных частотах позволила проследить зависимость частот переходов от магнитного поля для наблюдавшихся линий и надежно идентифицировать линии, принадлежащие разным переходам. Благодаря этому были выделены три группы, каждая из которых состоит из четырех резонансных переходов, имеющих одно начальное расщепление и приблизительно линейную зависимость резонансных частот от магнитного поля.

Экспериментальные зависимости резонансных частот от магнитного поля B_0 , полученные для этих переходов при ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel b$, представлены на рис. 1. Типичный спектр, записанный на частоте 82 ГГц для ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel b$ приведен на рис. 2. Здесь линии А, В и С соответствуют переходам с РНП = 66.6, 71.5 и 73.0 ГГц соответственно. Вообще говоря, при ориентации магнитного поля вдоль кристаллографических осей резонансные значения магнитного поля для всех 4 магнитно-неэквивалентных центров на рис. 1 должны совпадать. Раздвигание линий свидетельствует о неточной ориентации магнитного поля относительно оси b .

Ориентационные зависимости свидетельствуют о том, что во всех случаях переходы принадлежат центрам, имеющим по четыре магнитно-неэквивалентные

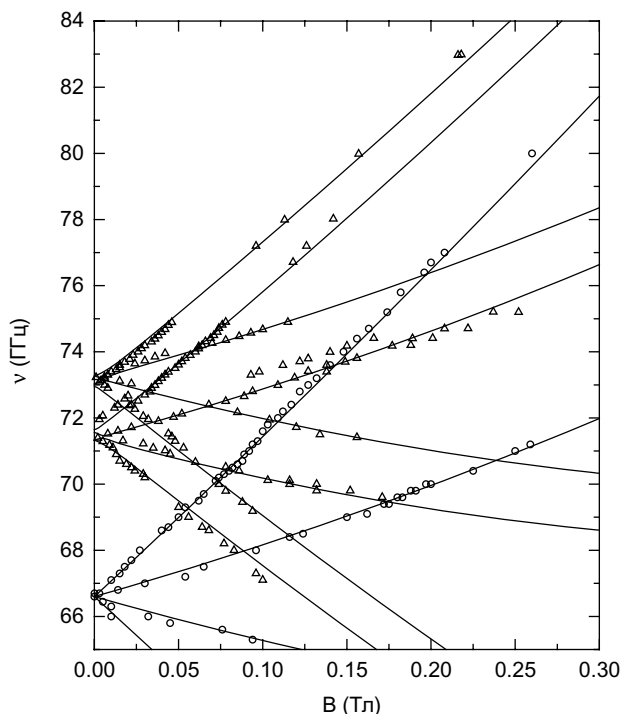


Рис. 1. Зависимость резонансных переходов Cr^{3+} от магнитного поля в синтетическом форстерите для $\mathbf{B}_0 \parallel b$. $\circ$ и Δ эксперимент для изолированного иона и пары ионов соответственно. Линия – теория.

позиции. Четыре резонансных перехода с РНП = 66.6 ГГц являются переходами между основным и возбужденным дублетами изолированного иона Cr^{3+} в позиции М1. Этот центр хорошо изучен ранее и на нем мы останавливаться не будем.

Переходы с РНП = 71.5 и 73.0 ГГц, по нашему мнению, обязаны парному центру $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$, где ионы Cr^{3+} связаны слабым обменным взаимодействием. В

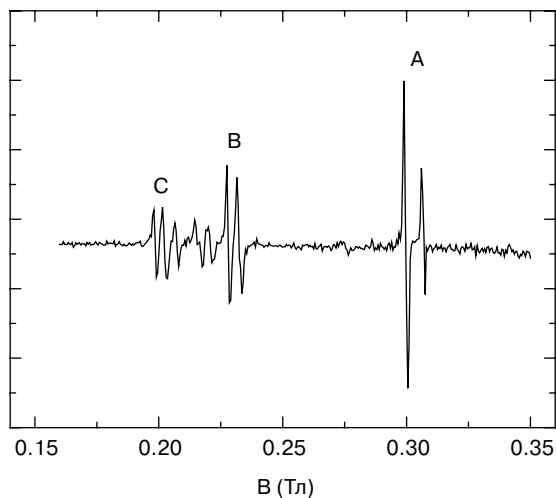


Рис. 2. Экспериментальный спектр Cr^{3+} в синтетическом форстерите. Частота 82 ГГц. $\mathbf{B}_0 \parallel b$. А – изолированный ион, В и С – переходы, принадлежащие димеру.

этом случае нижний орбитальный уровень димера должен состоять из 16 подуровней, разделенных на 3 группы с энергиями около 0, Δ и 2Δ . На рис. 3 приведена полевая зависимость этих уровней, рассчитанная для двух идентичных ионов Cr^{3+} в позиции М1 с параметрами, приведенными в таблицах 1 и 2 для одиночного иона и слабым обменным взаимодействием ферромагнитного типа. Направление магнитного поля выбрано вдоль кристаллографической оси b . Анализ собственных волновых функций димера показывает, что они разделяются на две группы. Десять уровней, показанных на рис. 3 пунктиром, имеют состояния с четными волновыми функциями относительно перестановки ионов в паре, а 6 уровней, показанных сплошными линиями, имеют нечетные собственные волновые функции. Магнитные дипольные переходы разрешены только между уровнями одинаковой четности. Для нечетных состояний они показаны стрелками. Видно, что для этой группы имеется один переход между синглетными состояниями с РНП вблизи 2Δ и 2 группы по 4 перехода между уровнями квартета с РНП около Δ и двумя синглетами. Очевидно, что между уровнями с четными состояниями также могут наблюдаться 24 перехода с РНП около Δ , разрешенные с разной степенью вероятности. Отметим, что в отличие от уровней с четными состояниями уровни энергии подгруппы с нечетными состояниями в пер-

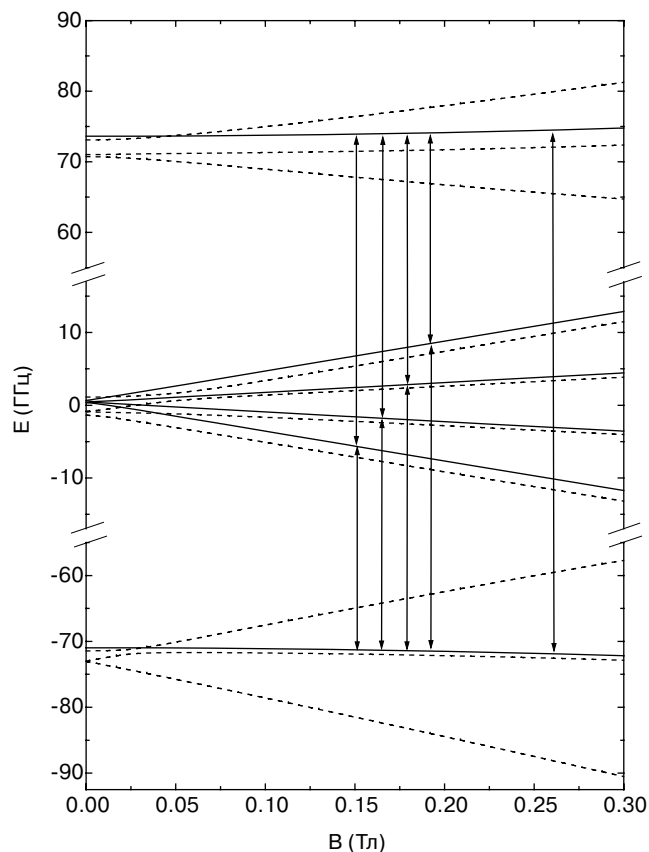


Рис. 3. Энергетические уровни пары $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ в форстерите.

Таблица 1. Параметры СГ иона Cr^{3+} в октаэдрической позиции М1 в форстерите.

Параметр	Изолированный ион	Димер
D (ГГц)	-29.35 ± 0.5	-31.98 ± 0.5
E (ГГц)	-9.08 ± 0.5	-9.60 ± 0.5
$3E/D$	0.928	0.90
Δ (ГГц)	66.6	
g_x	1.952 ± 0.02	1.945 ± 0.02
g_y	2.055 ± 0.02	1.877 ± 0.02
g_z	1.823 ± 0.02	1.99 ± 0.02
J_z (ГГц)		0.474 ± 0.02
J_t (ГГц)		0.688 ± 0.02

вом порядке зависят от B_0 линейно. В этих условиях изучение зависимости энергий переходов от магнитного поля позволяет легко идентифицировать переходы второй группы. Мы полагаем, что 2 квартета на рис. 1 с РНП = 71.5 и 73.0 ГГц являются именно такими переходами.

Для описания парного центра мы использовали спиновый гамильтониан вида

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 - J_z S_{z1} S_{z2} - J_t (S_{x1} S_{x2} + S_{y1} S_{y2}),$$

где $\mathcal{H}_i$ – спиновый гамильтониан одиночного иона вида

$$\mathcal{H}_i = \sum_{i=x,y,z} \beta g_i S_i B_i + D \left[S_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + E(S_x^2 - S_y^2),$$

J_z and J_t параметры спин-спинового взаимодействия. Подгонка параметров СГ для наилучшего описания экспериментальных результатов показала, что пара состоит из ионов с идентичными параметрами СГ, приведенными в таблицах 1 и 2.

Величины $J_z = 0.47$ and $J_t = 0.69$ не сильно отличаются друг от друга. Это свидетельствует о том, что взаимодействие между ионами имеет почти изотропный характер, а отсутствие зависимости величины расщепления между квартетами с РНП = 71.5 и 73.0 ГГц на рис. 1 от ориентации магнитного поля свидетельствует об обменном характере взаимодействия. Знак параметров J определялся по относительной интенсивности переходов двух квартетов. На рис. 2 вид-

Таблица 2. Ориентация главных магнитных осей изолированного иона и парного центра Cr^{3+} .

Центр	Ось	θ (град)	φ (град)
Изолированный ион	OX	129.0	91.8
	OY	43.3	137.6
	OZ	65.0	24.0
Димер	OX	51.6	111.3
	OY	74.0	8.3
	OZ	137.0	80.3

но, что линии С, соответствующие переходу с РНП = 73 ГГц, имеют меньшую амплитуду сравнительно с линиями В и А, принадлежащими переходам димера с РНП = 71.5 ГГц и одиночного иона соответственно. Экспериментальное отношение амплитуд линий с РНП = 73 и 71.5 ГГц равно $A_{1e}/A_{2e} = 0.48$, тогда как при теоретическом отношении, рассчитанном для перехода с возбужденного состояния с энергией 73 ГГц при 4.2 К, $A_{1t}/A_{2t} = 0.45$. Это говорит о том, что переход с РНП = 73 ГГц является переходом с возбужденного уровня, что соответствует ферромагнитному характеру взаимодействия ионов в паре.

На спектре рис. 2 хорошо видно, что линии А, принадлежащие одиночному иону Cr^{3+} в разных магнитно-неэквивалентных позициях, сравнимы по амплитуде с линиями димера. Это свидетельствует о сравнимости концентраций изолированных ионов и парных центров, поскольку параметры СГ в обоих случаях близки, и вероятности переходов для этих центров не должны сильно отличаться. Это указывает на наличие какого-то механизма, способствующего объединению ионов в пары. Один из возможных механизмов такого рода был обнаружен в кристаллах CsMgCl_3 , CsMgBr_3 и CsCdBr_3 , допированных ионами хрома и редкоземельными ионами [10–14]. В этих кристаллах трехвалентные ионы замещают двухвалентные катионы, расположенные в виде квазиодномерных линейных цепочек. При этом образуются димеры (Cr^{3+} -катионная вакансия- Cr^{3+}), что электростатически эквивалентно трем двухвалентным ионам. Таким образом сохраняется зарядовый баланс. Подобный механизм возможен и в нашем случае. В форстерите расстояние между соседними ионами Mg^{2+} в цепочке, вытянутой вдоль оси c , $c/2 \approx 0.3$ нм, а расстояние между соседними цепочками $\sqrt{(b/2)^2 + (a/2)^2} = 0.56$ нм. Таким образом цепочки Cr^{3+} в позициях М1 могут рассматриваться как квазиодномерные. Соседние ионы в цепочке кристаллографически различны, и направления главных магнитных осей для этих ионов не совпадают. В то же время, по нашим данным, оба иона Cr^{3+} в паре имеют одинаковые ориентации главных магнитных осей. Это возможно, если в форстерите аналогично CsCdBr_3 происходит образование симметричных димеров (Cr^{3+} -Mg вакансия- Cr^{3+}). Для несимметричного димера (Cr^{3+} - Cr^{3+} -Mg вакансия) условие электронейтральности также выполняется, однако его образование энергетически менее выгодно из-за более сильного кулоновского взаимодействия близко расположенных трехвалентных ионов.

Литература

1. Petricevic V., Gayen S.K., Alfano R.R., Yamagishi K., Anzai H., Yamaguchi Y.: Laser action in chromium-doped forsterite. Appl. Phys. Lett. **52**, 1040–1042 (1988)

2. Rager H.: Electron spin resonance of trivalent chromium in forsterite Mg_2SiO_4 . *Phys. Chem. Minerals* **1**, 371–378 (1977)
3. Бершов Л.В., Минеева Р.М., Сперанский А.В., Хафнер С.: Об изоморфизме хрома в оливинах. *ДАН* **260**, 191–194 (1981)
4. Bershov L.V., Gaite J.-M., Rager H.: Electron paramagnetic resonance and ENDOR studies of Cr^{3+} - Al^{3+} pairs in forsterite. *Phys. Chem. Minerals* **9**, 95–101 (1983)
5. Jia W., Liu H., Jaffe S., Yen W.M., Denker B.: Spectroscopy of Cr^{3+} and Cr^{4+} ions in forsterite. *Phys. Rev. B* **43**, 5234–5242 (1991)
6. Petricevic V., Gayen S.K., Alfano R.R.: Laser action in chromium-activated forsterite for near-infrared excitation: Is Cr^{4+} the lasing ion? *Appl. Phys. Lett.* **53**, 2590–2592 (1989)
7. Hoffman K.R., Casas-Gonsales J., Jacobsen S.M., Yen W.M.: Electron-paramagnetic-resonance and fluorescence-line-narrowing measurements of the lasing center in Cr-doped forsterite. *Phys. Rev. B* **44**, 12589–12592 (1991)
8. Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С., Гавриленко А.Н.: ЭПР ионов хрома в синтетическом форстерите в субмиллиметровом диапазоне. *ФТТ* **37**, 499–504 (1995)
9. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Submillimeter EPR spectrometer. *Appl. Magn. Reson.* **2**, 571–576 (1991)
10. McPherson G.L., Henling L.M.: Electron paramagnetic resonance spectrum of exchange-coupled pairs of Gd^{3+} ions in single crystals of CsMgCl_3 . *Solid State Commun.* **19**, 3–56 (1976)
11. Henling L.M., McPherson G.L.: EPR spectra of magnetically coupled pairs of Gd^{3+} ions in single crystals of CsMgCl_3 , CsMgBr_3 and CsCdBr_3 . *Phys. Rev. B* **16**, 4756–4760 (1977)
12. McPherson G.L., Devaney K.O.: EPR spectra of Cr^{3+} and Cr^{4+} centers in the linear-chain lattices, CsMgCl_3 , CsMgBr_3 and CsCdBr_3 . *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **13**, 1735–1743 (1980)
13. Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С., Малкин Б.З., Исхакова А.И., Гебер И., Альтвайн М.: Субмиллиметровые спектры электронно-ядерных возбуждений в кристаллах $\text{CsCdBr}_3\text{:Ln}^{3+}$ ($\text{Ln} = \text{Tm}, \text{Ho}$). *Письма в ЖЭТФ* **65**, 559–565 (1997)
14. Malkin B.Z., Iskhakova A.I., Tarasov V.F., Shakurov G.S., Heber J., Altwein M.: Submillimeter EPR spectroscopy of lanthanide compounds: Pair centers of Ho^{3+} in CsCdBr_3 . *J. Alloys and Compounds* **275-277**, 209–213 (1998)

Взаимодействие неравновесных фононов различных поляризаций с оптически возбужденными примесными центрами

А. М. Шегеда

Лаборатория резонансных явлений

Рассмотрено влияние неравновесных баллистических тепловых фононов на оптически возбужденные центры в рубине с концентрацией ионов Cr^{3+} 0.1%. Детектором фононов служил сигнал обращенного светового эха. Показано, что изменение сигнала эха связано с неоднородностью сдвига оптических частот примесей неравновесными фононами. Влияние фононов поперечных поляризаций на эхо зависит от направления их распространения относительно оси C_3 кристалла.

Введение

Фононы, описывающие колебания кристаллической решетки, могут быть возбуждены в твердых телах любого типа – диэлектриках, металлах, полуметаллах, полупроводниках и этим отличаются от более специфических возбуждений, таких как электроны, экситоны, магноны и т.д. Особый интерес представляет область фононов терагерцовой ($\nu > 0.2 \cdot 10^{12}$ Гц) частоты, поскольку эти фононы определяют большинство низкотемпературных свойств веществ. Однако, поведение терагерцевых фононов изучено недостаточно, значительно хуже, чем, например, электронов. Это связано с тем, что обычные ультразвуковые методы исследования кристаллов, в которых акустические фононы возбуждаются и детектируются с помощью пьезопреобразователей, становятся малоэффективными при частотах $\nu > 10^{10}$ Гц в основном из-за того, что требования к обработке образцов становятся невыполнимыми. Предельные частоты, достигнутые в этом направлении, почти не захватывают область тепловых возбуждений кристалла.

Первые эксперименты по генерации и детектированию акустических фононов с частотой $10^{11} \div 10^{12}$ Гц были проведены Гутфельдом и Нетеркотом в 1964 г. [1].

Высокочастотные фононы неконтролируемым образом возбуждались и раньше, например, в экспериментах по измерению теплопроводности, но там имели дело со стационарным фоновым распределением и изучали характеристики фононов, усредненные по частотам, поляризациям и направлениям распространения. В отличие от этого, в [1] по образцу распространялся короткий импульс неравновесных фононов (НФ). Это дало возможность при гелиевых температурах, когда длина свободного пробега L_ϕ характерных тепловых фононов была большей или сравнимой с длиной образца и большая часть фононов распространялась по образцу не рассеиваясь (баллистически), измерить пролетное время и эффективную груп-

повую скорость как продольных, так и поперечных фононов. Если размеры генератора и детектора фононов достаточно малы по сравнению с размерами кристалла, то можно изучать свойства фононов, распространяющихся в определенном направлении по отношению к осям кристалла [2].

Эти эксперименты положили начало новому направлению исследований – физике неравновесных высокочастотных фононов.

Вопрос о взаимодействии неравновесных тепловых фононов с оптически возбужденными ионами Cr^{3+} в рубине рассматривался нами еще несколько лет назад. Раньше для возбуждения светового эха (СЭ) использовался низкотемпературный рубиновый лазер, работавший с частотой ~ 0.02 Гц. Такая низкая частота повторения накладывала существенные ограничения на точность и достоверность результатов эксперимента, т.к., к сожалению, сигнал СЭ, как правило, нестабилен по амплитуде и его приходится накапливать и усреднять. Поэтому некоторые вопросы механизма взаимодействия фононов с оптически возбужденными центрами остались невыясненными.

В настоящей работе, выполненной вместе с В. Н. Лисиным и В. А. Зуйковым, для возбуждения СЭ в рубине использовался перестраиваемый лазер на красителе (оксазин 1), возбуждаемом второй гармоникой ИАГ:Nd лазера. Это позволило почти на три порядка повысить частоту следования возбуждающих импульсов и применить для управления экспериментом и регистрации сигналов автоматизированную систему сбора и обработки данных, управляемую ix86-компьютером.

Эксперимент и результаты

Блок-схема экспериментальной установки приведена на рис. 1.

Образец рубина с концентрацией ионов Cr^{3+} 0.1% находился в гелиевом криостате при температуре 2 К.

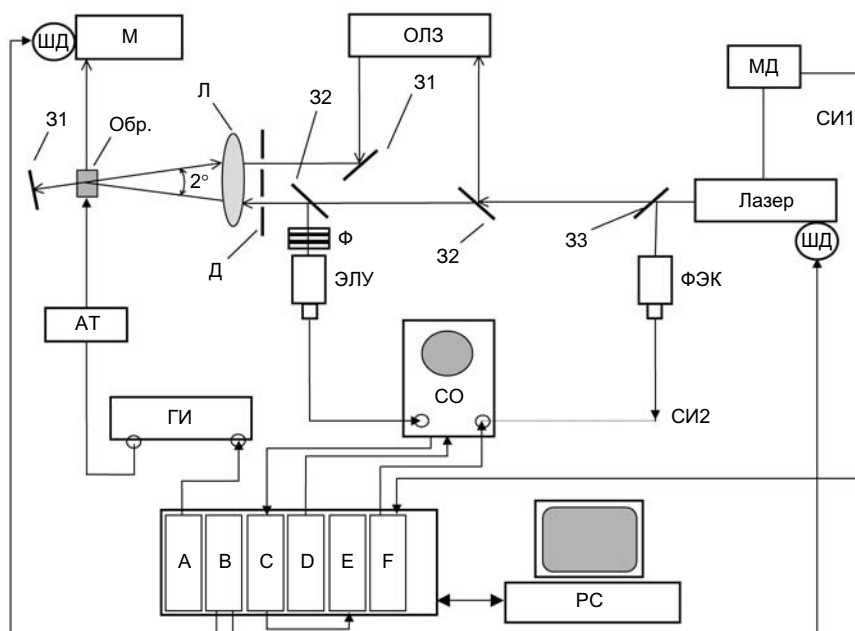


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки. 31 – зеркало с коэффициентом отражения $R \sim 100\%$; 32 – зеркало с $R \sim 40\%$; 33 – стеклянная пластина; Ф – набор нейтральных светофильтров; Л – линза с фокусным расстоянием $F = 20 \div 50$ см; Д – диафрагмы; ОЛЗ – оптическая линия задержки; АТ – аттенюатор; ГИ – генератор наносекундных импульсов; СО – стробоскопический осциллограф; Обр. – образец; ЭЛУ – скоростной фотоумножитель ЭЛУ-ФТ; ФЭК – коаксиальный фотоэлемент ФЭК-15; ШД – шаговые двигатели; СИ1(2) – синхроимпульсы; М – монохроматор; МД – модулятор электрооптического затвора; А – модуль программируемой задержки наносекундного диапазона; В – модуль управления шаговыми двигателями; С – блок подавления шума и дрейфа СО; D – модуль ЦАП; Е – модуль АЦП; F – блок синхронизации.

Регистрация, накопление и обработка сигнала осуществлялась автоматизированным комплексом, включающем в себя 10-разрядный АЦП для регистрации амплитуд исследуемых импульсов, 10-разрядный ЦАП для управления разверткой стробоскопического осциллографа, модули программируемой задержки наносекундного диапазона, управления исполнительными

механизмами (шаговыми двигателями, реле, заслонками), а также блок подавления шума и дрейфа стробоскопического осциллографа.

Неравновесные тепловые фононы (ГИ) инжектировались в образец подачи прямоугольных импульсов тока (длительностью 10, 14, 17 или 28 нс) на тонкопленочный (~ 600 Å) медный нагреватель, напылен-

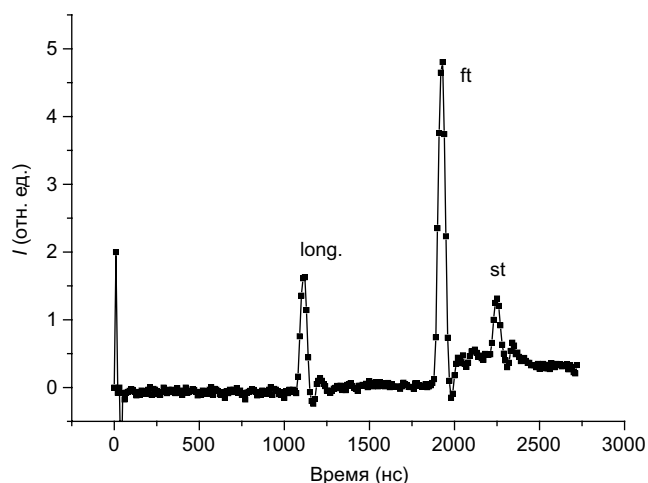
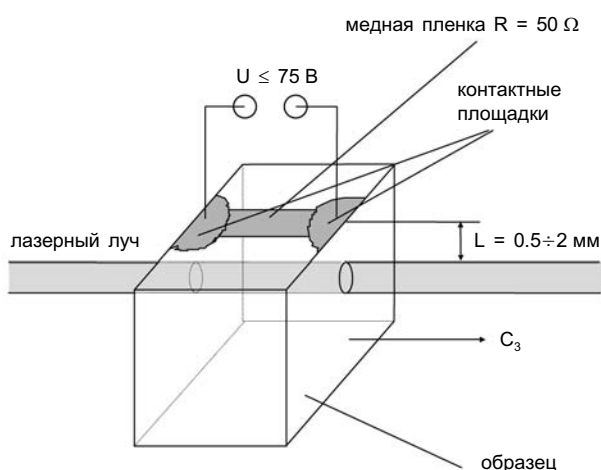


Рис. 2. Образец с напыленным нагревателем (медная полоска шириной $0.5 \div 1$ мм). Расстояние между нагревателем и пересекающимися в образце лазерными лучами (показан только один луч) меняется с точностью 0.01 мм. Справа приведена оциллограмма неравновесных тепловых фононов, прошедших в рубине расстояние 1.2 см перпендикулярно оси C_3 при температуре $T = 2$ К. В качестве детектора использовался сверхпроводниковый индиевый болометр. Видны хорошо разрешенные продольная long. мода ($V_l = 11.1 \cdot 10^5$ см/с), быстрая ft и медленная st поперечные моды ($V_{ft} = 6.6 \cdot 10^5$ см/с, $V_{st} = 5.8 \cdot 10^5$ см/с).

ный на один из торцов кристалла (рис. 2). При этом фононы разных поляризаций (со средней частотой $\omega \sim 3kT_H/\hbar$, где T_H – температура нагревателя) распространяются в образце с разной скоростью. Для наглядности на этом же рисунке приведена осциллограмма ТИ, прошедших через образец.

В нашем случае детектором неравновесных фононов служил сигнал обращенного СЭ, формируемого на расстоянии L от поверхности, на которую напылен нагреватель. Как видно из рис. 2, для того, чтобы после подачи импульса тока фононы попали в оптически возбужденный объем кристалла одновременно с лазерным импульсом (длительностью на полувысоте $t = 8$ нс), требуется некоторое время. В зависимости от расстояния L это время для наиболее быстрых фононов продольной поляризации составляет $50 \div 200$ нс и почти в два раза больше для фононов поперечных поляризаций. Следовательно, импульс тока необходимо подавать заранее, до подачи лазерных импульсов, поэтому, в дальнейшем, на графиках, где приведена зависимость сигнала СЭ от времени, нас будут интересовать только экспериментальные точки, находящиеся на временной шкале левее первого лазерного импульса. Остальные точки обусловлены влиянием неоднородного электрического поля, возникающего при подаче импульса тока, и здесь рассматриваться не будут. На графиках они играют роль временных меток. Под относительной интенсивностью эха на графиках понимается следующая величина:

$$I_R = \frac{J(U \neq 0) - J_n}{J(U = 0) - J_n},$$

где из сигнала эха с фононами ($J(U \neq 0)$) и без фононов ($J(U = 0)$) вычитается сигнал J_n наводок (фон, электромагнитные помехи и т.п.).

Ранее, чтобы объяснить экспериментальные результаты, в работе [3], где наблюдалось восстановление сигнала эха при подаче двух тепловых импульсов, мы предполагали, что неравновесные фононы могут приводить к сдвигу частот примесей. При этом теоретические кривые удовлетворительно описывали экспериментальную зависимость интенсивности СЭ от времени подачи фонованного импульса в двух взаимоисключающих случаях: 1) сдвиг частоты имеет разный знак для двух типов ионных мест (псевдоштарковский эффект), но для каждой группы ионов Cr^{3+} одинаков во всем объеме кристалла, где формируется эхо, 2) псевдоштарковский эффект отсутствует, но сдвиг оптических частот неоднороден вдоль лазерного луча за счет конечности размеров генератора фононов.

Во втором случае, чем более протяженным будет объем кристалла, где формируется эхо, тем больше вероятность образования неоднородностей в сдвиге оптических частот. Изменить этот объем можно, используя для фокусировки лазерных лучей линзы с

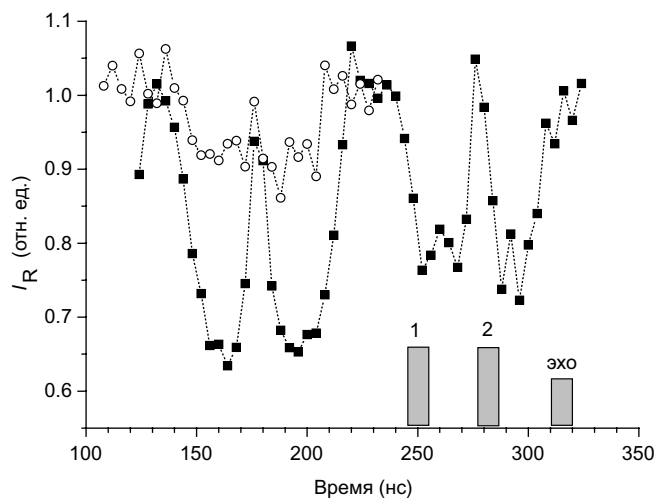


Рис. 3. Зависимость относительной интенсивности сигнала СЭ I_R в рубине от времени подачи на нагреватель импульсов тока длительностью $t = 10$ нс при различной фокусировке лазерных импульсов. Задержка между лазерными импульсами $t_{12} = 32$ нс. Расстояние между нагревателем и лазерными импульсами $L = 1.2$ мм. ■ $F = 50$ см, ○ $F = 20$ см.

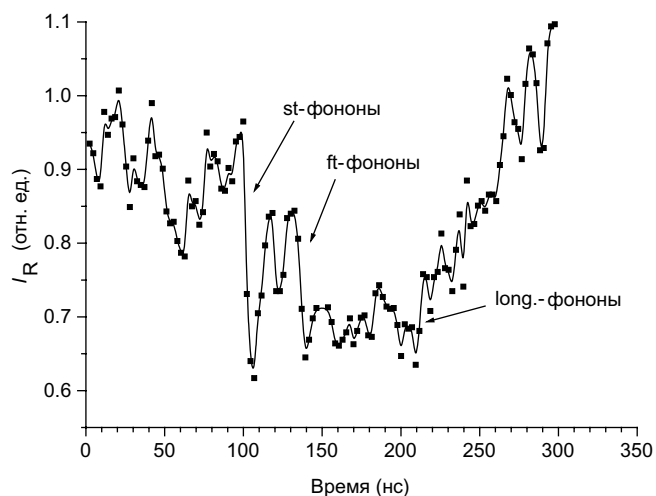
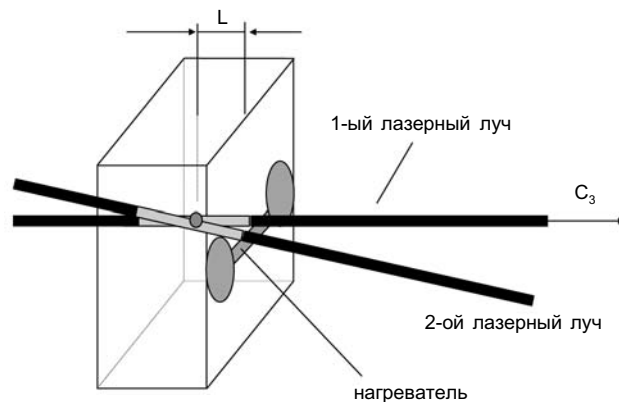


Рис. 4. Зависимость относительной интенсивности сигнала СЭ при подаче фонованного импульса длительностью 10 нс вдоль оси C_3 . Задержка между оптическими импульсами $t_{12} = 30$ нс. Первый лазерный импульс приходит при $t = 271$ нс. Наверху показана геометрия эксперимента. Расстояние L меняется продольным микрометрическим перемещением фокусирующей линзы (■ $L = 1$ мм).

разным фокусным расстоянием. Результат приведен на рис. 3.

Мы видим, что влияние тепловых фононов заметно уменьшается (“провалы” при временах ~ 165 и 195 нс) при использовании короткофокусной линзы, когда объем кристалла, где формируется СЭ, существенно меньше.

Если неравновесные баллистические фононы распространяются перпендикулярно оси C_3 кристалла (см. рис. 2), мы практически не видим никакого влияния фононов поперечных поляризаций. В то же время, как следует из того же рисунка, их интенсивность достаточно велика.

Чтобы прояснить ситуацию, мы напылили нагреватель так, чтобы фононы инжектировались вдоль оси C_3 . Результат приведен на рис. 4.

Первый резкий провал при временах ~ 105 нс соответствует приходу в возбужденный объем между первым и вторым лазерными импульсами фононов медленной поперечной поляризации. Второй провал (~ 140 нс) соответствует приходу фононов быстрой поперечной поляризации.

Выводы

Основное влияние неравновесных баллистических фононов на сигнал СЭ связано с неоднородностью сдвига оптических частот примесей в возбуждаемом объеме (псевдоштарковский эффект отсутствует).

Влияние фононов поперечных поляризаций на эхо сильно зависит от направления их распространения относительно оси C_3 кристалла.

Литература

1. Gutfeld R.J., Nethercot Jr. A.H.: Heat pulses quartz and sapphire at low temperatures. *Phys. Rev. Lett.* **12**, 641 (1964)
2. Левинсон И.Б.: Генерация и детектирование фононов больших энергий. Сб. “Физика фононов больших энергий”, стр. 5–35. Москва: Мир 1976.
3. Lisin V.N., Shegeda A.M., Khabibullin B.M., Zuikov V.A.: Optical phase shift by noncoherent heat phonons. *Proc. SPIE* **3239**, 63 (1997)
4. Лисин В.Н., Шегеда А.М., Хабибуллин Б.М., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Взаимодействие оптической когерентно возбужденной примесной системы с импульсами тепловых баллистических фононов. *Известия РАН, сер. физ.* **63**, 1076 (1999)

Магнитное двулучепреломление ультразвука в гематите

С. А. Мигачев, И. Ш. Ахмадуллин

Лаборатория резонансных явлений

В легкоспектоном антиферромагнетике $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ впервые обнаружено индуцированное магнитным полем изменение скорости распространения акустических волн (магнитное двулучепреломление звука) вдоль тригональной оси. Установлено влияние кристаллографической магнитной анизотропии на двулучепреломление звука. Оценены константы гексагональной анизотропии.

Эффект Коттона-Мутона-Фогта, заключающийся в возникновении двулучепреломления света в среде, помещенной во внешнее магнитное поле, известен в оптике. В работах [1, 2] было показано, что в антиферромагнетиках должен существовать акустический аналог указанного эффекта, рассмотрены его особенности в указанных веществах. Детальный теоретический анализ для гематита ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) показал, что в силу достаточной величины эффекта этот материал может иметь перспективы технических применений, в частности, для управления поляризацией, интенсивностью ультразвука, а также, в небольших пределах, направлением распространения.

Нами были исследованы особенности распространения поперечных акустических волн в гематите вдоль тригональной оси. Схема эксперимента показана на рис. 1. Сдвиговые акустические колебания возбуждались и детектировались с использованием пластинчатых пьезопреобразователей LiNbO_3 X-срезы. Пьезопреобразователи располагались так, что возбуждаемая и принимаемая ими акустические волны имели параллельные поляризации (в ряде экспериментов перпендикулярные). В эксперименте наблюдались осцилляции амплитуды сигнала на приемном пьезопреобразователе в зависимости от величины магнитного поля (рис. 2, кривая 1).

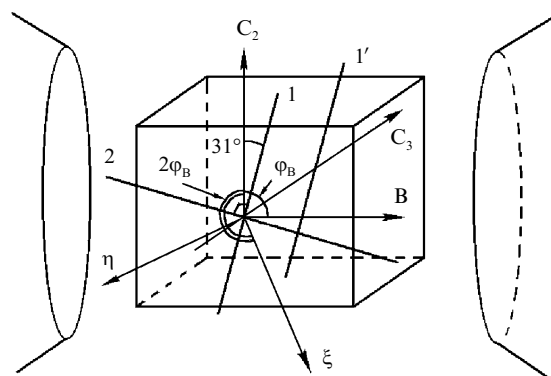


Рис. 1. Схема эксперимента. 1, 2 – направления поляризаций передающего преобразователя, 1' – приемного. ξ и η совместно с C_3 образуют плоскости поляризации нормальных мод.

Согласно [1, 2] ориентация координатных осей ξ и η нормальных магнитоакустических мод зависит от угла φ_B между направлением магнитного поля $\mathbf{B}$ и оси C_2 . Поворот кристалла в магнитном поле в легкой плоскости на угол φ_B приводит к повороту системы координат, связанной с нормальными модами (ξ , η) на угол $-2\varphi_B$ (рис. 1). Поэтому поворотом образца с присоединенными пьезопреобразователями можно выбирать требуемое направление поляризации нормальных мод, например, возбуждать ту или иную нормальную моду или их комбинацию. На рис. 2а кривая 1 соответствует возбуждению нормальных мод с одинаковой амплитудой. Наличие осцилляций свидетельствует об изменении состояния поляризации выходной акустической волны вследствие появления зависимости скоростей магнитоупругих мод от величины магнитного поля. Кривая 2 на рис. 2а иллюстрирует вариант с ортогональным расположением поляризаций пьезопреобразователей, когда поляризация возбуждаемой ультразвуковой волны совпадает

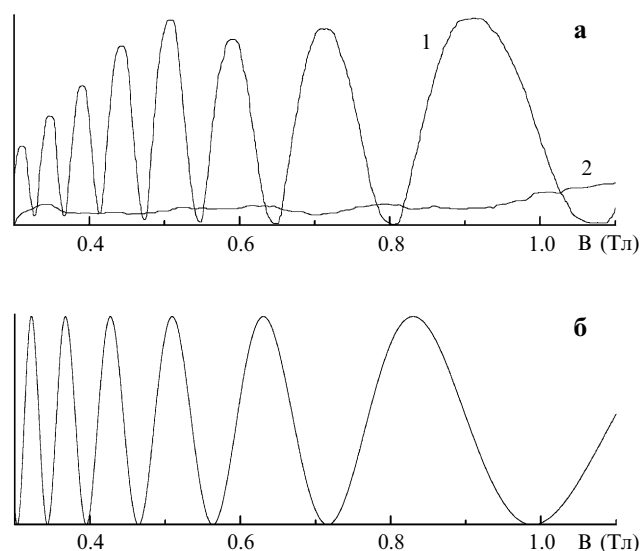


Рис. 2. Осцилляции амплитуды сигнала на приемном преобразователе. а Эксперимент, угол между плоскостями генерируемой волны и нормальной моды $\xi = 45^\circ$ (1), 0° (2). б Теория.

ет с поляризацией магнитоупругой моды ξ . Мода η при этом не возбуждается, о чем свидетельствует отсутствие осцилляций.

Для сравнения полученных данных с теорией [1], запишем выражение для интенсивности I прошедшего поперечного звука в виде (для скрещенных поляризаций передающего и приемного преобразователей):

$$I = U_0^2 \cos^2(\varphi_0 + \psi) \sin^2\left(\frac{\Delta k h}{2}\right). \quad (1)$$

В (1) φ_0 – угол между направлением вектора поляризации возбуждаемого звука и направлением поляризации нормальной моды ξ , ψ – угол между вектором поляризации приемного пьезопреобразователя и направлением поляризации нормальной моды ξ , h – толщина образца и Δk определяется выражением

$$\Delta k = 2\pi f \left(\frac{1}{V_\xi} - \frac{1}{V_\eta} \right), \quad (2)$$

где f – частота заполнения зондирующего импульса, $V_{\xi, \eta}$ – скорости нормальных мод ξ и η :

$$V_\xi = \sqrt{C_{55}^{\text{eff}} / \rho}, \quad V_\eta = \sqrt{C_{44}^{\text{eff}} / \rho}, \quad (3)$$

$$C_{55}^{\text{eff}} = C_{44} - \frac{H_E (2B_{14})^2}{M_0 [B(B + H_D) + 2H_E H_{\text{mel}}]}. \quad (4)$$

В выражениях (3–4) C_{ij} – упругие константы, ρ – плотность кристалла, B_{14} – константа магнитоэлектричества, H_E , H_D – эффективные поля однородного обмена и Дзялошинского соответственно, M_0 – намагниченность подрешеток, H_{mel} – эффективное магнитоупругое поле, обусловленное спонтанными магнитоэлектрическими деформациями. Результаты расчетов по формулам (1–4) представлены на рис. 2б. Можно констатировать удовлетворительное согласие теории и эксперимента.

При повороте кристалла в магнитном поле было обнаружено, что положения экстремумов осцилляций регулярно смещаются по магнитному полю. Рисунок 3 иллюстрирует обнаруженную зависимость положения максимумов осцилляций от угла φ_B между направлениями магнитного поля и оси симметрии второго порядка кристалла. Следует обратить внимание, что симметрия наблюдаемой картины близка к гексагональной.

Для учета кристаллографической анизотропии запишем добавку к полной плотности магнитоупругой энергии гематита в виде [3]:

$$F(\delta\varphi) = d \sin 3(\varphi_B + \delta\varphi) + e \cos 6(\varphi_B + \delta\varphi), \quad (5)$$

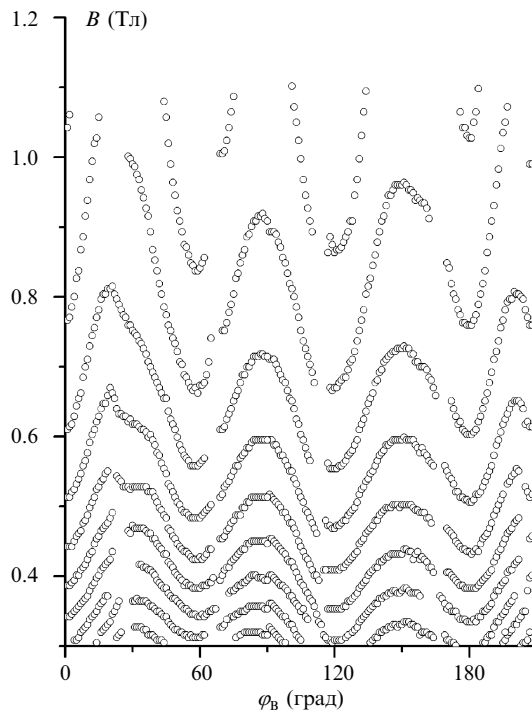


Рис. 3. Зависимость положений максимумов осцилляций от угла φ_B (эксперимент).

в котором первое слагаемое описывает тригональную анизотропию, а второе – гексагональную, $\delta\varphi$ – угол между намагниченностью и магнитным полем в системе, возмущенной звуком, d , e – константы анизотропии. Тогда скорости магнитоупругих мод примут вид:

$$V_\eta = \sqrt{C_\eta(B, \varphi_B) / \rho}, \quad V_\xi = \sqrt{C_\xi(B, \varphi_B) / \rho}, \quad (6)$$

где перенормированные упругие постоянные $C_{\eta, \xi}$ определяются из выражений:

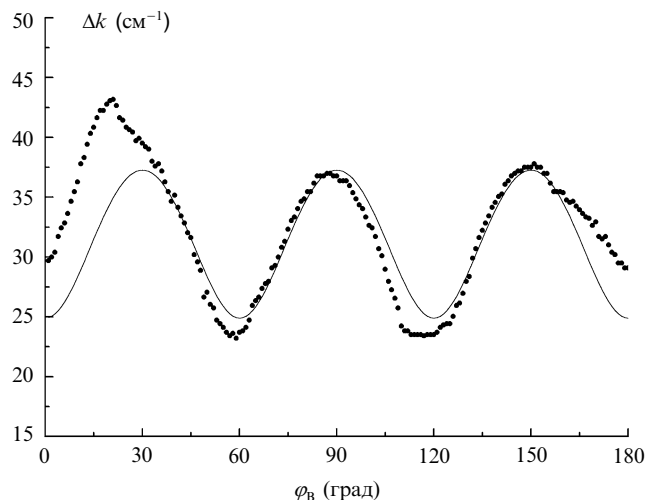


Рис. 4. Экспериментальная (точки) и теоретическая (линия) зависимости Δk от величины угла φ_B .

$$C_{\eta, \xi} = C_{44} - \frac{2B_{14}^2}{M(B)B} \left[1 \mp \sqrt{\left(1 + \frac{2A}{M(B)B} \right)^2 + \frac{8D^2}{M^2(B)B^2}} \right] - \frac{8AB_{14}^2}{M^2(B)B^2},$$

где

$$A = 4.5d \sin 3\varphi_B + 13e \cos 6\varphi_B,$$

$$D = 6e \sin 6\varphi_B - 3d \cos 3\varphi_B,$$

$$M(B)B = \frac{M_0}{H_E} [2H_{\text{meI}}H_E + B(B + H_D)].$$

Из данных, приведенных на рис. 3, были определены значения Δk как функции от угла φ_B для поля $B = 0.7$ Тл. Полученные значения представлены на рис. 4 точками. Там же сплошной линией представлены результаты, полученные в соответствии с уравне-

ниями (2, 6) для значений констант анизотропии: $d = 0$, $e = -12 \cdot 10^{-4}$ Тл.

Отрицательное значение константы e соответствует тому, что осями легкого намагничивания гематита, т.е. направлениями с минимальной внутренней энергией являются оси симметрии второго порядка.

Понижение температуры измерений до $T \approx 260$ К приводило к исчезновению наблюдаемых осцилляций амплитуды. Вблизи указанной температуры эксперимента характер эффекта зависел и от величины магнитного поля.

Литература

1. Туров Е.А.: Акустический эффект Коттона-Мутона в антиферромагнетиках. ЖЭТФ **96**, 2140 (1989)
2. Туров Е.А., Колчанов А.В., Меньшенин В.В., Мирсаев И.Ф., Николаев В.В.: Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. Москва: Физматлит 2001.
3. Богданов А.А.: Магнитная анизотропия в базисной плоскости кристалла гематита. ФТТ **14**, 3362 (1972)

Эффективный спин и спиновый гамильтониан

М. М. Зарипов

Лаборатория резонансных явлений

Принято считать, что спиновый гамильтониан в некоторых случаях записывается через компоненты “истинного” спина, а в других “эффективного”. В связи с этим отмечается, что, в принципе, спиновый гамильтониан всегда выражается через компоненты эффективного спина. На упрощенном примере “точного” расчета состояний ^4P -терма в кристаллическом поле показано, что даже при выполнении условия теории возмущений, грубо нарушаются коммутационные соотношения для компонент эффективного спина, а оператор магнитного момента не может быть представлен в обычной простой форме.

Хорошо известно, что операторы компонент спина получены в предположении изотропного пространства. Поэтому исследователи, занимающиеся изучением конденсированного состояния магнитным резонансом, имеют дело с эффективным спином ($\tilde{S}$). Эффективный спин определяется из соотношения $2\tilde{S} + 1 = n$, где n – число состояний, между которыми наблюдается резонанс. Величина $\tilde{S}$ может совпадать или не совпадать со значением истинного спина основного терма парамагнитного иона.

В электронном парамагнитном резонансе одним из критериев степени “близости” эффективного спина к истинному спину является величина фактора спектроскопического расщепления. Чем ближе она к 2.00231928..., g -фактору свободного электрона, тем “истиннее” эффективный спин.

Как производить оценку “истинности”? К каким ошибкам можно придти, записывая компоненты магнитного момента в виде $\tilde{\mu}_i = g_i \beta \tilde{S}_i$? Выполняются ли коммутационные соотношения для компонент эффективного спина? Актуальность этих и других вопросов возрастает с развитием экспериментальных исследований в сильных ($\sim 10^5$ Гс) магнитных полях.

Эти вопросы важны при определении магнитных свойств парамагнитных ионов, при расчёте формы кривой ЭПР, учёте спин-спиновых взаимодействий и т.д.

Чтобы получить ответы на эти вопросы, следует проанализировать точные решения задачи о расщеплении уровней энергии парамагнитного иона в кристаллическом электрическом поле и сравнить их с решениями спинового гамильтониана.

Не усложняя задачу излишними деталями, примем, что ион находится в ^4P -состоянии. Пусть электрическое поле имеет осевую симметрию. Эту ось примем за ось z . Спин-орбитальное взаимодействие – изотропное.

Эквивалентный оператор потенциала кристаллического поля в нашем случае запишется в форме $B_2^0 O_2^0$, спин-орбитальное взаимодействие – $\lambda(\vec{L}\vec{S})$. Спин-спиновое и сверхтонкое взаимодействия не учитываем.

Под действием потенциала кристаллического поля ^4P -терм расщепится на дублет $|L = 1, M_L = \pm 1\rangle$, и синглет $|L = 1, M_L = 0\rangle$. Интервал между ними обозначим через Δ ; будем считать, что синглет – нижний.

Спин-орбитальное взаимодействие расщепит ^4P -терм на секстет, квартет и дублет в соответствии с $J = 5/2, 3/2, 1/2$.

Совместное воздействие кристаллического поля и спин-орбитальной связи $V_{кр} + \lambda(LS)$ расщепляет ^4P -терм на шесть дублетов. Уровни энергии и собственные функции находятся из решений двух уравнений третьей степени, двух уравнений – второй и двух уравнений – первой. Собственные функции являются линейными комбинациями состояний $|L, M_L; S, M_S\rangle$:

$$\Phi = a|\pm 1, \mp 1/2\rangle + b|0, \pm 1/2\rangle + c|\mp 1, \pm 3/2\rangle,$$

$$\Phi = d|\pm 1, \pm 1/2\rangle + e|0, \pm 3/2\rangle,$$

$$\Phi = |\pm 1, \pm 3/2\rangle.$$

В таблице 1 приведено взаимное расположение дублетов ϵ_i в зависимости от отношения Δ к λ .

Из таблицы 1 видно, что от $\Delta = 100\lambda$ до $\Delta = 10\lambda$ мы можем выделить два нижних крамеровских дублета. Интервалы δ между ними и коэффициенты правильных линейных комбинаций a, b, c, d, e для этих дублетов также приводятся в таблице. Величины интервалов от $\epsilon_{5,6}$ до $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$ указывают, что этой совокупности ($\epsilon_{5,6}$) можно приписать эффективный спин $\tilde{S} = 3/2$. В самом деле, главными компонентами волновых функций $\Phi_{5,6}$ являются $|0, \pm 3/2\rangle$ и $|0, \pm 1/2\rangle$.

Вычислим матрицы $L_z + S_z, L_x + S_x$ на базисе функций Φ нижнего квартета и сравним их с матрицами $\tilde{S}_z$ и $\tilde{S}_x$ (таблицы 2 и 3).

Из таблицы 2 видно, что матрицы $L_z + S_z$ и $\tilde{S}_z$ совпадают. В таблице 3 $C = ad + (\sqrt{2}/2)bd + (\sqrt{3}/2)eb + (\sqrt{2}/2)ec$ и $D = \sqrt{2}ab + \sqrt{3}ac + b^2$ и матрицы $L_x + S_x$ и $\tilde{S}_x$ совпадают лишь при $\Delta \rightarrow \infty$.

Матрицы операторов $L_x + S_x, L_y + S_y, L_z + S_z$ не подчиняются коммутационному соотношению:

Таблица 1.

Δ/λ	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6	δ	$ \pm 1, \mp 1/2\rangle$ a	$ 0, \mp 1/2\rangle$ b	$ \mp 1, \mp 3/2\rangle$ c	$ \pm 1, \pm 1/2\rangle$ d	$ 0, \pm 3/2\rangle$ e
100	101.50	100.51	99.52	98.51	-0.0149	-0.0353	0.0204	-0.0142	0.9998	-0.0124	-0.0122	0.9999
50	51.50	50.53	49.54	48.53	-0.0297	-0.0712	0.0415	-0.0285	0.9993	-0.0252	-0.0242	0.9997
30	31.50	30.55	29.60	28.55	-0.0491	-0.1199	0.0708	-0.0476	0.9980	-0.0427	-0.0401	0.9992
10	11.50	10.64	9.79	8.64	-0.1410	-0.3717	0.2307	-0.1405	0.9808	-0.1354	-0.1143	0.9934
3	4.50	3.88	3.31	1.82	-0.3860	-1.1236	0.7376	-0.3334	0.8543	-0.3988	-0.3006	0.9538
0	1.50	1.50	1.50	-1.00	-1.0000	-2.5000	1.5000	0.4082	-0.5773	0.7071	-0.6325	-0.7746

Таблица 2.

$L_z + S_z$	$\Phi(3/2)$	$\Phi(1/2)$	$\Phi(-1/2)$	$\Phi(-3/2)$	$\tilde{S}_z$	3/2	1/2	-1/2	-3/2
$\Phi(3/2)$	3/2	0	0	0	3/2	3/2	0	0	0
$\Phi(1/2)$	0	1/2	0	0	1/2	0	1/2	0	0
$\Phi(-1/2)$	0	0	-1/2	0	-1/2	0	0	-1/2	0
$\Phi(-3/2)$	0	0	0	-3/2	-3/2	0	0	0	-3/2

Таблица 3.

$L_x + S_x$	$\Phi(3/2)$	$\Phi(1/2)$	$\Phi(-1/2)$	$\Phi(-3/2)$	$\tilde{S}_x$	3/2	1/2	-1/2	-3/2
$\Phi(3/2)$	0	C	0	0	3/2	0	$\sqrt{3}/2$	0	0
$\Phi(1/2)$	C	0	D	0	1/2	$\sqrt{3}/2$	0	1	0
$\Phi(-1/2)$	0	D	0	C	-1/2	0	1	0	$\sqrt{3}/2$
$\Phi(-3/2)$	0	0	C	0	-3/2	0	0	$\sqrt{3}/2$	0

$$\|L_x + S_x\| \times \|L_y + S_y\| - \|L_y + S_y\| \times \|L_x + S_x\| =$$

$$= i \begin{vmatrix} 2C^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2(D^2 - C^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2(D^2 - C^2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2C^2 \end{vmatrix}.$$

Ясно, что отличие матричных элементов, а также нарушение коммутационного соотношения зависят от величины Δ/λ .

Таблица 4 демонстрирует численное отличие матричных элементов. Заметим, что при $\Delta = 10\lambda$, различие величин матричных элементов – сильное.

Изложенное указывает на то, что и магнитный момент иона (его оператор) может иметь более сложную форму, нежели $g_i \beta \tilde{S}_i$.

Вычислим матрицы $L_x + 2S_x$ и $L_z + 2S_z$ и сравним их с матрицами $g_{\perp} \tilde{S}_x$, $g_{\parallel} \tilde{S}_z$. В нашем случае $g_x = g_y = g_{\perp}$ и $g_z = g_{\parallel}$ (таблицы 5 и 6). Здесь $C' = \sqrt{2} db + \sqrt{2} ec + 2da + \sqrt{3} eb$, $D' = \sqrt{2} ab + 2\sqrt{3} ac + 2b^2$, $A' = 2d^2 + 3e^2$, $B' = b^2 + 2c^2$.

Отношение A' к B' , вообще говоря, не равно 3, как это следует из матрицы $g_{\parallel} \tilde{S}_z$. То же самое можно сказать о C' и D' , которые должны отличаться на множитель $\sqrt{3}/2$.

Таким образом, запись операторов компонент магнитного момента в форме: $\tilde{\mu}_x = g_x \beta \tilde{S}_x$, $\tilde{\mu}_y = g_y \beta \tilde{S}_y$, $\tilde{\mu}_z = g_z \beta \tilde{S}_z$ не точна. Впервые эта запись $\tilde{\mu}_i$ использована в [1], где проведен расчет вклада диполь-дипольного взаимодействия в магнитную теплоемкость. Позже, в [2], эта форма записи использована при расчете формы кривой ЭПР с учетом анизотропии g -фак-

Таблица 4.

Δ/λ	C	D	$2C^2$	$2(D^2 - C^2)$
∞	0.8660	1.0000	1.5000	0.5000
100	0.8488	0.9800	1.4409	0.4729
50	0.8310	0.9603	1.3811	0.4632
40	0.8220	0.9493	1.3514	0.4509
30	0.8070	0.9323	1.3025	0.4359
20	0.7768	0.8981	1.2068	0.4064
10	0.6855	0.7836	0.9398	0.2883

Таблица 5.

$L_x + 2S_x$	$\Phi(3/2)$	$\Phi(1/2)$	$\Phi(-1/2)$	$\Phi(-3/2)$	$g_{\perp}\tilde{S}_x$	3/2	1/2	-1/2	-3/2
$\Phi(3/2)$	0	C'	0	0	3/2	0	$\sqrt{3}/2 g_{\perp}$	0	0
$\Phi(1/2)$	C'	0	D'	0	1/2	$\sqrt{3}/2 g_{\perp}$	0	$g_{\perp}$	0
$\Phi(-1/2)$	0	D'	0	C'	-1/2	0	$g_{\perp}$	0	$\sqrt{3}/2 g_{\perp}$
$\Phi(-3/2)$	0	0	C'	0	-3/2	0	0	$\sqrt{3}/2 g_{\perp}$	0

Таблица 6.

$L_z + 2S_z$	$\Phi(3/2)$	$\Phi(1/2)$	$\Phi(-1/2)$	$\Phi(-3/2)$	$g_{\parallel}\tilde{S}_z$	3/2	1/2	-1/2	-3/2
$\Phi(3/2)$	A'	0	0	0	3/2	$3/2g_{\parallel}$	0	0	0
$\Phi(1/2)$	0	B'	0	0	1/2	0	$1/2g_{\parallel}$	0	0
$\Phi(-1/2)$	0	0	$-B'$	0	-1/2	0	0	$-1/2g_{\parallel}$	0
$\Phi(-3/2)$	0	0	0	$-A'$	-3/2	0	0	0	$-3/2g_{\parallel}$

тора. Последующие авторы также использовали эту форму записи $\tilde{\mu}_i$ без каких-либо оговорок.

Приведем численные оценки:

$$\begin{aligned}
 \Delta = 100\lambda \quad & A' = 2.9997 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9998, \\
 & C' = 1.7174 \rightarrow g_{\perp} = 1.9797, \\
 & B' = 0.9999 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9998, \\
 & D' = 1.9797 \rightarrow g_{\perp} = 1.9797, \\
 \Delta = 50\lambda \quad & A' = 2.9994 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9996, \\
 & C' = 1.6968 \rightarrow g_{\perp} = 1.9594, \\
 & B' = 0.9998 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9997, \\
 & D' = 1.6908 \rightarrow g_{\perp} = 1.9608, \\
 \Delta = 10\lambda \quad & A' = 2.9961 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9974, \\
 & C' = 1.5453 \rightarrow g_{\perp} = 1.7844, \\
 & B' = 0.9955 \rightarrow g_{\parallel} = 1.9910, \\
 & D' = 1.7910 \rightarrow g_{\perp} = 1.7910.
 \end{aligned}$$

Видно, что g -фактора состояний $\tilde{S} = \pm 3/2, \pm 1/2$ существенно отличаются уже при $\Delta = 10\lambda$.

В чем дело? Неужели спиновый гамильтониан не пригоден для описания спектроскопии ЭПР?

Дело в том, что обычная форма спинowego гамильтониана получена с точностью лишь до второго приближения по спин-орбитальному и зеемановскому взаимодействиям.

Более точная, но также приближенная форма записи спинowego гамильтониана – обобщенный спиновый гамильтониан. Его вывод основывается на симметрии окружения парамагнитного иона и на инвариантности гамильтониана по отношению к инверсии времени.

Существует несколько способов вывода обобщенного спинowego гамильтониана. Все они основаны на следующем: предположим, что задача об уровнях

энергии иона в кристаллическом поле решена с учетом всех взаимодействий внутри иона. Выделяем группу низколежащих уровней, “хорошо удаленных от остальных”. Если число этих состояний n , то эффективный спин определяется из соотношения $n = 2S + 1$. Что означает “хорошо удаленных от остальных”? Это означает, что влиянием верхних состояний на “наши” нижние состояния через постоянное магнитное поле можно пренебречь. В [3] впервые были приведены обобщенные спиновые гамильтонианы, линейные по постоянному магнитному полю, для всех точечных групп симметрии.

В данном случае при $\tilde{S} = 3/2$, $\mathbf{H} \parallel z$ и осевой симметрии обобщенный спиновый гамильтониан имеет следующий вид:

$$\mathcal{H}_s = B_2^0 O_2^0 + g_{\parallel} \beta H_z \tilde{S}_z + g_1 \beta H_z O_3^0,$$

$$O_2^0 = 3\tilde{S}_z^2 - \tilde{S}(\tilde{S} + 1),$$

$$O_3^0 = 5\tilde{S}_z^3 - [3\tilde{S}(\tilde{S} + 1) - 1]\tilde{S}_z.$$

$\mathcal{H}_s$ диагонален, поэтому

$$E_{\pm 3/2} = 3B_2^0 + g_{\parallel} \beta H (\pm 3/2) + g_1 \beta H (\pm 3/2),$$

$$E_{\pm 1/2} = -3B_2^0 + g_{\parallel} \beta H (\pm 1/2) + g_1 \beta H (\mp 9/2).$$

Оператор компоненты магнитного момента вдоль оси z имеет вид:

$$\tilde{\mu}_z = g_{\parallel} \beta \tilde{S}_z + g_1 \beta \{5\tilde{S}_z^3 - [3\tilde{S}(\tilde{S} + 1) - 1]\tilde{S}_z\}.$$

При $\Delta = 10\lambda$ имеем $A' = 3/2g_{\parallel} + 3/2g_1$, $B' = 1/2g_{\parallel} - 9/2g_1$, т.к. $A' = 2.9961$, $B' = 0.9955$. Тогда $g_{\parallel} = 1.9959$, $g_1 = 0.0006$.

В 3-см диапазоне член с g_1 дает поправку 6–10 Гс. Если магнитное поле расположено в плоскости $xу$, то обобщенный спиновый гамильтониан имеет вид:

$$\mathcal{H}_s = B_2^0 O_2^0 + g_\perp \beta (H_x \tilde{S}_x + H_x \tilde{S}_x) + g_2 \beta (H_x O_3^1 + H_x O_3^1).$$

При $\mathbf{H} \parallel x$

$$\mathcal{H}_s = B_2^0 O_2^0 + g_\perp \beta H_x \tilde{S}_x + g_2 \beta H_x O_3^1,$$

где $O_3^1 =$

$$= \frac{1}{4} \left\{ \left[(S \tilde{S}_z^2 - \tilde{S}(\tilde{S}+1)) - \frac{1}{2} \right] \tilde{S}_+ + \tilde{S}_+ \left[(S \tilde{S}_z^2 - \tilde{S}(\tilde{S}+1)) - \frac{1}{2} \right] + \left[(S \tilde{S}_z^2 - \tilde{S}(\tilde{S}+1)) - \frac{1}{2} \right] \tilde{S}_- + \tilde{S}_- \left[(S \tilde{S}_z^2 - \tilde{S}(\tilde{S}+1)) - \frac{1}{2} \right] \right\},$$

$$\langle 3/2 | O_3^1 | 1/2 \rangle = \sqrt{3},$$

$$\langle 3/2 | O_3^1 | -1/2 \rangle = -3,$$

$$\tilde{\mu}_Z = g_\parallel \beta \tilde{S}_x + g_2 \beta O_3^1.$$

Сопоставление матриц при $\Delta = 10\lambda$ дает

$$(\sqrt{3}/2)g_\perp + \sqrt{3}g_2 = C,$$

$$g_\perp - 3g_2 = D,$$

или $g_\perp = 1.7870$, $g_2 = -0.0013$.

Поправки к резонансному значению магнитного поля оцениваются как 12–18 Гс.

В заключение отметим, что члены спинового гамильтониана вида $S^3 H$ появляются лишь в четвёртом приближении теории возмущений [4].

Выношу искреннюю благодарность Е. П. Жеглову за проведение вычислительной работы.

Литература

1. Daniels M.: The effect of interaction in a paramagnetic on the entropy and susceptibility. Proc. Phys. Soc. A **66**, 673 (1953)
2. Копвиллем У.Г.: Второй момент линии парамагнитного поглощения с учетом тонкой и сверхтонкой структуры. ЖЭТФ **38**, 151 (1960)
3. Альтшулер С.А., Козырев Б.М.: Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп. Москва: Наука 1972.
4. Абрагам А., Блани Б.: Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Москва: Мир 1973.

Восьмикоординированные комплексы примесных d-ионов ян-теллеровского типа в кристаллах структурного ряда флюорита

В. А. Уланов

Лаборатория резонансных явлений

Представлен краткий обзор работ автора по экспериментальному изучению методом ЭПР восьмикоординированных примесных комплексов двухвалентных ионов меди, серебра и хрома в кристаллах структурной группы флюорита. Кратко описаны результаты изучения примесных кластеров, образованных комплексами меди в кристаллах BaF_2 и CaF_2 . Предложены модели изученных комплексов и механизмы образования кластеров этих комплексов. Определены некоторые параметры электронной структуры изученных центров и дано качественное описание поверхности нижнего листа их адиабатических потенциалов.

Огромное научное и практическое значение исследований процессов легирования твердых тел примесными атомами и изучения влияния этих примесей на физические свойства твердой матрицы неоспоримо. Однако интерес к этой проблеме периодически меняется и эти изменения, по-видимому, связаны в первую очередь с уровнем развития теории твердого тела и экспериментальной техники. В результате исследовательской активности, связанной с открытием явления ЭПР, было выполнено огромное количество экспериментальных и теоретических исследований различных (в том числе и примесных) парамагнитных центров в твердых телах. Затем в этой области физики наступило некоторое затишье, хотя здесь, по нашему мнению, осталось еще много “белых пятен”. Одно из них – восьмикоординированные кубические центры примесных d-ионов переходной группы, у которых основное орбитальное состояние в кубическом поле лигандов является трехкратно вырожденным. Парамагнитные центры с вырожденными основными орбитальными состояниями называются ян-теллеровскими комплексами и их свойства в значительной степени зависят от топологии нижнего листа их адиабатического потенциала (АП) и от электронной структуры иона металла. Основная особенность восьмикоординированных комплексов – несовпадение направлений связей “металл-лиганд” с главными направлениями кристаллического поля, действующего на ион металла-комплексобразователя. Эта особенность может оказать решающее влияние на физические свойства этих комплексов, где связи металла с лигандами являются ковалентными. В этих случаях характер взаимодействия ян-теллеровского парамагнитного комплекса с колебаниями кристаллической решетки (электронно-вибронного взаимодействия) будет зависеть от соотношений между параметрами поля лигандов в целом и параметрами ковалентной связи с различными

ми группами лигандов ближайшей сферы окружения иона металла.

Слабая изученность восьмикоординированных комплексов d-ионов объясняется тем, что такая координация не характерна для этих ионов. В естественных условиях эти комплексы нестабильны. Их стабильное существование возможно лишь в случае их “замораживания” в подходящей кристаллической матрице. Поскольку примесный комплекс резко повышает энергию кристаллической решетки, то для успешного внедрения d-ионов в кубические кристаллические матрицы нужны особые технологии. Такая технология нами была разработана для случаев, когда в качестве кристаллов-матриц применяются ионные кристаллы структурной группы флюорита. В результате, были получены и исследованы (методами ЭПР и ДЭЯР) восьмикоординированные ян-теллеровские комплексы двухвалентных ионов меди [1–3], серебра [4, 5] и хрома. Было обнаружено, что с изменениями размеров координационного куба наблюдается резкое изменение свойств комплексов одного и того же примесного иона. Эти изменения связаны с различием в симметрии ян-теллеровских деформаций в различных кристаллах-матрицах: при меньших размерах координационного куба наблюдается (при низких температурах, $T = 4.2 \text{ K}$) тригональная ян-теллеровская деформация этого куба (Ag^{2+} в CdF_2 , CaF_2 и SrF_2), с увеличением размеров возникает орторомбическая деформация (Ag^{2+} в BaF_2 , Cu^{2+} в CdF_2 и CaF_2 , Cr^{2+} в CdF_2 , CaF_2 и SrF_2), а дальнейшее увеличение приводит к значительным тетрагональным деформациям координационного куба с одновременным сильным смещением примесного иона ($\sim 0.9\text{--}1.1 \text{ \AA}$) в нецентральное положение (модели статически деформированных комплексов представлены на рис. 1).

В первом случае на нижнем листе АП комплекса образуются четыре эквивалентных потенциальных

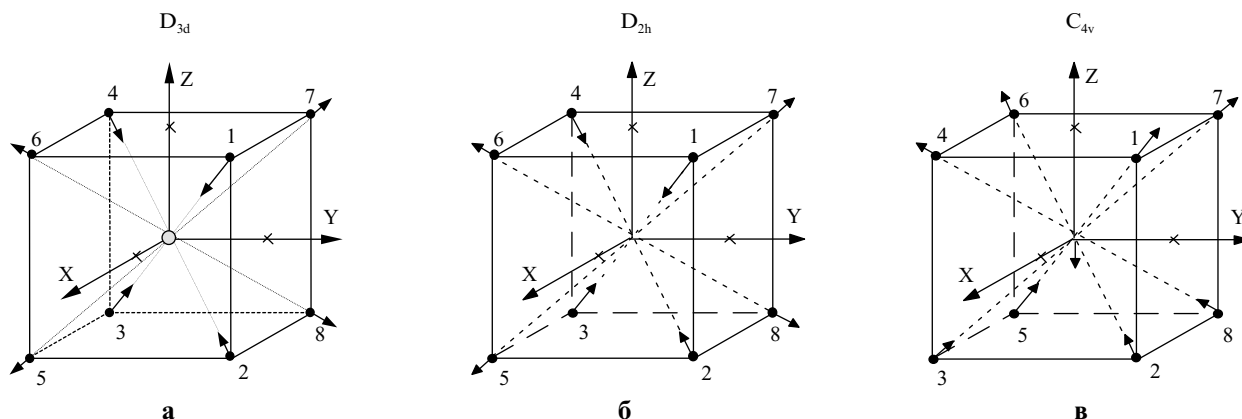


Рис. 1. Модели восьмиординированных ян-теллеровских комплексов меди, серебра и хрома в кристаллах структурного ряда флюорита (стрелками указаны направления ян-теллеровских смещений ионов). **а** Ag^{2+} в CdF_2 , CaF_2 и SrF_2 ; **б** Cu^{2+} в CdF_2 и CaF_2 ; **в** Cu^{2+} в CdF_2 и SrF_2 , Cu^{2+} , Ag^{2+} в SrCl_2 .

ямы, во втором и третьем случаях – шесть ям. Примесные комплексы (как это следует из данных изучения методом ЭПР) совершают переходы между этими ямами: при низких температурах эти переходы являются туннельными, а с повышением температуры начинают происходить также и надбарьерные переходы. С целью изучения механизмов междужамных переходов нами были выполнены эксперименты со смешанными кристаллами типа $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ и $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{F}_2$, легированными ионами Cu^{2+} и Ag^{2+} [6, 7]. В этих кристаллах с помощью примесных щелочноземельных ионов, внедряемых в позиции основных катионов решетки, создавались деформации определенного типа, меняющие форму ям АП, что позволило оценить высоту барьеров между ямами АП и сделать вывод о том, что туннельные переходы между ямами происходят преимущественно с переворотом электронного спина.

Ян-теллеровская деформация комплекса индуцирует вокруг него в решетке кристалла-матрицы поле локальных деформаций. В случае нецентральных комплексов вокруг них индуцируется также и электрическое поле, связанное с дипольными электрическими моментами таких комплексов. Комплексы, оказавшиеся поблизости друг от друга, могут взаимодействовать через эти поля, в результате чего энергия решетки может понизиться. Если коэффициент диффузии для примесных атомов окажется достаточно высоким, то начнется медленная “конденсация” одиночных примесных ионов в примесные кластеры. Нами впервые экспериментально доказано, что в кристаллах структурной группы флюорита можно создать такие условия для протекания диффузионных процессов, которые обеспечат образование большого количества примесных кластеров восьмиординированных комплексов d-ионов с регулярной молекулярной структурой. Нами были получены образцы, где концентрация примесных димеров, тримеров и тетрамеров меди в несколько раз превышает кон-

центрацию одиночных центров меди. Важным является то, что кластеры образованы из ян-теллеровских комплексов и также имеют многоямный АП. Система их спиновых уровней энергии сложна и магнитные свойства этих кластеров весьма чувствительны к изменениям температуры и к воздействию внешних возмущений. Таким образом, кристаллы с такими кластерами могут оказаться перспективными для молекулярной электроники.

Исследования примесных кластеров восьмиординированных ян-теллеровских комплексов меди были начаты с изучения динамических свойств димеров меди в кристаллах BaF_2 (модель димера представлена на рис. 2).

Методом ЭПР были получены температурные и барические зависимости параметров магнитных взаимодействий в димерах, на основе которых были определены высоты потенциальных барьеров между ямами АП [8].

Следующими объектами изучения оказались тримеры меди в кристаллах CaF_2 (см. рис. 3). Они обнаружены методом ЭПР во всех образцах кристаллов, выращенных при концентрации примеси в расплаве больше 0.1% (по отношению к катионам решетки). Модель, представленная на рис. 3, соответствует низкой температуре кристалла (одной из основных молекулярных конфигураций тримера), при которой каждая из орторомбических компонент тримера локализована в одной из шести эквивалентных ям АП. Из рисунка видно, что орторомбические ян-теллеровские деформации (сжатие координационного куба вдоль одной из его осей симметрии второго порядка) согласованы друг с другом. Они согласованы таким образом, что общая энергия упругой деформации, создаваемой ян-теллеровскими деформациями в решетке кристалла-матрицы в окрестностях тримера, оказывается намного меньше суммарной энергии деформаций, возникающих вокруг одиночных ян-теллеровских центров при большом их удалении друг

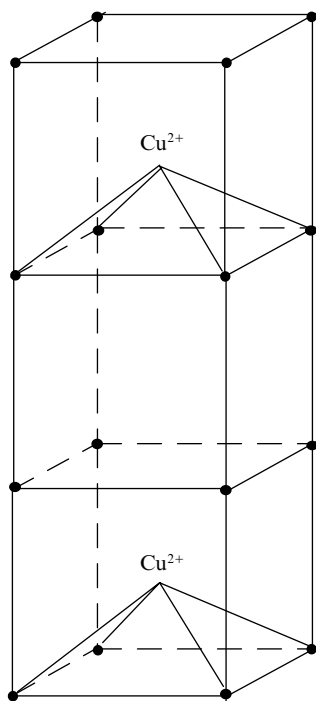


Рис. 2. Модель примесного димера меди в BaF_2 . Линиями показаны ковалентные связи Cu-F, определяющие лигандную сверхтонкую структуру спектров ЭПР, черными точками обозначены ближайшие к примесным ионам меди ионы F^- , ян-тellerовские смещения лигандов на рисунке не представлены.

от друга. Необычно высокая концентрация тримеров по сравнению с концентрацией одиночных комплексов меди указывает на то, что разность этих двух энергий примерно равна 0.1 эВ. Поскольку плоскость ядер меди в тримере совпадает с одной из плоскостей кристалла, (001), то очевидно, что число различных ориентаций кластера в кристалле CaF_2 равно $3 \times 4 \times 2 = 24$. Число 2 в этом произведении соот-

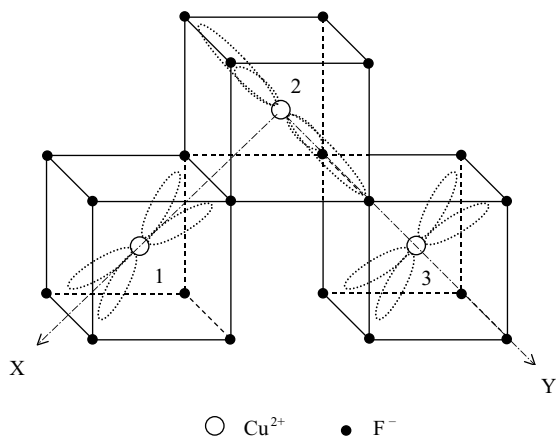


Рис. 3. Модель тримера меди в CaF_2 . Показаны занятые электронной дыркой орбитали 3d-оболочек ионов Cu^{2+} ; оси C_2 координационных кубов, лежащие в плоскостях занятых дыркой орбиталей соответствуют направлениям ян-тellerовского сжатия этих кубов.

ветствует числу основных молекулярных конфигураций каждого конкретного кластера (числу основных эквивалентных ям АП тримера). Одна такая конфигурация представлена на рис. 3, другая может быть получена, если в каждом из трех комплексов, представляющих тример, дырку в заполненной 3d-оболочке меди перевести на другую t-орбиталь (например, с xz -орбитали на yz -орбиталь или наоборот) следя за тем, чтобы ян-тellerовские деформации оставались согласованными.

Система нижних спиновых уровней энергии тримера состоит из двух спиновых дублетов (один из которых является основным) и одного спинового квартета. Спиновые волновые функции нижнего дублета антисимметричны относительно перестановки электронов двух ионов меди (1 и 3, рис. 3) и магнитные свойства центра в этих состояниях с высокой точностью совпадают с магнитными свойствами одиночных примесных комплексов, образующих исследуемый кластер и ориентированных также как фрагмент кластера с ионом меди 2. Возбужденный спиновый дублет удален от основного на энергетическом интервал порядка $30\text{--}50\text{ см}^{-1}$. Его заселение происходит в условиях, когда частота междумных переходов кластера становится существенно выше частоты СВЧ генератора спектрометра ЭПР. По этой причине наблюдаемый тензор электронного зеемановского взаимодействия оказывается осевым с компонентами $g_x = g_y = 2.28$; $g_z = 2.07$ и с осью z , параллельной одной из осей кристалла $\langle 001 \rangle$. Положение возбужденного спинового квартета не определено.

Таким образом, результаты настоящего и наших предыдущих экспериментальных исследований [1–8] указывают на то, что восьмикоординированные примесные комплексы меди, серебра и хрома в кристаллах группы флюорита могут находиться в нескольких квазистационарных молекулярных конфигурациях и могут быть переведены из одной такой конфигурации в другую под влиянием возмущений определенного типа. Следовательно, эти объекты могут оказаться кандидатами на роль элементов молекулярной электроники. Кроме того, экспериментально доказана возможность управляемого синтеза кластеров этих комплексов в объеме кристаллов структурной группы флюорита. Свойства таких кластеров естественным образом связаны со свойствами одиночных комплексов, и, поскольку и те и другие находятся в одной кристаллической матрице, между теми и другими могут возникнуть каналы резонансного взаимодействия.

Наши работы по изучению свойств примесных кластеров, образованных ян-тellerовскими комплексами, поддержаны фондом РФФИ, грант 01-02-17718.

Автор благодарит за плодотворное сотрудничество Зарипова М.М., Жеглова Е.П. и Еремину Р.М.

Литература

1. Зарипов М.М., Уланов В.А.: Сверхтонкие и квадрупольные взаимодействия и модели комплексов $[\text{CuF}_8]^{6-}$ в кристаллах CdF_2 , CaF_2 . ФТТ **30**, 1547 (1988)
2. Зарипов М.М., Уланов В.А.: Нецентральный ион меди в SrF_2 . ФТТ **31**, 251 (1989)
3. Зарипов М.М., Уланов В.А.: Исследование методом ЭПР ионов меди в кристалле BaF_2 . ФТТ **31**, 254 (1989)
4. Зарипов М.М., Уланов В.А., Фалин М.Л.: ЭПР ионов Ag^{2+} в кристалле SrF_2 . ФТТ **31**, 248 (1989)
5. Зарипов М.М., Уланов В.А., Фалин М.Л.: Структура и магнитные свойства комплексов двухвалентного серебра в кристаллах BaF_2 . ФТТ **31**, 289 (1989)
6. Ulanov V.A., Zaripov M.M., Zheglov E.P.: Influence of local strains on static and dynamic properties of eightfold coordinated Jahn-Teller copper and silver complexes in mixed fluorite type crystals: results of the EPR study. Abstracts of XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, p. 52. Kazan 2001.
7. Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П.: Влияние локальных деформаций на статические и динамические свойства восьмикратно координированных ян-теллеровских комплексов меди и серебра в смешанных кристаллах структурного типа флюорита. ФТТ **44** (2002) в печати.
8. Ulanov V.A., Zaripov M.M., Zheglov E.P., Krupski M., Hoffmann S.K.: Temperature and pressure dependence of spin-Hamiltonian parameters of copper impurity pair centres in barium fluoride crystals. Abstracts of XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, p. 102. Kazan 2001.

Статистическое моделирование изотропной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси

М. Х. Бренерман

Лаборатория резонансных явлений

Предложена новая феноменологическая модель однородной изотропной турбулентности и миграции в ней частиц, следующих полю скоростей несущей фазы. Алгоритм моделирования является статистическим и не использует прямое решение уравнений Навье-Стокса. Моделирование поля скоростей несущей фазы выполнено по новому варианту метода случайных вихрей, моделирование миграции пассивной примеси выполнено по схеме случайного блуждания. Модель допускает простую численную реализацию и содержит в себе все характерные черты турбулентных течений – перемежаемость, когерентные структуры, корреляционные свойства, фрактальность и крупномасштабные неоднородности поля концентраций диспергированной фазы. Предложены новые безразмерные критерии для определения границ применимости данной модели к расчету межфазных взаимодействий в энерготехнологических и химических процессах в промышленных установках.

Введение

Для расчетов характеристик процессов межфазных взаимодействий (теплообмена, горения, адсорбции и др.) в двухфазных турбулентных средах необходима возможно более полная информация о поле скоростей несущего турбулентного потока и о законах движения в нем частиц диспергированной фазы. Существующие на данный момент прямые методы моделирования турбулентных течений, основанные на численном решении уравнений Навье-Стокса, а также полуэмпирические методы позволяют рассчитать лишь макроскопически осредненные характеристики турбулентных полей [1]. Этого во многих случаях достаточно для описания движения однофазных потоков. Использование макроскопических средних для расчета межфазных взаимодействий по моделям взаимопроникающих континуумов [2] не позволяет учитывать влияние на межфазные взаимодействия крупномасштабных неоднородностей несущей и диспергированной фаз – когерентных структур, перемежаемости, наличие полного спектра концентраций диспергированной фазы. Между тем, хорошо известно, что неоднородности турбулентных двухфазных смесей порождают целый ряд эффектов, не имеющих места в однородных смесях того же состава и труднообъяснимых в рамках моделей взаимопроникающих континуумов. Это, например, аномально высокий коэффициент турбулентного межфазного теплопереноса (на 3-5 порядков выше, чем молекулярный) в газожидкостной среде (см. [3, 4]), дискретный спектр акустической прозрачности пен и пеноподобных материалов [5], торможение турбулентностью химических реакций [6] и многие другие.

В силу сказанного, остается актуальной проблема построения простых численно реализуемых моделей,

описывающих двухфазную турбулентность феноменологически и воспроизводящих весь спектр турбулентных масштабов и наличие перемежаемости и когерентных структур. Ниже предлагается кинематическая модель поля скоростей для свободной изотропной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси.

Безразмерные критерии для оценки границ применимости моделей взаимопроникающих континуумов

Основным условием применимости моделей взаимопроникающих континуумов (ВК) является следующее [2]: характерный размер неоднородностей двухфазного течения (ДТ) должен быть много меньше масштаба задачи. В данном пункте будем называть это условие гетерогенностью. Введем критерии для оценки степени гетерогенности однородных и изотропных турбулентных двухфазных ДТ с реагирующими компонентами, которая является необходимым (но, конечно, недостаточным) условием применимости моделей ВК. Гетерогенность реагирующего ДТ определяется двумя факторами: однородностью распределения дисперсной фазы и однородностью протекания химической реакции.

Из свойств однородности и изотропности несущей фазы следует равномерная распределенность частиц диспергированной фазы по области течения. Математически это означает, что вероятность обнаружить данное число частиц в данном объеме прямо пропорционально величине этого объема и не зависит от его местоположения. Но и в равномерно распределенном ансамбле частиц всегда существуют флуктуации локальной плотности, величина которых

как раз и характеризует степень гетерогенности. Наличие флуктуаций локальной плотности частиц означает, что в каждый момент времени существует некоторый объем несущей фазы, не вовлеченный в процесс химического взаимодействия, а также области с нарушением стехиометрических условий.

Пусть изотропная турбулентная несущая газовая фаза объемом V содержит N безинерционных горящих частиц диспергированной фазы. Припишем каждой частице радиус r влияния на несущую фазу. Он может интерпретироваться как радиус сферы, содержащей стехиометрическое для данной частицы количество окислителя. Объединение всех N сфер влияния определяет объем V' несущей фазы, участвующий в межфазном взаимодействии. Обозначим также через L характерную длину течения, $\rho = N/V$ среднюю концентрацию частиц, ρ' – локальную плотность диспергированной фазы в данной точке ДТ, R , ω – характерные радиус и частоту вихревых образований, τ_c – характерное время сгорания частицы, положим $B = 4\pi r^3/\rho$, $D = L/R\omega\tau_c$.

Расчеты с применением предельных теорем Лапласа показывают, что:

а) при небольших значениях $\rho'/\rho < 0.1$ средний объем V' несущей фазы, вовлеченный в межфазное взаимодействие, слабо зависит от ρ' и равен:

$$V' = V(1 - \exp(-B)), \quad (1)$$

б) при $\rho'/\rho > 0.1$ для спектра плотностей ρ' имеет-ся распределение вовлеченных в межфазное взаимодействие объемов с локальными плотностями ρ' :

$$dV'(\rho') = \frac{V}{\sqrt{2\pi B}} \exp\left[-0.5B\left(\frac{\rho'}{\rho} - 1\right)^2\right] d\rho'. \quad (2)$$

Из полученных соотношений (1) и (2) видно, что однородность распределения частиц диспергированной фазы может быть оценена по безразмерному критерию B . Табулирование соотношений (1) и (2) показывает, что даже в “благоприятном” случае, когда ρ является стехиометрической плотностью (это достигается при $B \approx 0.5$), из межфазного взаимодействия исключается около 10% объема несущей фазы, и около 5% частиц диспергированной фазы. Однородность горения определяется числом типа Дамкеллера D – относительной “длиной” горения. Из вышесказанного следует, что необходимыми условиями применимости моделей ВК (в данном случае использованием для вычислений средней плотности ρ вместо спектра плотностей ρ') являются условия $r \ll L$, $B \gg 1$, $D \sim 1$. Существует обширный класс газозвесей и аэрозолей с условием $B < 1$, для которых вместо моделей ВК целесообразно использование статистического описания.

Стохастическая модель поля скоростей

Рассматривается течение в канале с доминирующей скоростью вдоль оси канала. В продольном сечении канала вихревые образования моделируются ансамблем вращающихся кругов, плотно заполняющих область течения. Сами вихревые образования интерпретируются как когерентные структуры. Составляющая скорости данной точки течения, порожденная вращением вихря, интерпретируется как пульсационная составляющая. Параметрами модели являются:

ω_0 – “эталонная” частота вращения вихрей. Эта частота соответствует вихрям максимального масштаба (радиуса);

R_0 – “эталонный” радиус соответствует максимальному масштабу;

u – скорость потока в лабораторной системе отсчета;

$H(R)$ – плотность вероятностей распределения вихрей по радиусам. Очевидно, аргумент R может меняться лишь в пределах $l/2 < R < L/2$, где l и L – минимальный и максимальный масштабы турбулентности;

$\omega_R = \omega(R)$ – зависимость частоты вращения вихрей от радиуса. Такая функция, вообще говоря, интервальнозначна, и *a priori* о ней известно лишь то, что $\omega_0 = \omega(R_0)$;

$\alpha = \alpha(R_1, R_2)$ коэффициент прохождения при передаче турбулентной энергии от вихрей масштаба R_1 к вихрям масштаба R_2 . Очевидно, она должна удовлетворять условию мультипликативности ($R_1 < R' < R_2$): $\alpha(R_1, R_2) = \alpha(R_1, R')\alpha(R', R_2)$.

Важнейшей составной частью предлагаемой модели является компьютерно реализуемый алгоритм заполнения области течения, генерируемыми вихрями. Он технически весьма сложен и его подробное описание выходит за рамки данной работы. Пример

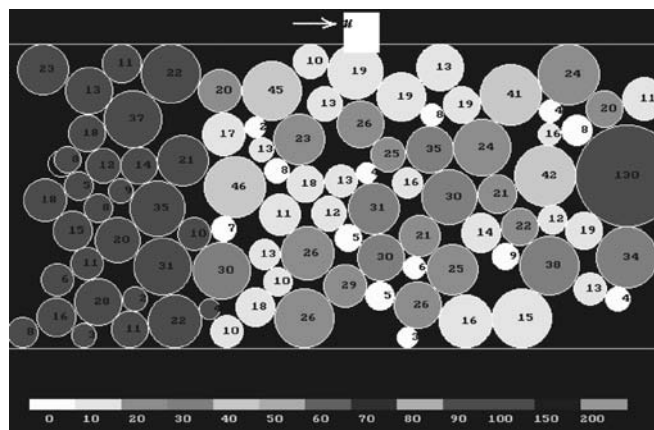


Рис. 1. Стохастическая компьютерная модель изотропной турбулентности и расхождения концентрации первоначально однородной пассивной примеси.

сгенерированной компьютерной картины изотропной турбулентности приведен на рис. 1.

Моделирование миграции пассивной примеси по схеме случайных блужданий

Здесь предлагается алгоритм моделирования миграции частиц, масса которых достаточно мала для того, чтобы преобладали центробежные силы, выталкивающие частицу на периферию вихря [8]. Учитывая эффект “центрифугирования” и возможность перескока частицы из вихря в соседний в точках касания, а также допущение о бесстолкновительности смеси, в качестве закона блуждания частицы по полю скоростей несущей фазы выберем следующий. Частица движется по окружностям от точки касания до соседней (шаг блуждания). В точке касания вероятность перейти на соседнюю окружность равна

$$P(R_1, R_2) = 2^{-R_1/R_2},$$

где R_1 – радиус окружности, на которой она находится, R_2 – радиус соседней окружности. Такое задание вероятности согласуется с естественным условием перейти после прохода через точку касания с равной вероятностью в любой из касающихся вихрей равного радиуса. Будем рассматривать блуждание с отражением от входного сечения канала и поглощением на выходном сечении. Время движения частицы на n -ом шаге блуждания равно

$$t_c = \frac{\{\varphi_2 - \varphi_1\}_{\text{mod } 2\pi}}{\omega_c},$$

где φ_2 и φ_1 – конечный и начальный углы стыковки вихрей, ω_c – угловая скорость вихря, в котором в данный момент времени находится частица.

Результаты численного моделирования

Для выяснения адекватности вновь введенной модели были проведены численные эксперименты по определению статистических характеристик поля скоростей несущей фазы. Распределение вихрей по радиусам генерировалось в двух вариантах [9]: равномерным, с использованием алгоритма дробных остатков; и нормальным, с использованием формулы:

$$R = \mu + \sigma \left(\sum_{i=1}^{12} \alpha_i - 6 \right),$$

где α – равномерно распределенная случайная величина на отрезке $[0,1]$.

Моделирование коэффициента перемежаемости

Моделирование коэффициента перемежаемости означает моделирование вероятности нахождения произвольно выбранной точки течения в зоне турбулентности или, что то же самое, относительной доли объема течения, занятого турбулентностью. На рис. 2 представлены результаты численного моделирования коэффициента перемежаемости γ в средней части и по краю камеры для нормального распределения вихрей по радиусам.

По оси x отложена дисперсия, различные графики соответствуют средним значениям радиуса вихрей от $0.08b$ до $0.25b$ (b – ширина камеры). Наблюдается уменьшение γ от центра к краю течения, что качественно соответствует экспериментально наблюдаемой картине [7, 11]. Кроме того, просматривается наличие “сепаратрисы” с “критическим” средним радиусом (на графиках выделено жирным), обладающей следующим свойством. Для распределений со средним радиусом меньше “критического” γ монотонно убывает с ростом σ (σ – стандартное отклонение нормального распределения). Для распределений со средним радиусом больше “критического” функция $\gamma(\sigma)$ имеет максимум, то есть существует некоторое σ , при котором γ имеет наибольшее значение.

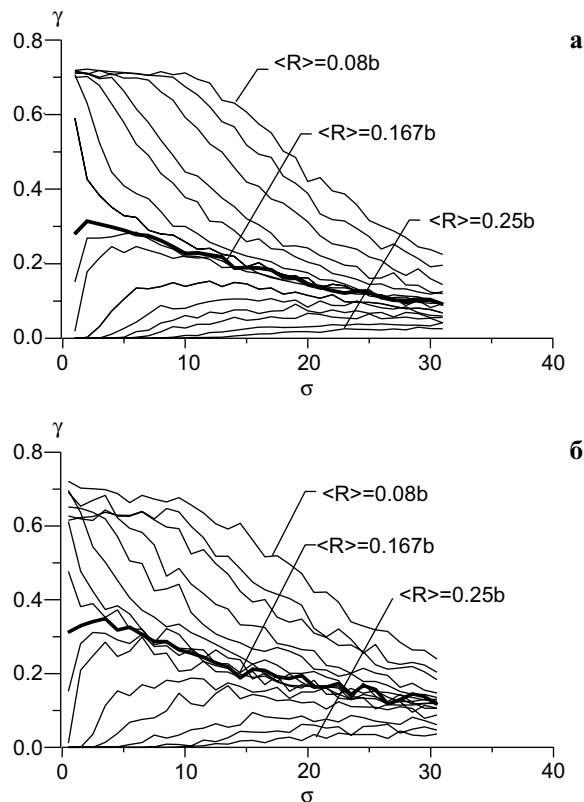


Рис. 2. Зависимость коэффициента перемежаемости от дисперсии распределения вихрей по радиусам при различных $\langle R \rangle$: а в центре камеры, б по краю камеры на 0.25 от ширины.

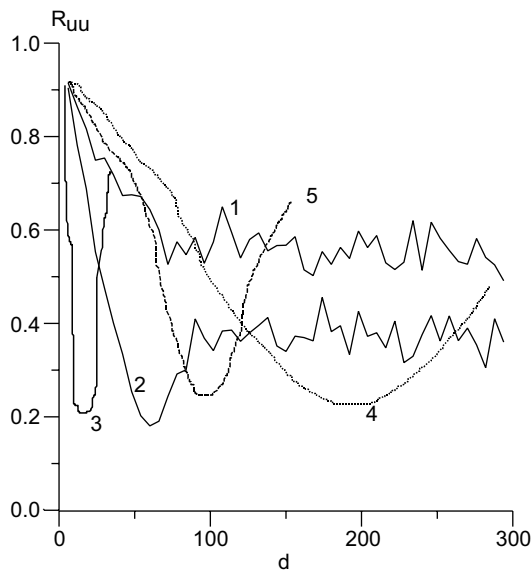


Рис. 3. Коэффициенты пространственной корреляции пульсаций скорости в модели “блуждающих фаз”: 1 по краю камеры; 2 в центре камеры, и по данным [10]: 3, 4, 5 при различных числах Рейнольдса у кромки сопла.

Вычисленное значение “критического” радиуса равно $0.167b$.

Моделирование двухточечных корреляций

Одной из важных характеристик турбулентного поля скоростей является двухточечный коэффициент корреляции:

$$R_{uu}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, t_1, t_2) = \frac{\langle u'_i(\bar{x}_1, t_1) \cdot u'_i(\bar{x}_2, t_2) \rangle}{\sqrt{\langle u'^2_i(\bar{x}_1, t_1) \rangle \langle u'^2_i(\bar{x}_2, t_2) \rangle}},$$

где $u'_i(\bar{x}, t)$ – проекция флуктуации скорости точки на ось Ox , а угловые скобки означают осреднение величин $u'_i(\bar{x}, t)$.

На рис. 3 представлены результаты моделирования величины R_{uu} и ее измерения по данным работы [10]. Сравнение показывает качественное согласие нашей модели с экспериментом. На графиках показана зависимость коэффициента корреляции R_{uu} от расстояния между контрольными точками.

Моделирование миграции пассивной примеси

Общая картинка расслоения первоначально однородной смеси показана на рис. 1. В левой части рисунка – первоначально однородная смесь. По мере смещения вправо появляются вихри с различной концентрацией частиц (различная тоновая закрашенность).

Выборочная плотность вероятностей распределения концентраций частиц показана на рис. 4. Распре-

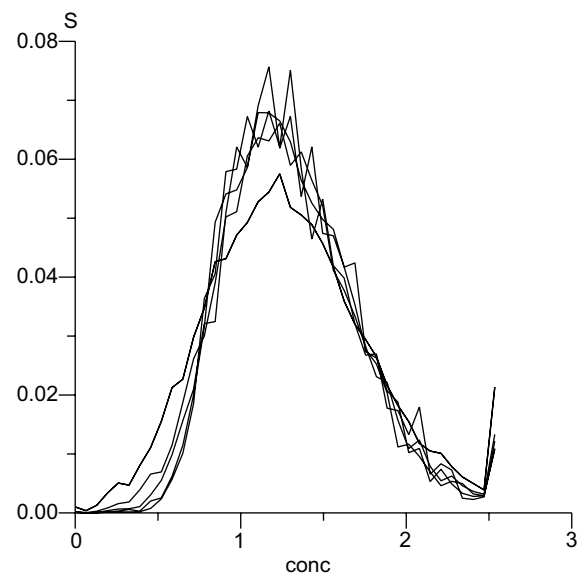


Рис. 4. Выборочная плотность вероятностей распределения концентраций частиц. Различные графики соответствуют различным отрезкам равномерного распределения радиусов вихрей: [10,20], [10,30], ..., [10,60].

деление близко к нормальному. По оси x отложена шкала концентраций частиц в вихрях, по оси y – относительная суммарная площадь, занимаемая вихрями с данной концентрацией частиц. Различные графики соответствуют различным отрезкам равномерного распределения радиусов вихрей.

Резюме

Построена новая феноменологическая модель для описания двухфазной турбулентной случайно-неоднородной среды.

Численные эксперименты показывают, что предложенная модель позволяет численно воспроизвести двухфазное течение с развитой свободной турбулентностью со следующими свойствами:

- Однородность и изотропность. При “послойном” применении модели (плавном изменении “эталонного” радиуса и частоты) можно также воспроизвести затухающую свободную турбулентность.
- Выполнение гипотезы “замороженной” турбулентности Тейлора.
- Наличие когерентных структур.
- Наличие перемежаемости.
- Расслоение первоначально однородной концентрации пассивной примеси.

Такие свойства позволяют использовать данную модель в качестве основы для расчета характеристик межфазных взаимодействий в рабочих средах энерготехнологических систем.

Предложен безразмерный критерий для оценки адекватности выбора между детерминированным и

статистическими способами моделирования двухфазных сред в конкретных случаях.

Результаты опубликованы в следующих работах: Бренерман М.Х., Евграфова Н.В.: Феноменологическая модель изотропной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси. Известия РАН, Энергетика, 2001, 3, 106–113; Бренерман М.Х.: О влиянии флуктуаций плотности компонент двухфазной турбулентной среды на интенсивность двухфазных взаимодействий. Труды Российского национального симпозиума по энергетике, Казань, 2001, стр. 432–436.

Литература

1. Колльман В. (ред.): Методы расчета турбулентных течений. Москва: Мир 1984.
2. Нигматулин Р.И.: Динамика многофазных сред. Москва: Наука 1987.
3. Рамм В.М.: Абсорбция газов. Москва: Химия 1973.
4. Бренерман М.Х., Кессель А.Р., Кравцов Я.И.: Модель “блуждающих фаз” для теплообмена в двухфазной газожидкостной среде с турбулентным перемешиванием. ДАН **329**, 285–287 (1993)
5. Алемасов В.Е., Бренерман М.Х., Кессель А.Р., Кравцов Я.И.: Стохастический подход к описанию процессов в “слабо перемешанных” многофазных средах. Модель “блуждающих волн”. ДАН **336**, 46–49 (1994)
6. Бренерман М.Х., Кессель А.Р.: Модель “блуждающих фаз” горения в двухфазной среде с крупномасштабной турбулентностью. Известия РАН, серия Энергетика **3**, 25–32 (1998)
7. Белоцерковский С.М., Гиневский А.С.: Моделирование турбулентных струй и следов на основе метода дискретных вихрей. Москва: Физматлит 1995.
8. Kailasanath K., Chang E.: Numerical simulation of multiphase reacting flows, in: “Advanced Computation & Analysis of Combustion”, pp. 122–135. Moscow: ENAS Publishers 1997.
9. Ермаков С.М., Михайлов Г.А.: Курс статистического моделирования. Москва: Наука 1976.
10. Кузнецов В.Р., Расщупкин В.И.: Распределение вероятностей и условное осреднение в турбулентных потоках. Известия АН СССР, МЖГ **6**, 31–37 (1996)
11. Исатаев С.И., Тарасов С.Б.: О характерных масштабах пульсаций скорости в переходной области свободных осесимметричных струй. Прикл. и теор. физика (Алма-Ата) **7**, 140–146 (1995)

О коррелированной динамике подсистем замкнутой квантовой системы*

Н. К. Соловаров

Лаборатория резонансных явлений

Определена математическая операция коррелированной редукции, представляющая собой правило нахождения самосогласованных операторов плотности подсистем замкнутой квантовой системы из оператора плотности полной системы. На примере модельной задачи об описании ЭПР (Эйнштейна-Подольского-Розена)-пары продемонстрирован алгоритм вычисления коррелированных приведенных операторов плотности.

Старый вопрос квантовой теории о редукции замкнутой квантовой системы и декогеренции квантовой подсистемы (переходе из чистого или суперпозиционного состояния в смешанное) в результате ее взаимодействия с другой подсистемой заново переформулируется в последнее время в квантовой оптике [1, 2]. Этот процесс инициирован рассмотрением прикладных задач квантовой информатики [3], надеждой прояснить квантовую природу необратимости [2, 4] и, главным образом, развитием экспериментальной техники, позволяющим перепроверять следствия ранее принятых аксиом квантовой механики на новом уровне. Качественно новый характер экспериментов состоит в возможности изучения динамики подсистем простых квантовых систем (например, пары коррелированных фотонов, рожденных в нелинейном процессе, или одиночного двухуровневого атома, взаимодействующего с резонансным полем предельно малой интенсивности [1–3]). Принципиально квантовый микроскопический характер подсистем в этом случае логически не соответствует принятому описанию декогеренции [2], в котором одна из подсистем рассматриваемой замкнутой квантовой системы полагается макроскопической.

В соответствии с аксиомой Ландау-Дирака-Фон Неймана декогеренция происходит при наблюдении за одной из взаимодействующих (взаимодействовавших) подсистем замкнутой квантовой системы и описывается неунитарной операцией редукции, математически представляющей собой правило вычисления оператора плотности наблюдаемой подсистемы из известного оператора плотности замкнутой системы [1–3, 5–8]:

$$\hat{\rho}_{\alpha N}(t) = \text{Sp}_{\beta} \hat{\rho}(t) \quad \text{или} \quad \hat{\rho}_{\beta N}(t) = \text{Sp}_{\alpha} \hat{\rho}(t). \quad (1)$$

В (1) $\hat{\rho}_{\alpha(\beta)N}(t)$ – приведенный (редуцированный) оператор (матрица) плотности наблюдаемой подсистемы (α или β с гамильтонианами $\hat{\mathcal{H}}_{\alpha}$, $\hat{\mathcal{H}}_{\beta}$ соответ-

венно) замкнутой квантовой системы ($\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\alpha} + \hat{\mathcal{H}}_{\beta} + \hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}$, где $\hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}$ – гамильтониан взаимодействия подсистем). Унитарная (обратимая) динамика замкнутой системы описывается решением уравнения Лиувилля (Шредингера) $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^{\dagger}(t)$, $\hat{U}(t) = \exp[-(it/\hbar)\hat{\mathcal{H}}]$; операторы $\hat{\mathcal{H}}_{\alpha}$, $\hat{\mathcal{H}}_{\beta}$, $\hat{\rho}_{\alpha N}(t)$, $\hat{\rho}_{\beta N}(t)$ определены в пространствах подсистем α , β , а операторы $\hat{\mathcal{H}}_{\alpha\beta}$, $\hat{\rho}(t)$ в пространстве, представляющем собой прямое (внешнее) произведение пространств подсистем [7–8]. $\text{Sp}_{\alpha(\beta)}$ означает взятие следа по состояниям соответствующей подсистемы, индексом N отмечено неймановское определение приведенных операторов плотности (1). При интерпретации декогеренции подразумевается переход к открытой системе, причем математическим выражением перехода от замкнутой к открытой системе является определение приведенного оператора плотности наблюдаемой подсистемы в форме (1) [2].

Операция редукции (1) выделяет из замкнутой системы одну из подсистем, что одновременно означает разделение полной системы на подсистемы. Проанализируем, каким условиям удовлетворяют разделенные подсистемы, если динамика замкнутой системы определена оператором плотности $\hat{\rho}(t)$. Рассмотрим физические величины $\langle \hat{A}(t) \rangle$, $\langle \hat{B}(t) \rangle$, которым соответствуют эрмитовы операторы $\hat{A}$, $\hat{B}$ разных подсистем α , β соответственно. Определенные таким образом физические величины одновременно измеримы и коррелированы. Одновременная измеримость (совместность [9]) следует из коммутруемости расширенных операторов $\hat{A}' = \hat{A} \otimes \hat{1}_{\beta}$, $\hat{B}' = \hat{1}_{\alpha} \otimes \hat{B}$, $[\hat{A}', \hat{B}'] = 0$, определенных в полном пространстве, где $\hat{1}_{\alpha(\beta)}$ – единичный оператор в пространстве соответствующей подсистемы (здесь и далее расширенные операторы отмечены верхним штрихом). Коррелированность означает, что между величинами $\langle \hat{A}(t) \rangle$, $\langle \hat{B}(t) \rangle$ существует взаимно однозначное соответствие (смотри анализ Фон Неймана [6] гл. 6.2).

Мы обращаем внимание, что отождествление операторов всех наблюдаемых физических величин с операторами независимых подсистем соответствует фи-

* Дискуссионная статья

зическому приближению, при котором подсистемы полагаются невзаимодействующими. Математическим выражением этого приближения является утверждение, что существуют операторы плотности подсистем $\hat{\rho}_\alpha(t)$, $\hat{\rho}_\beta(t)$ ($\text{Sp}_\alpha \hat{\rho}_\alpha(t) = \text{Sp}_\beta \hat{\rho}_\beta(t) = 1$), описывающие динамику каждой подсистемы независимо. Тогда оператор плотности полной системы должен представляться прямым произведением операторов плотности независимых подсистем [6–8] $\hat{\rho}_R(t) = \hat{\rho}_\alpha(t) \otimes \hat{\rho}_\beta(t)$, где нижним индексом R (редуцирование) отмечено, что данное равенство является следствием физического приближения. С другой стороны, оператор плотности замкнутой системы определен решением уравнения Лиувилля $\dot{\hat{\rho}}(t)$, и в этом (точном) операторе плотности взаимодействие между подсистемами проявляется в виде коррелированности величин $\langle \hat{A}(t) \rangle$, $\langle \hat{B}(t) \rangle$ [6]. Равенство или приближенное равенство

$$\hat{\rho}(t) \cong \hat{\rho}_R(t) \quad (2)$$

представляет собой общее выражение математической операции редукции, в которой свойства полной системы переносятся на подсистемы.

Действительно, при обосновании (1) использовано только физическое требование, что измеряемые (вычисляемые) средние значения физических величин одинаковы для полной (замкнутой) системы и для наблюдаемой подсистемы [6, 8], выражаемое равенствами:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \begin{cases} \text{Sp} \hat{\rho}(t) \hat{A}' \\ \text{Sp}_\alpha \hat{\rho}_\alpha(t) \hat{A} \end{cases} \quad \text{или} \quad \langle \hat{B}(t) \rangle = \begin{cases} \text{Sp} \hat{\rho}(t) \hat{B}' \\ \text{Sp}_\beta \hat{\rho}_\beta(t) \hat{B} \end{cases} \quad (3)$$

При выполнении (2) равенства (3) очевидно выполняются тождественно.

Покажем, что неймановское определение приведенного оператора плотности подсистемы (1) является только частным случаем, соответствующим предельному переходу к открытой системе.

Представим условие (2) в более удобной форме. Для этого выполним преобразование, аналогичное использованному Фон Нейманом для доказательства коррелированности величин $\langle \hat{A}(t) \rangle$, $\langle \hat{B}(t) \rangle$ (см. [6, гл. 6.2]). Умножим (2) с обеих сторон на $\hat{\rho}'_\beta(t) = \hat{1}_\alpha \otimes \hat{\rho}'_\beta(t)$ или $\hat{\rho}'_\alpha(t) = \hat{\rho}'_\beta(t) \otimes \hat{1}_\beta$ и возьмем след по состояниям подсистем β или α соответственно. В результате получим систему двух связанных уравнений:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\alpha(t) &= \frac{\text{Sp}_\beta \hat{\rho}(t) \hat{\rho}'_\beta(t)}{\text{Sp}_{\alpha\beta} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}'_\beta(t)}, \\ \hat{\rho}_\beta(t) &= \frac{\text{Sp}_\alpha \hat{\rho}(t) \hat{\rho}'_\alpha(t)}{\text{Sp}_{\alpha\beta} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}'_\alpha(t)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Каждое из уравнений (4) представляет собой стандартное квантовое усреднение оператора плотности полной системы по одной из подсистем.

Рассмотрим различия в определениях неймановских приведенных операторов плотности (редукции (1)) и коррелированных приведенных операторов плотности (коррелированной редукции, определенной системой уравнений (4)). Очевидно, что при точном равенстве (2), (4) $\hat{\rho}_\alpha(t) \equiv \hat{\rho}_{\alpha N}(t)$, $\hat{\rho}_\beta(t) \equiv \hat{\rho}_{\beta N}(t)$, т.е. выражения (1) являются следствием (4) одновременно для обеих подсистем. С другой стороны, каждый неймановский приведенный оператор плотности подсистемы из (1) по отдельности удовлетворяет только одному уравнению из (4):

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\alpha(t) &= \hat{\rho}_{\alpha N}(t), \text{ если } \hat{\rho}_\beta(t) = \hat{\rho}_{\beta \min}(t) = (1/N_\beta) \hat{1}_\beta, \\ \hat{\rho}_\beta(t) &= \hat{\rho}_{\beta N}(t), \text{ если } \hat{\rho}_\alpha(t) = \hat{\rho}_{\alpha \min}(t) = (1/N_\alpha) \hat{1}_\alpha, \end{aligned} \quad (5)$$

где N_α , N_β – размерности подсистем α , β . При этом в общем случае для неймановских приведенных операторов плотности условие взаимной коррелированности подсистем (4) не выполняется:

$$\hat{\rho}(t) \neq \hat{\rho}_{\alpha N}(t) \otimes \hat{\rho}_{\beta N}(t). \quad (6)$$

Несовместность выражений (4) и (6) отражает возможность точного представления замкнутой системы в виде двух подсистем (точного равенства (2)) только в случае независимых ($\mathcal{H}_{\alpha\beta} = 0$) подсистем. При $\mathcal{H}_{\alpha\beta} \neq 0$ такое представление является приближенным, вследствие чего условие коррелированности (4) в общем случае может выполняться только приближенно.

Смысл приближений, соответствующих неймановской редукции (1), очевиден из выражений (5). Они демонстрируют, что вычислению приведенного оператора плотности наблюдаемой подсистемы по правилу (1) соответствует неявное утверждение (следующее из условия коррелированности), что ненаблюдаемая подсистема одновременно находится в стационарном состоянии, описываемом оператором плотности, пропорциональным единичному. Такой оператор плотности ($\hat{\rho}_{\min}$ – оператор плотности квантовой системы, находящейся в состоянии с минимальной информацией [7]) показывает, что ненаблюдаемая подсистема стационарна, с равной вероятностью находится в любом из собственных энергетических состояний и в ней отсутствует квантовая когерентность (ненулевые недиагональные элементы матрицы плотности). Этому состоянию соответствует наглядное физическое представление о нахождении ненаблюдаемой подсистемы в любой момент времени при бесконечной температуре.

В другой известной модели измерения, принятой в теории неразрушающих квантовых измерений [10, 11], полагается, что в момент измерения t пробная (“ненаблюдаемая”) подсистема β достоверно определена (измерена) в собственном состоянии $|b\rangle$ и ее оператор плотности имеет вид проектора

$\hat{\rho}_{\beta P}(t) = \hat{P}_{\beta b} \equiv |b\rangle\langle b|$. При этом уравнение редукции для приведенного оператора плотности сигнальной (“наблюдаемой”) подсистемы α определено в момент t выражением [10, 11]:

$$\hat{\rho}_{\alpha P}(t) = \frac{\text{Sp}_{\beta} \hat{\rho}(t) \hat{P}'_{\beta}}{\text{Sp}_{\alpha\beta} \hat{\rho}(t) \hat{P}'_{\beta b}}, \quad (7)$$

где $\hat{P}'_{\beta b} \equiv \hat{1}_{\alpha} \otimes \hat{P}_{\beta b}$. Видно, что (7) совпадает с одним из условий коррелированности (4), а редукция в этой модели означает приближенное определение оператора плотности системы в момент t выражением:

$$\hat{\rho}(t) \rightarrow \hat{\rho}_{RP}(t) = \hat{\rho}_{\alpha P}(t) \otimes \hat{P}_{\beta b}. \quad (8)$$

Можно заключить, что в обеих моделях редукции (1) и (7) оператор плотности одной из подсистемы (ненаблюдаемой) задается физической процедурой измерения, а оператор плотности другой подсистемы определяется из условия коррелированности подсистем.

Покажем, что задание состояния ненаблюдаемой подсистемы (исходя из внешних для замкнутой квантовой системы условий) является дополнительным, и что математическая операция редукции, т.е. алгоритм вычисления операторов плотности подсистем из известного оператора плотности замкнутой системы, определен физическим предположением о коррелированности подсистем (4).

Будем решать систему уравнений (4) относительно искомых операторов $\hat{\rho}_{\alpha}(t)$, $\hat{\rho}_{\beta}(t)$ методом последовательных приближений:

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha}(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\rho}_{\alpha}^{(n+1)}(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp}_{\beta} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}_{\beta}^{(n)}(t)}{\text{Sp}_{\alpha\beta} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}_{\beta}^{(n)}(t)}, \\ \rho_{\beta}(t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\rho}_{\beta}^{(n+1)}(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp}_{\alpha} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}_{\alpha}^{(n)}(t)}{\text{Sp}_{\alpha\beta} \hat{\rho}(t) \hat{\rho}_{\alpha}^{(n)}(t)}, \end{aligned} \quad (9)$$

используя в качестве нулевого приближения ($n = 0$, верхний индекс в скобках указывает номер итерации), например, выражения неймановских приведенных операторов плотности (1). В случаях, когда процедура последовательных приближений сходится, получающиеся операторы плотности подсистем максимально возможно удовлетворяют условию (4), поэтому их можно назвать самосогласованными коррелированными приведенными операторами плотности подсистем. Подчеркнем, что результат редукции и в этом случае является приближенным, однако такое приближение больше соответствует представлению о замкнутости системы и равноправности взаимодействующих подсистем, чем редукция (1), где включение в рассмотрение процесса измерения означает переход к открытой системе. Поэтому можно ожидать, что коррелированные операторы плотности правильнее опи-

сывают динамику подсистем в экспериментальных случаях, когда влияние процесса измерения на динамику квантовой системы минимально и приближение замкнутой системы справедливо.

Проиллюстрируем предлагаемую процедуру коррелированной редукции на модельном примере. В квантовой оптике при описании экспериментов по наблюдению взаимной коррелированности фотонов часто используется модель, в которой пара невзаимодействующих фотонов (двухуровневых подсистем α , β с собственными состояниями $|2\rangle_{\alpha(\beta)}$, $|1\rangle_{\alpha(\beta)}$) полагается находящейся в перепутанном ЭПР (Эйнштейна-Подольского-Розена)-состоянии (синглетном S-состоянии) [1–3]. Оператор плотности такой замкнутой квантовой системы в базисе прямого произведения собственных состояний независимых подсистем имеет вид:

$$(\hat{\rho}_S) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Поскольку фотоны в ЭПР-состоянии полагаются невзаимодействующими, для коррелированных приведенных операторов плотности фотонов равенство (2) должно выполняться точно. Используя (9), получаем, что в общем случае произвольного нулевого приближения $(\rho_{\alpha})_{ij} = \alpha_{ij}$, $(\rho_{\beta})_{ij} = \beta_{ij}$ самосогласованная итерационная процедура сходится уже на первом шаге (в первом приближении) и приводит к следующим условиям для элементов коррелированных приведенных операторов плотности подсистем: $\alpha_{22} = \beta_{11}$, $\alpha_{21} = -\beta_{21}$, в добавление к обычным условиям нормированности и эрмитовости: $\alpha_{11} = 1 - \alpha_{22}$, $\alpha_{12} = \alpha_{21}^*$. Используя условия коррелированности, можно записать систему уравнений для нахождения элементов α_{22} , α_{21} из равенства (2) $\hat{\rho}_S(t) = \hat{\rho}_{\alpha S}(t) \otimes \hat{\rho}_{\beta S}(t)$. Эта система разделяется на три группы уравнений – для диагональных элементов, недиагональных элементов и уравнений их связи:

$$\begin{aligned} \alpha_{22}\beta_{22} &\leftrightarrow 0 =: \alpha_{22}(1 - \alpha_{22}), \\ \alpha_{22}\beta_{11} &\leftrightarrow 1/2 =: \alpha_{22}^2, \\ \alpha_{11}\beta_{22} &\leftrightarrow 1/2 =: (1 - \alpha_{22})^2, \\ \alpha_{11}\beta_{11} &\leftrightarrow 0 =: (1 - \alpha_{22})\alpha_{22}, \\ \alpha_{21}\beta_{12} &\leftrightarrow -1/2 =: -|\alpha_{21}|^2, \\ \alpha_{21}\beta_{12} &\leftrightarrow 0 =: -(\alpha_{21})^2, \\ \alpha_{22}\beta_{21} &\leftrightarrow 0 =: \alpha_{22}(-\alpha_{21}), \\ \alpha_{21}\beta_{22} &\leftrightarrow 0 =: \alpha_{21}(1 - \alpha_{22}), \\ \alpha_{21}\beta_{11} &\leftrightarrow 0 =: \alpha_{21}\alpha_{22}, \\ \alpha_{11}\beta_{21} &\leftrightarrow 0 =: -(1 - \alpha_{22})\alpha_{21}. \end{aligned} \quad (11)$$

Уравнения (11) очевидно несовместны как алгебраические, являются совместными как статистичес-

кие, что мы обозначили знаками “=:” вместо “=”. Например, система четырех уравнений из первой колонки выполняется, если полагать, что α_{22} с равной вероятностью (1/2) принимает два значения: $\alpha_{22}^{(1)} = 1$ и $\alpha_{22}^{(2)} = 0$ и каждое уравнение рассматривается как результат статистического усреднения. Так, для первого из уравнений первой колонки из (11) имеем: $0 = (1/2)[\alpha_{22}^{(1)}(1 - \alpha_{22}^{(1)}) + \alpha_{22}^{(2)}(1 - \alpha_{22}^{(2)})]$, а для второго: $1/2 = (1/2)[(\alpha_{22}^{(1)})^2 + (\alpha_{22}^{(2)})^2]$. Решая подобным образом систему (11) как систему статистических уравнений, по-

лучим искомое выражение оператора плотности в форме:

$$\hat{\rho}_S = \sum_n^M w_n \hat{\rho}_{S_n} = \sum_n^M w_n (\hat{\rho}_{an} \otimes \hat{\rho}_{an}), \quad (12)$$

где M – число различных решений системы уравнений (11), $\sum_n w_n = 1$, $0 \leq w_n \leq 1$, и каждый коэффициент w_n характеризует вероятность одного из возможных коррелированных состояний подсистем $\hat{\rho}_{S_n}(t)$.

$$\begin{aligned} (\hat{\rho}_S) = & \frac{1}{4} \left[\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(i\theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-i\theta) & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + \pi)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[-i(\theta + \pi)] & 1 \end{pmatrix} \right. \\ & + \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + \pi)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[-i(\theta + \pi)] & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(i\theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-i\theta) & 1 \end{pmatrix} \\ & + \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + \pi/2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[-i(\theta + \pi/2)] & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + 3\pi/2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + 3\pi/2)] & 1 \end{pmatrix} \\ & \left. + \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + 3\pi/2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[-i(\theta + 3\pi/2)] & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[i(\theta + \pi/2)] \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp[-i(\theta + \pi/2)] & 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (13) \end{aligned}$$

Равенство (13) определено с точностью до произвольного фазового множителя $\exp(i\theta)$. Можно заключить, что в результате использования операции коррелированной редукции перепутанное (“несепарабельное” [8]) ЭПР-состояние замкнутой системы представлено в виде линейной комбинации прямых произведений операторов плотности разделенных (“сепарабельных”) коррелированных подсистем. Каждый член суммы (13) описывает одну из возможных экспериментальных реализаций.

Результаты работы можно сформулировать в виде следующих положений.

Предложен алгоритм самосогласованного вычисления коррелированных операторов плотности подсистем замкнутой квантовой системы методом последовательных приближений.

Результаты совпадают с общеизвестными в предельном случае, когда одна из подсистем замкнутой квантовой системы полагается макроскопической и обладающей бесконечной теплоемкостью и бесконечной температурой.

Литература

1. Клышко Д.Н.: Основные понятия квантовой физики с операциональной точки зрения. УФН **168**, 975 (1998)
2. Менский М.Б.: Квантовая механика: новые эксперименты, новые приложения и новые формулировки старых вопросов. УФН **170**, 631 (2000)
3. Килин С.Я.: Квантовая информатика. УФН **169**, 507 (1999)
4. Пригожин И.: Конец определенности. Ижевск: Редакция журнала “Регулярная и хаотическая динамика” 1999.
5. Ландау Л.Д.: Собрание трудов. Т. 1, стр. 19. Москва: Наука 1969.
6. Фон Нейман И.: Математические основы квантовой механики. Москва: Наука 1964.
7. Fano U.: Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. Rev. Mod. Phys. **29**, 74 (1957)
8. Блум К.: Теория матрицы плотности и ее приложения. Москва: Мир 1983.
9. Дирак П.: Принципы квантовой механики. Москва: Наука 1979.
10. Imoto N., Ueda M., Ogawa T.: Microscopic theory of the continuous measurement of photon number. Phys. Rev. A **41**, 4127 (1990)
11. Fucuo T., Ogawa T., Nakamura K.: Jaynes-Cummings model under continuous measurement: Weak chaos in a quantum system induced by unitarity collapse. Phys. Rev. A **58**, 3293 (1998)

Косвенное взаимодействие мессбауэровских ядер через электромагнитное поле вакуума

В. А. Попов

Лаборатория резонансных явлений

Получено выражение для оператора косвенного взаимодействия мессбауэровских ядер через электромагнитное поле. Для описания свойств мессбауэровских центров был использован формализм псевдоспинов, как это имеет место в теории оптических двухуровневых систем. Косвенное взаимодействие псевдоспинов выведено методом, заимствованным из теории сверхпроводимости. Оказалось, что потенциалы этого взаимодействия содержат слагаемые, убывающие как r^{-3} , r^{-2} , r^{-1} .

В теории эффекта Мессбауэра обычно не принимают во внимание взаимодействие ядер друг с другом, поскольку считается, что оно сводится только к магнитному диполь-дипольному взаимодействию [1], которое значительно меньше связи ядра с электронной оболочкой атома. Связанные с этим взаимодействием коллективные эффекты слабо проявляются еще и потому, что потенциал его убывает как r^{-3} .

Между тем из квантовой оптики, например, известно [2, 3], что косвенные взаимодействия локализованных частиц через поля-переносчики могут содержать слагаемые, убывающие медленнее с расстоянием (как r^{-2} , r^{-1}), и поэтому оказывающие более сильное влияние на физические свойства.

Благодаря более высокой, чем в оптике, добротности резонансных линий, можно ожидать, что косвенное взаимодействие более ярко проявится именно в мессбауэровской спектроскопии.

В связи с этим в настоящей работе предпринимается расчет косвенного взаимодействия мессбауэровских ядер через электромагнитное поле вакуума.

Вопрос о том, какие степени свободы оказываются здесь связаны косвенным взаимодействием, не является тривиальным. Он решается введением псевдоспина $S = 1/2$, который всегда можно сопоставить любым двум уровням энергии, хорошо отделенным от других состояний. Подобный формализм широко используется в оптике [4, 5].

Для вывода оператора косвенного взаимодействия используется метод, который хорошо зарекомендовал себя в теории сверхпроводимости со времени вывода Фрелихом [6, 7] оператора взаимодействия электронов для теории БКШ.

Структура гамильтониана двух взаимодействующих подсистем представляется в форме:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_{\text{sf}}, \quad (1)$$

где $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_f$, а $\mathcal{H}_s$ есть гамильтониан динамической подсистемы, состоящей из невзаимодействующих частиц, $\mathcal{H}_f$ – гамильтониан поля-перенос-

чика взаимодействия, V_{sf} – оператор взаимодействия между частицами двух подсистем. При этом предполагается, что для матричных элементов операторов выполняется неравенство $|V_{\text{sf}}| \ll \mathcal{H}_0$.

С помощью унитарного преобразования $U = \exp(-L)$ осуществляется переход в новое представление

$$\mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2}[V_{\text{sf}}, L] + O(V_{\text{sf}}^3), \quad (2)$$

в котором гамильтониан $\mathcal{H}$ теряет линейные по V_{sf} слагаемые, так как на генератор унитарного преобразования наложено условие:

$$V_{\text{sf}} + [\mathcal{H}_0, L] = 0. \quad (3)$$

Решением операторного уравнения (3) будет:

$$L = \frac{1}{i\hbar} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(\varepsilon t) V_{\text{sf}}(t),$$

$$V_{\text{sf}}(t) = \exp(i\mathcal{H}_0 t/\hbar) V_{\text{sf}} \exp(-i\mathcal{H}_0 t/\hbar). \quad (4)$$

Далее выражение (2) для $\tilde{\mathcal{H}}$ усредняется по состояниям поля-переносчика взаимодействия, так что член второго порядка

$$W = \frac{1}{2} \langle [V_{\text{sf}}, L] \rangle \quad (5)$$

теории возмущений в разложении (2) перестает зависеть от переменных электромагнитного поля, но сохраняет зависимость от псевдоспиновых операторов различных частиц и вследствие этого приобретает смысл оператора их косвенного взаимодействия.

В данной работе вычисляется взаимодействие одинаковых мессбауэровских ядер, спроектированное на определенную пару состояний $|I_g m_g\rangle$ и $|I_g m_c\rangle$ сверхтонкой структуры, на которой наблюдается мессбауэровский переход. Первое из них соответствует основному уровню энергии со спином I_g и его проекцией m_g , а второе – возбужденному состоянию со спи-

ном I_e и проекцией m_e . Тогда в качестве основного гамильтониана динамической подсистемы можно выбрать оператор:

$$\mathcal{H}_s = \hbar \omega_0 \sum_j S_j^z, \quad (6)$$

где ω_0 – частота рассматриваемого перехода, S_j^z – оператор псевдоспина одного ядра, определенный на указанных уровнях [4].

В качестве переносчика взаимодействия будем рассматривать электромагнитное поле, гамильтониан которого имеет стандартную форму:

$$\mathcal{H}_f = \hbar \sum_k \omega_k \left(a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right), \quad (7)$$

где $a_{k\sigma}^\dagger$ и $a_{k\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения фотона с волновым вектором $\mathbf{k}$, частотой ω_k и поляризацией σ .

Гамильтониан взаимодействия ядер и электромагнитного поля имеет вид

$$V_{\text{int}} = -\frac{1}{c} \sum_j \mathbf{j}_j \mathbf{A}(\mathbf{r}_j), \quad (8)$$

где $\mathbf{j}_j$ – ток j -ого нуклона, а потенциал электромагнитного поля представлен в виде разложения по операторам рождения и уничтожения фотонов с правой и левой круговой поляризацией.

Осуществим переход от гамильтониана (8) к эффективному двухуровневому гамильтониану. Для этого необходимо найти матричные элементы гамильтониана (8) на векторах состояния $|I_g m_g\rangle$ и $|I_e m_e\rangle$. Матричные элементы для операторов, относящихся к ядрам и к электромагнитному полю вычисляются отдельно. Процедура перехода к псевдоспинам становится более наглядной, если использовать приближение вращающейся волны [2, 4]. В этом случае в эффективном гамильтониане исключаются слагаемые $S^+ a^\dagger$ и $S^- a$, которые осциллируют с частотами, равными сумме частоты перехода ω_0 и частоты фотона $\omega_k = ck$. В гамильтониане остаются члены, которые соответствуют процессам излучения фотона при переходе $|I_e m_e\rangle \rightarrow |I_g m_g\rangle$ и поглощения фотона при переходе $|I_g m_g\rangle \rightarrow |I_e m_e\rangle$.

Эффективный гамильтониан взаимодействия псевдоспинов с электромагнитным полем, соответствующий магнитодипольному переходу M1 ($I_g = 1/2$, $m_g = 1/2$) $\rightarrow$ ($I_e = 3/2$, $m_e = 3/2$), имеет вид:

$$V_{ge} = \sum_j \sum_{k\sigma} (g_{k\sigma} S_j^+ a_{k\sigma} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + g_{k\sigma}^* S_j^- a_{k\sigma}^\dagger \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)),$$

$$g_{k\sigma} = i \sqrt{\frac{12\pi^2 \hbar c}{V k}} \sigma \mathbf{D}_{1\sigma}(\hat{\mathbf{z}} \rightarrow \hat{\mathbf{k}}) \langle 1/2 \| \mathbf{M}1 \| 3/2 \rangle^*, \quad (9)$$

где $\mathbf{D}_{1\sigma}(\hat{\mathbf{z}} \rightarrow \hat{\mathbf{k}})$ – матрица вращения собственных функций углового момента при переходе из лаборатор-

ной системы координат, в систему координат, где ось z совпадает с вектором $\mathbf{k}$ [1], а $\langle 1/2 \| \mathbf{M}1 \| 3/2 \rangle$ есть приведенный матричный элемент рассматриваемого перехода.

Подставив выражения (6), (7), (9) в формулы (4), (5) найдем оператор косвенного взаимодействия мессбауэровских ядер:

$$W = -\frac{1}{2} \sum_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \int_0^\infty \frac{k}{k - k_0} [4j_0(kr_{ij}) - (3 \cos^2 \theta_{ij} - 1) j_2(kr_{ij})] \left| \langle 1/2 \| \mathbf{M}1 \| 3/2 \rangle \right|^2 dk, \quad (10)$$

где $k_0 = \omega_0/c$, θ – угол между осью z и радиус-вектором $\mathbf{r}$, а $j_i(x)$ – сферические функции Бесселя.

Для вычисления интеграла (10) требуется ввести некоторые приближения. Во-первых, принимается, что потенциал ядра имеет вид осцилляторной ямы. Эта модель позволяет представить приведенный матричный элемент в виде:

$$\left| \langle 1/2 \| \mathbf{M}1 \| 3/2 \rangle \right|^2 = \frac{\Gamma_\gamma k^2}{2\pi k_0^3} \exp(-(k\rho)^2/2), \quad (11)$$

где Γ_γ – парциальная ширина γ -излучения на частоте перехода, ρ – радиус ядра.

Во-вторых, используется условие $k_0 \rho \ll 1$. В этом случае

$$W = -\frac{1}{2} \sum_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad (12)$$

где

$$A_{ij} = -\frac{\Gamma_\gamma}{4\pi} \sum_{ij} [4\Phi_0(\beta_{ij}) - (3 \cos^2 \theta_{ij} - 1)\Phi_2(\beta_{ij})], \quad (13)$$

а $\beta_{ij} = k_0 r_{ij}$.

Функции $\Phi(x)$ удобно представить в виде суммы осциллирующего и неосциллирующего слагаемых, $\phi(x)$ и $\phi(x)$ соответственно. Функции $\phi(x)$ являются линейной комбинацией функций Бесселя $j_n(x)$, поэтому имеют члены, убывающие как x^{-1} , x^{-2} , x^{-3} . Функции $\phi(x)$ при больших значениях аргумента могут быть аппроксимированы более простой зависимостью x^{-2} . Аналитические выражения для указанных функций здесь не приводятся из-за громоздкости, а графики представлены на рис. 1.

Для экспериментальных проявлений взаимодействия (12) наиболее удобным представляется измерение его вклада в сдвиг и ширину линии поглощения сигнала. В низкотемпературном приближении ($\hbar\omega_0 \gg kT$, $\langle S_i^z \rangle = -1/2$), первый и второй моменты линии поглощения для системы частиц, взаимодействие которых описывается оператором (12), имеют форму [9]:

$$M_1 = \frac{1}{N} \sum_{ij} A_{ij}, \quad M_2 = \frac{1}{N} \sum_i \left(\sum_j A_{ij} \right)^2. \quad (14)$$

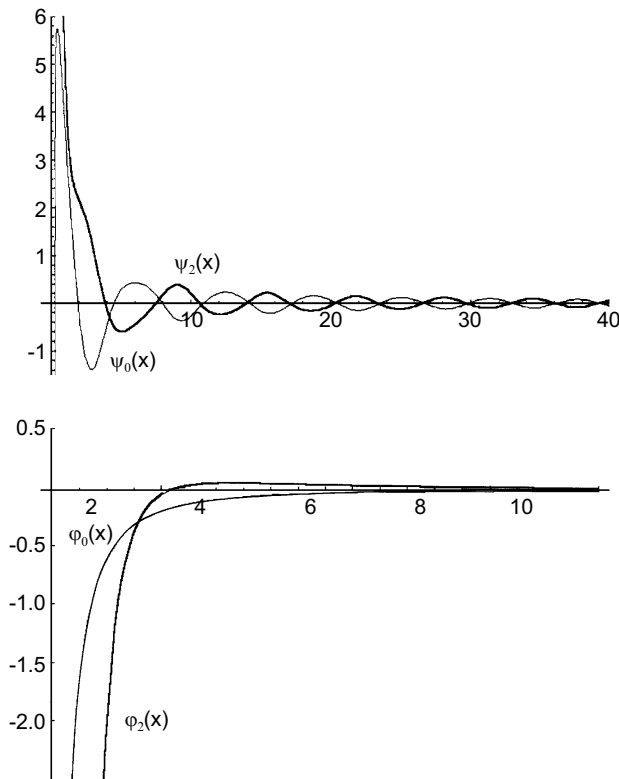


Рис. 1. Графики функций, определяющих зависимость потенциалов взаимодействия атомов от расстояния между ними.

Вычисление суммы в формулах (14) для полученных в этой работе потенциалов (12) и (13) является довольно сложной задачей. Это обусловлено тем, что длина волны гамма-излучения меньше межатомного расстояния и, из-за наличия осциллирующих функций, нельзя совершить обычный в таких ситуациях переход от суммирования к интегрированию. Кроме того, системы с регулярным расположением мессбауэровских ядер требуют иных методов вычислений, нежели вещества, в которых мессбауэровские центры имеют малую концентрацию.

Для качественных оценок вкладом осциллирующих слагаемых в (13) можно пренебречь и уширение резонансной линии, описываемое вторым моментом M_2 , будет определяться только последним слагаемым в (13)

$$\Gamma_{ss} = \Gamma_{\gamma} R n k_0^{-2}. \quad (15)$$

Согласно (15), взаимодействие (12) наиболее сильно может проявиться в веществах, у которых концентрация мессбауэровских изотопов велика, а величина перехода относительно мала. Этим условиям удовлетворяет ^{169}Tm со 100-процентным содержанием мессбауэровских ядер и $\hbar\omega_0 = 8.4 \text{ keV}$. Для него вклад в ширину линии, оцененный по формуле (15), оказывается порядка естественной ширины линии Γ_{γ} . В таких случаях эксперименты по изучению зависимости формы линии от концентрации ядер или размеров образца могут послужить средством для обнаружения двухчастичных взаимодействий мессбауэровских ядер.

Выше рассмотрено косвенное взаимодействие только одной пары спиновых подуровней мессбауэровских ядер. Результат (12) и (13) просто обобщается на случай нескольких подуровней путем замены операторов псевдоспина на проективные операторы, в которых единственным отличным от нуля является матричный элемент, соответствующий переходу $|I_g m_g\rangle \rightarrow |I_g m_g\rangle$, а потенциалы имеют структуру, аналогичную (13) для каждого разрешенного перехода $|I_g m_g\rangle \rightarrow |I_g m_g\rangle$.

Более подробное изложение полученных результатов можно найти в работе [10].

Литература

1. Андреева М.А., Кузьмин Р.Н.: Мессбауэровская гамма-оптика. Москва: Изд-во МГУ 1982.
2. Milonni P.W., Knight P.L.: Retardation in the resonant interaction of two identical atoms. *Phys. Rev. A* **10**, 1096–1108 (1974)
3. Ben-Aryeh Y., Bowden C.M., Englund J.C.: Intrinsic optical bistability in collection of spatially distributed two-level atoms. *Phys. Rev. A* **34**, 3917–3926 (1986)
4. Аллен Л., Эберли Дж.: Оптический резонанс и двухуровневые атомы. Москва: Мир 1978.
5. Agarwal G.S.: Quantum statistic theories of spontaneous emission and their relation to other approaches. *Springer Tracts in Modern Physics*, vol. 70. Springer 1974.
6. Fröhlich H.: Theory of the superconducting state. 1. The ground state of the absolute zero of temperature. *Phys. Rev.* **79**, 845–859 (1950)
7. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S.: Properties of slow electrons in polar materials. *Phil. Mag.* **41**, 221–242 (1950)
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.: Квантовая механика. Москва: Наука 1989.
9. Абрагам А., Гольдман М.: Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. Т. 2. Москва: Мир 1984.
10. Кессель А.Р., Попов А.Р.: Косвенное взаимодействие мессбауэровских ядер. *ФТТ* **43**, 1176–1180 (2001)

Супрамолекулярно-организованные среды со спин-переменными и усиленными оптическими свойствами на основе жидкокристаллических координационных соединений

Ю. Г. Галяметдинов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

На основе разработанной стратегии синтеза надмолекулярно-организованных жидкокристаллических систем из молекулярных блоков обладающих заданными физико-химическими свойствами, получены первые жидкие кристаллы со спин-переменными (комплексы Fe(III) с основанием Шиффа) и улучшенными люминесцентными (аддукты β -дикетонатов лантаноидов с сопряженными азотсодержащими гетероциклами) свойствами. Синтезированные соединения охарактеризованы и исследованы методами ИК-, ЯМР, Мессбауэровской спектроскопии, дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской дифракции, измерениями магнитной восприимчивости.

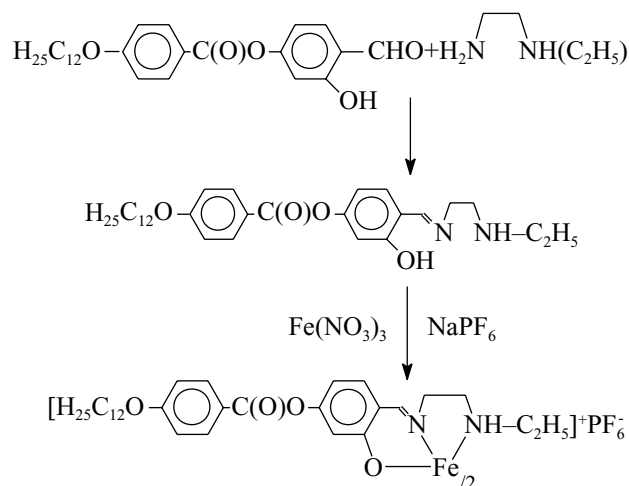
Современные тенденции создания молекулярных материалов с заданной функциональностью требуют перехода от конструирования молекулярных и супрамолекулярных (краун-эфиры, каликсарены, дендримеры, биомакромолекулы) блоков к надмолекулярно-организованным системам [1]. При этом, формирование наноструктур может осуществляться как физическими, так и химическими путями. Особое место среди последних занимают самоорганизующиеся системы, такие, например, как полимеры, коллоиды, жидкие кристаллы [2].

В последнее десятилетие, на основе разработанной стратегии синтеза молекулярных блоков, содержащих ионы металлов и обладающих жидкокристаллическими свойствами, получены проявляющие антиферромагнитные взаимодействия медьсодержащие полимеры [3], сегнетоэлектрики [4] и обладающие рекордной для жидких кристаллов магнитной анизотропией комплексы лантаноидов [5, 6].

В настоящее время показана определенная перспективность создания запоминающих устройств, основанных на фотоиндуцированных спиновых переходах [7], изготовлены первые образцы гибких экранов для светодиодных дисплеев на основе сопряженных полимеров. Достоинством жидкокристаллических сред в устройствах фотоники является возможность создать на их основе одноосно-ориентированные, линейно-поляризованные, свободные от дефектов слоевые структуры [8].

Демонстрацией успешной реализации разработанных принципов создания надмолекулярно-организованных жидкокристаллических систем на основе молекулярных блоков, обладающих заданными свойствами, являются результаты настоящего сообщения о получении первых жидких кристаллов со спин-переменными (комплексы Fe(III)) и улучшенными люминесцентными (производные лантаноидов) свойствами.

При синтезе комплексов Fe(III) модельным блоком служил нежидкокристаллический комплекс железа с основанием Шиффа, для которого описано существование спинового перехода. Ниже представлена схема синтеза его производного, имеющего необходимую для существования мезогенных свойств анизотричную структуру:



Жидкокристаллические свойства полученного соединения подтверждены данными поляризационной политермической микроскопии и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Установлено наличие смектической А мезофазы в интервале температур 388–419 К. Рентгеновские исследования в малых углах подтвердили наличие мезофазы со слоевой надмолекулярной организацией. Магнитные свойства были исследованы в области температур 4.5–460 К (рис. 1).

Соединение демонстрирует непрерывный спиновый переход. В соответствии с данными магнитной восприимчивости, переход почти полный как при высокой, так и при низкой температурах. Значение

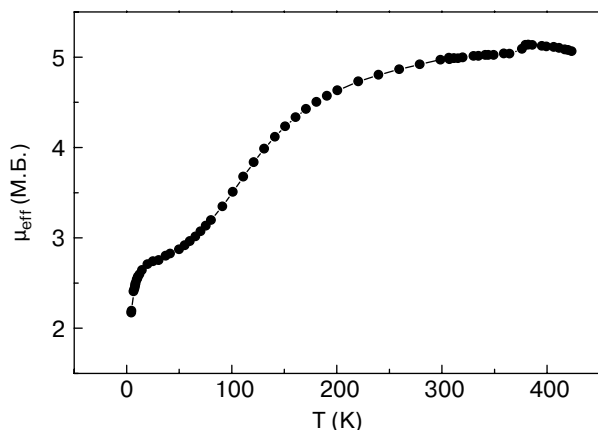


Рис. 1. Температурная зависимость эффективного магнитного момента μ_{eff} комплекса Fe(III).

эффективного магнитного момента при 400 К равно 5.14 М.Б., при ожидаемом для высокоспинового состояния значении 5.9 М.Б. Следовательно, при 4.6 К мы имеем 88% образца в низкоспиновом состоянии. Равновесная температура, при которой в образце соотношение обоих спиновых состояний равно 50%, равна 125 К. Результаты магнитных изменений подтверждены данными Мессбауэровской спектроскопии, опубликованными в [9]. Таким образом, впервые показана возможность получения вещества с одновременным существованием в нем спин-переменных и жидкокристаллических свойств.

В последние годы, в качестве материалов светодиодных гибких экранов, исследуются сопряженные полимеры с полупроводниковыми свойствами, содержащие комплексы лантаноидов с некоторыми основаниями Льюиса [10]. Одной из нерешенных проблем материалов для фотонных устройств остаётся получение надмолекулярно-организованных фотоактивных сред. Поэтому сочетание в производных лантаноидов люминесцентных и жидкокристаллических свойств явится существенным вкладом в решение проблемы создания надмолекулярных, анизотропных материалов для фотоники. Мы предприняли попытку синтезировать жидкокристаллические координационные соединения лантаноидов, удовлетворяющие вышеназванным условиям. В качестве одного из лигандов, обеспечивающих эффективную люминесценцию и жидкокристаллические свойства, был получен β -дикетон с длинными торцевыми алкоксильными заместителями. С целью осуществления переноса заряда (эффекта антенны) от полимера на ион металла нами синтезирован ряд аддуктов β -дикетоната лантаноидов с сопряженными азотсодержащими гетероциклами: 1,10-фенантролином (рис. 2а) и замещенным 2,2'-дипиридиллом (рис. 2б). Структуры полученных соединений приведены на рис. 2.

Состав и строение синтезированных продуктов подтверждены данными элементного анализа, ИК,

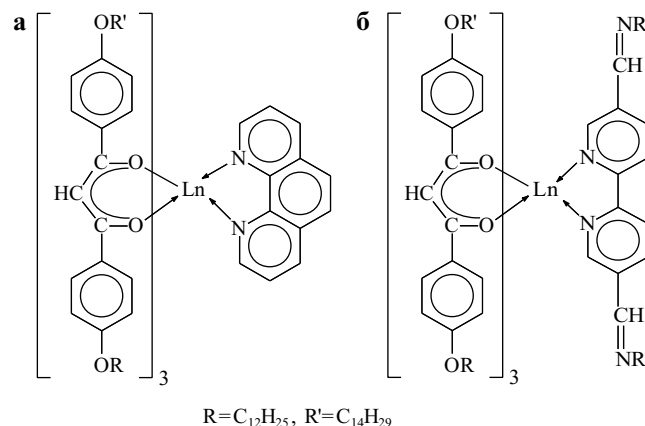


Рис. 2. Структуры синтезированных аддуктов лантаноидов.

ЯМР-спектроскопии. Результаты исследования жидкокристаллических свойств некоторых из изученных комплексов представлены в таблице 1.

Как следует из таблицы, большинство соединений обладают энантиотропными (возникающими при нагреве и охлаждении образца) жидкокристаллическими свойствами. Для всех продуктов наблюдалась верная текстура, характерная для смектической А (Sa) мезофазы. Полные результаты этой части работы опубликованы в [11].

Результаты данной работы подтверждают правильность выбранной концепции создания супрамолекулярно-организованных структур с требуемыми свойствами на основе жидкокристаллических молекулярных блоков, обладающих заданной функциональностью.

Участники: И. В. Овчинников – постановка проблемы и обсуждение результатов магнитных исследований комплекса Fe(III) со спин-переменными свойствами; Г. И. Иванова, О. А. Туранова, А. А. Князев, Ван Вен (Технический университет, Дармштадт) – синтез комплекса Fe(III) со спин-переменными свойствами.

Таблица 1. Температуры фазовых переходов аддуктов лантаноидов L_3LnX .

Соединение №	Ln	X	Температуры фазовых переходов (°C)	
			Cr-S _A ^a	S _A -I ^a
1	Eu	Phen	(142) ^б	155
2	Dy	Phen	84	141
3	Tb	Phen	82	143
4	La	Phen	84	145
5	Dy	Dipy	87	137
6	Er	Dipy	86	116

^a Cr – кристаллическая фаза; S_A – смектическая А-фаза; I – изотропная фаза.

^б Температура монотропного, возникающего при охлаждении, перехода I-S_A.

ми и комплексов лантаноидов; А. Н. Просвирин – ДСК, рентгенофазовые, магнитные исследования комплекса Fe(III) со спин-переменными свойствами; В. Хаазе (Технический университет, Дармштадт) – обсуждение результатов магнитных и рентгенофазовых измерений; В. Ксенофонов, П. Гютлих (Университет Иогана Гютенберга, Майнц) – проведение и обсуждение результатов Мессбауэровских и магнитных измерений.

Литература

1. Caruso F.: Nanoengineering of particle surfaces. *Adv. Mater.* **13**, 11–22 (2001)
2. Xia Y., Gates B.: Self-assembly approach to the three-dimensional photonic devices. *Adv. Mater.* **13**, 409–413 (2001)
3. Haase W., Griesar K., Soto-Bustamante E.A., Galyametdinov Yu.: Magnetic investigations on liquid crystalline metallopolymers. *Mol. Cryst. Liq. Cryst. A* **273**, A99–A111 (1995)
4. Athanassopoulou M.A., Hiller S., Beresnev L.G., Haase W., Galyametdonov Yu.: Dielectric, electrooptical and magnetic properties of metallomesogens. *Mol. Cryst. Liq. Cryst. A* **261**, 29–39 (1995)
5. Galyametdinov Yu., Athanassopoulou M., Griesar K., Kharitonova O., Soto-Bustamante E., Tinchurina L., Ovchinnikov I., Haase W.: Synthesis and magnetic investigations on rare-earth containing liquid crystals with large magnetic anisotropy. *Chem. Mater.* **8**, 922–926 (1996)
6. Galyametdinov Yu.G., Haase W., Malykhina L., Prosvirin A., Bikchantaev I., Rakhmatullin A., Binnemans K.: Synthesis, mesomorphic and unusual magnetic behavior of lanthanide complexes with perfluorinated counter-ions. *Chem. Eur. J.* **7**, 99–105 (2001)
7. Gütlich P., Garcia Y., Goodwin H.A.: Spin crossover phenomena in Fe(II) complexes. *Chem. Soc. Rev.* **29**, 419–427 (2000)
8. Abbate G., Oton J.M.: Liquid crystal-based photonic devices. *Adv. Mater.* **12**, 459–467 (2000)
9. Galyametdinov Yu., Ksenofontov V., Prosvirin A., Ovchinnikov I., Ivanova G., Gütlich P., Haase W.: First example of coexistence of thermal spin transition and liquid-crystal properties. *Angew. Chem. Int. Edit.* **40**, 4269–4271 (2001)
10. McGehee M.D., Bergstedt T., Zhang C., Saab A.P., O'Regan M.B., Bazan G.C., Srdanov V.I., Heeger A.J.: Narrow bandwidth luminescence from blends with energy transfer from semiconducting conjugated polymers to europium complexes. *Adv. Mater.* **11**, 1349–1354 (1999)
11. Галяметдинов Ю.Г., Туранова О.А., Ван В., Князев А.А., Хаазе В.: Синтез жидкокристаллических аддуктов β-дикетонатов лантаноидов с некоторыми основаниями Льюиса. *Докл. РАН, Химия* **384**, № 2 (2002)

Ян-теллеровские центры низкоспинового Ni^{3+} в оксидных керамиках

Т. А. Иванова

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

При исследовании керамик $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ и $\text{LaAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$, содержащих ионы низкоспинового Ni^{3+} , обнаружено понижение симметрии спектров ЭПР при уменьшении температуры. Показано, что наблюдаемые при низких температурах искажения центров NiO_6 обусловлены эффектом Яна-Теллера.

Основное число исследований эффекта Яна-Теллера (ЯТ) в случае орбитально вырожденного электронного дублета выполнено для иона Cu^{2+} (конфигурация d^9), причем определяющую роль в изучении этих явлений сыграл метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [1–3]. Для d^7 -ионов число наблюдений проявления электронно-колебательных взаимодействий в ЭПР значительно меньше. Обусловленные эффектом ЯТ искажения октаэдрических комплексов Ni^{3+} обнаружены в кристаллах KTaO_3 , SrTiO_3 , некоторых фторидах со структурой эльпасолита [4–6]. Динамический эффект ЯТ выше 77 К наблюдался в MgO , CaO , Al_2O_3 , SrTiO_3 [7–9]. В керамиках $\text{LaSr} \times \text{Al}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ с $0.01 < x < 0.15$ в позиции Al^{3+} (тетрагонально вытянутый октаэдр) нами наблюдались статические ЯТ центры NiO_6 аксиальной симметрии с основным состоянием d_z^2 [10]. При введении дополнительных ионов кислорода между плоскостями структуры возникали динамические ЯТ центры с температурной динамикой сигнала ЭПР, характерной для случая адиабатического потенциала с двумя основными близкими по энергии минимумами [11, 12]. В данной работе сообщается о двух новых экспериментальных фактах проявления ЯТ динамики в центрах NiO_6 в оксидных керамиках.

В $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ при $x = 0.4 \div 1.0$ обнаружены динамические ЯТ центры с кубической симметрией. В диапазоне температур $4.2 \div 90$ К наблюдалась трансформация спектра ЭПР от аксиальной симметрии с $g_{\perp} = 2.211 \pm 0.002$, $g_{\parallel} = 2.039 \pm 0.002$ к изотропному сигналу с $g = 2.155 \pm 0.001$ (рис. 1). Особенность исследуемых керамик состоит в статистически неравновероятном распределении ионов Al и Ni в кристаллической структуре. Как показано в [10], уже начиная с малых x имеет место кластеризация ионов никеля, приводящая к возникновению никелевой фазы в кислородно-алюминиевых слоях. Принимая во внимание установленное ранее уменьшение тетрагональной компоненты кристаллического поля в позициях, близких к интестиионному кислороду [12], а также возможность уменьшения тетрагональной компоненты кристаллического поля в NiO_6 при возникновении кооперативного эффекта ЯТ [13], мы интерпретировали

данные сигналы как возникающие в никелевой микрофазе в микрообластях, обогащенных интерстиционным кислородом. Такая модель подтверждается исчезновением описанных сигналов после отжига образца при температурах выше 600°C .

В керамике $\text{LaAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$, $x < 0.12$ обнаружена ЯТ динамика спектров ЭПР в комплексах NiO_6 с небольшими тригональными искажениями. В X-диапазоне наблюдалось уширение одиночной линии ЭПР с $g_{\text{эфф}} = 2.148$ при температурах ниже ~ 40 К. В Q-диапазоне при понижении температуры обнаружена трансформация слегка анизотропной линии ЭПР с $g'_{\perp} = 2.145 \pm 0.002$; $g'_0 = 2.154 \pm 0.002$ в ромбический спектр с $g_1 = 2.183 \pm 0.002$; $g_2 = 2.143 \pm 0.002$; $g_3 = 2.118 \pm 0.002$ (рис. 2). Наблюдаемые низкотемпературные эффекты объясняются понижением симметрии комплекса при совместном действии тригональной компоненты кристаллического поля кристалла и тетрагональных ЯТ искажений. Возникающее при этом

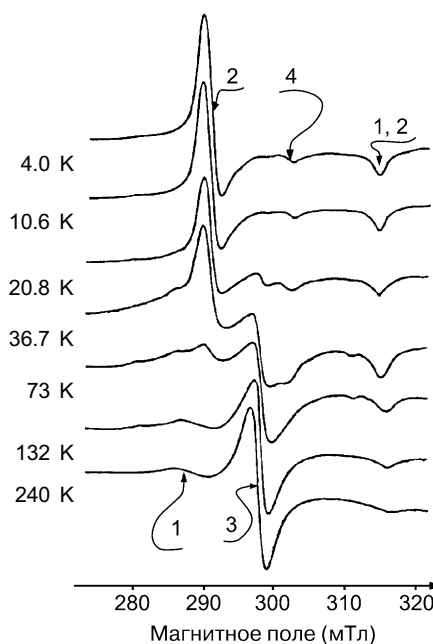


Рис. 1. Температурная зависимость спектра ЭПР $\text{LaSrNiO}_{4+\delta}$. $\nu = 9.32$ ГГц.

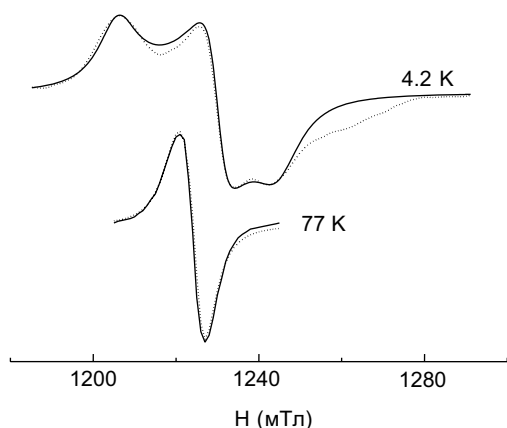


Рис. 2. Температурная зависимость спектра электронного парамагнитного резонанса $\text{LaAl}_{0.991}\text{Ni}_{0.009}\text{O}_3$. $\nu = 36.8$ ГГц. Пунктир – экспериментальный спектр; сплошная линия – теоретический спектр.

отклонение главных осей g -тензора от осей четвертого порядка характеризуется величиной угла $\Delta\gamma$. Усреднение тетрагональной ЯТ компоненты при высоких температурах приводит к повышению симметрии комплекса до C_{3v} . Из соотношения между параметрами низкотемпературного спектра g_1, g_2, g_3 и усредненного высокотемпературного спектра $g'_\perp, g'_\parallel$ следует, что $\Delta\gamma = 6.7^\circ$.

В работе принимали участие Яблоков Ю.В., Аугустиняк-Яблоков М. (Институт молекулярной физики ПАН, г. Познань), Петрашень В.Е.

Литература

1. Абрагам А., Блинн Б.: Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Москва: Наука 1972, 1973.
2. Ham F.S.: Jahn-Teller Effects in Electron Paramagnetic Resonance, pp. 1–119. New York: Plenum Press 1972.
3. Яблоков Ю.В., Усачев А.Е., Иванова Т.А.: Формирование кооперативных ян-теллеровских взаимодействий в кристаллах. Радиоспектроскопия конденсированных сред, стр. 141–180. Москва: Наука 1990.
4. Hannon D.M.: Electron paramagnetic resonance of Fe^{3+} and Ni^{3+} in KTaO_3 . Phys. Rev. **164**, 366–371 (1967)
5. Muller K.A., Berlinger W., Rubins R.S.: Observation of two charged states of nickel-oxygen vacancy pair in SrTiO_3 by paramagnetic resonance. Phys. Rev. **186**, 361 (1969)
6. Reinen D., Friebel C., Propach V.: High- und low-spin-verhalten des Ni^{3+} -ions in oktaedrischer koordination. (A) NiF_6^{3-} -polyeder. Z. Anorg. Allg. Chem. **408**, 187 (1974)
7. Wysling P., Hochli U., Muller K.A.: Resonance relaxation Ni^{3+} in MgO and CaO . Helv. Phys. Acta **37**, 629 (1964)
8. Geshwind S., Remeika J.P.: Spin resonance of transition metal ions in corundum. J. Appl. Phys. Suppl. **33**, 370–377 (1962)
9. Rubins R.S., Low W., Muller K.A., Rimai L., de Mars G.A.: Proceeding of the First International Conference on Paramagnetic Resonance, p. 59. New York: Academic Press 1963.
10. Yablokov Yu.V., Ivanova T.A., Shipunova S.Yu., Cheghina N.V., Zvereva I.A., Bobrisheva N.V.: About the nature of Ni^{3+} magnetic centers in the $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ ceramics. Appl. Magn. Reson. **2**, 547–558 (1991)
11. Иванова Т.А., Куковицкий Е.Ф., Усачев А.Е., Яблоков Ю.В.: Ян-теллеровская разновидность низкоспиновых Ni^{3+} центров в керамике $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$. СФХТ **5**, 860–864 (1992)
12. Иванова Т.А., Куковицкий Е.Ф., Усачев А.Е., Яблоков Ю.В., Зеленцов В.В., Фесенко Т.Н.: Структурная модель ян-теллеровских центров Ni^{3+} в керамике $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$. ФТТ **35**, 2829–2831 (1993)
13. Иванова Т.А., Яблоков Ю.В., Зинатуллина Н.С., Баязитов Р.М.: Особенности структурных свойств и электропроводности, вызываемые эффектом Яна-Теллера. ФТТ **41**, 418–422 (1999)

Особенности магнитного и диэлектрического поведения мезофаз комплексов хрома (III) с азоциклическими лигандами

Н. Е. Домрачева, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов

Лаборатория молекулярной спектроскопии

Методами ЭПР, магнитной восприимчивости и диэлектрической спектроскопии исследованы два (1, 2) парамагнитных металлomezогена хрома, обладающие полиморфизмом жидкокристаллических колончатых фаз. Для мезогена 1 методом ЭПР в колончатой Col_{hd} -фазе обнаружен необратимый структурный фазовый переход. Зафиксирована аномальная, нелинейная температурная зависимость положения резонансных полей линий ЭПР и параметра D тонкой структуры в мезофазах соединения 1. Показано, что эта аномалия обусловлена влиянием мягкой моды спектра колебаний кристаллической решетки. Данные диэлектрической спектроскопии подтверждают наличие мягкой моды, связанной с переходом системы из параэлектрического в дипольно-упорядоченное состояние. Структура колончатой пластической фазы мезогена 2 образована одним типом мономерных парамагнитных центров хрома и не проявляет специфических особенностей.

Известно, что создание мезогенных молекул, содержащих атомы металла (металломезогены) [1–3], заметно обогатило физические (оптические, магнитные, электрические) свойства жидких кристаллов. В частности, получены парамагнитные мезофазы с большой магнитной анизотропией [4], ведутся поиски жидкокристаллических полярных ахиральных систем [5].

В данной работе методом ЭПР исследованы два парамагнитных металлomezогена хрома(III) L1CrCl_3 (1) и L2CrCl_3 (2) с азоциклическими лигандами 1,4,7-три(3,4-дидецилоксибензил)-1,4,7-триазоциклононан **L1** и 1,3,5-три(3,4-дидецилоксибензил) гексагидро-1,3,5-триазин **L2**, имеющие близкое геометрическое строение координационного узла (рис. 1), но проявляющие существенно различные физические свойства.

Для мезогена L1CrCl_3 наблюдается необычный полиморфизм жидкокристаллических колончатых фаз (температуры фазовых переходов указаны в °C): K 42.0 Col_{xd} 68.5 Col_{hd} 167 Col_{rd} 223.5 I; где K – кристаллическая фаза, Col_{xd} – неидентифицированная, Col_{hd} – гексагональная и Col_{rd} – прямоугольная колончатые мезофазы, I – изотропная фаза. Комплекс L2CrCl_3 имеет только одну стабильную мезофазу (Col_{hp}) – колончатую гексагональную пластическую фазу: K 36 Col_{hp} 233.5 I.

Для выяснения различий в электронном строении металлomezогенов 1, 2 был использован метод ЭПР. Спектры снимались в X- и Q-диапазонах длин волн

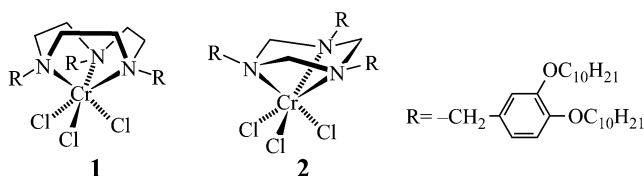


Рис. 1. Структурные формулы металлomezогенов 1 и 2.

для кристаллического, изотропного и мезоморфных состояний образца.

Все спектры ЭПР ионов хрома описывались спин-гамильтонианом с $S = 3/2$:

$$\mathcal{H} = g_{\parallel} \beta H_Z S_Z + g_{\perp} \beta (H_X S_X + H_Y S_Y) + D[S_Z^2 - S(S+1)/3] + E(S_X^2 - S_Y^2), \quad (1)$$

где D и E – параметры тонкой структуры, характеризующие величины аксиального и ромбического искажения, в октаэдрическом окружении иона хрома. Полагалось, что главные оси g - и D -тензоров магнитных центров параллельны.

ЭПР мезогенного комплекса 1

В зависимости от полиморфного состояния вещества наблюдается несколько типов спектров ЭПР. Симуляция спектров ЭПР в кристаллической фазе (назовем его А-тип) при комнатной температуре в X- и Q-диапазонах длин волн дает следующие значения параметров спин-гамильтониана: $g = 1.99$; $D = 0.17 \text{ см}^{-1}$, $E = 0.03 \text{ см}^{-1}$.

Перевод образца из кристаллической фазы в неидентифицированную колончатую мезофазу в процессе первого нагревания сопровождается необратимым структурным фазовым переходом (рис. 2), при котором резко меняется симметрия ближайшего окружения иона хрома и парамагнитные центры А-типа трансформируются в новые (назовем их В-типом) парамагнитные центры.

Температурная зависимость изменения нормированных интегральных интенсивностей спектров А- и В-типов парамагнитных центров при структурном фазовом переходе приведена на рис. 3.

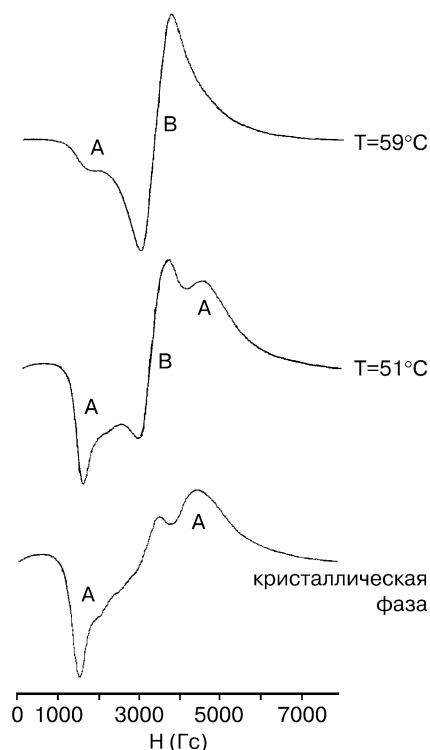


Рис. 2. Трансформация спектра ЭПР при структурном А → В фазовом переходе соединения 1.

Колончатые мезофазы (Col_{rd} , Col_{hd} , Col_{xd}) были исследованы при медленном охлаждении соединения 1 из изотропной фазы, поскольку именно при такой процедуре, согласно данным поляризационной микроскопии, наиболее четко различаются текстуры фаз.

Спектры ЭПР для различных видов колончатых фаз симулировались с помощью спин-гамильтониана (1). Температурные зависимости расчетных значений микроволновых резонансных полей (H_{res}), индивидуальных (ΔH) ширин линий (для параллельной $\mathbf{H} \parallel z(\text{C}_3)$ и перпендикулярной ориентаций внешнего магнитно-

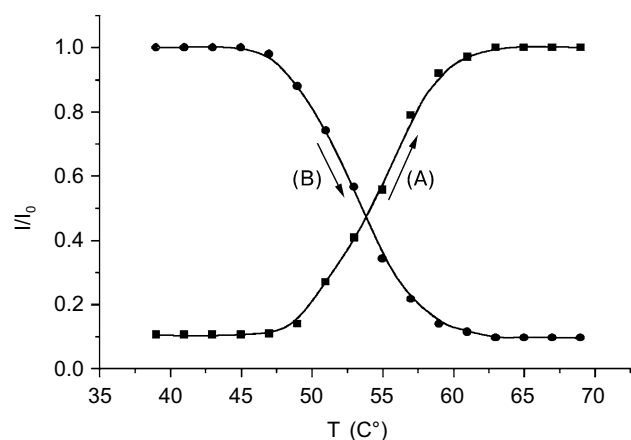


Рис. 3. Температурная зависимость изменения нормированных интегральных интенсивностей спектров А- и В-типов парамагнитных центров при структурном фазовом переходе.

го поля относительно C_3 -оси) и параметра D тонкой структуры приведены на рис. 4. Как видно из рисунка, поведение резонансных полей для параллельной и перпендикулярной ориентаций в области существования колончатых фаз различно. Кроме того, все наблюдаемые температурные зависимости при переходе из Col_{rd} , Col_{hd} фаз в колончатую Col_{xd} фазу существенно нелинейны.

Поведение сдвигов резонансных полей H_{res} и ширины линий (ΔH) аналогично поведению этих величин в анизотропных ферромагнетиках [6] и антиферромагнетиках [7] выше точки магнитного упорядочения и объясняется ростом спиновых корреляций [6] с понижением температуры.

Для выяснения природы данных аномалий были проведены измерения магнитной восприимчивости, диэлектрической проницаемости и времени диэлектрической релаксации соединения 1 в стандартных температурных режимах (охлаждение, нагрев) образца.

Магнитная восприимчивость подчиняется закону Кюри-Вейсса, $\chi = C/(T - \theta) + \chi_{\text{dia}}$, в температурном интервале $4.2 \div 400$ К, с константой C , соответствующей значению спина $S = 3/2$, $\chi_{\text{dia}} = -1023$ см³/мол и $\theta = 0.65$ К (рис. 5), что указывает на слабые ферромагнитные обменные взаимодействия ($J/k = 0.13$ К) между ионами хрома (III), явно недостаточными для объяснения обнаруженных аномалий за счет магнитного упорядочения.

Природа ЭПР регистрируемых аномалий, по-видимому, связана с присутствием внутреннего электрического поля на ионе хрома. Для подтверждения данного предположения в группе Ю. Фельдмана (Иерусалимский университет, Израиль) были проведены диэлектрические измерения. При температуре $T_c = 54.8^\circ\text{C}$ ($T_c = 327.9$ К) зафиксирован фазовый переход (рис. 6) из параэлектрического в дипольно-упорядоченное состояние, связанный с конденсацией мягкой моды.

В работах [8–10] показано, что нелинейная температурная зависимость положения линий ЭПР и параметра D тонкой структуры может быть связана с влиянием мягкой моды (оптической ветви спектра колебаний кристаллической решетки, чья частота стремится к нулю в точке фазового перехода для некоторой точки зоны Бриллюэна).

Учитывая зависимость частоты мягкой моды от температуры, волнового вектора ($\mathbf{q}$) и представляя вклад мягкой моды через смещение иона Cr^{3+} относительно окружающей решетки, получим аналогично [8] выражение для изменения D -тензора:

$$D(T) = D_0 + D_1 T + D_2 T \left[1 - \frac{|T - T_c|^{\gamma/2}}{\eta} \tan^{-1} \left(\frac{\eta}{|T - T_c|^{\gamma/2}} \right) \right], \quad (2)$$

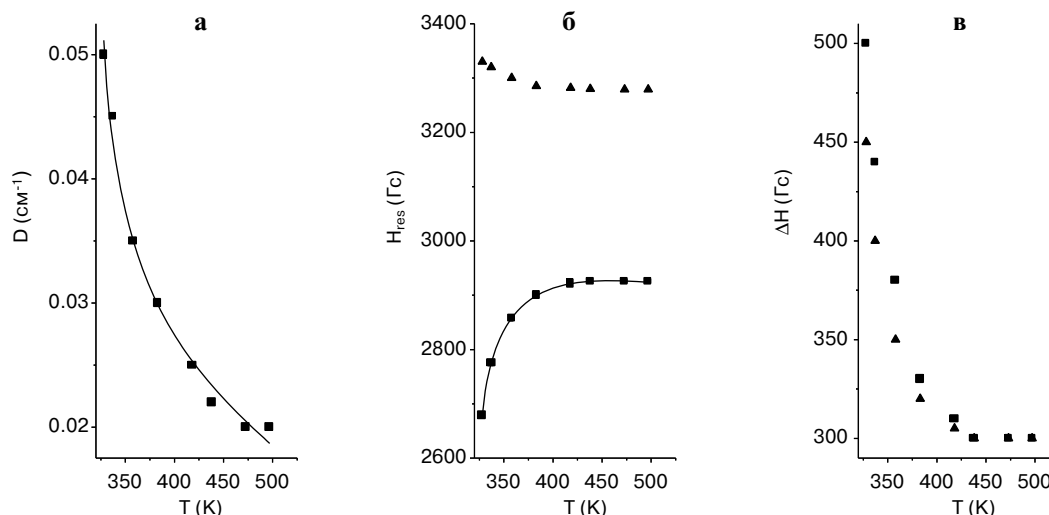


Рис. 4. Температурные зависимости параметра D (а), резонансных полей (б) и ширин линий (в) в колончатых фазах мезогена **1**. Сплошные линии – аппроксимация согласно формуле (2) температурной зависимости D и $H_{\parallel}$ с учетом мягкой моды. Параметры аппроксимации: $D_0 = 0.04188 \text{ см}^{-1}$, $D_1 = -0.00005 \text{ см}^{-1}/\text{K}$, $D_2 = 0.00008 \text{ см}^{-1}/\text{K}$, $H_0 = 3151.3 \text{ Гс}$, $H_1 = -0.368 \text{ Гс}/\text{K}$, $H_2 = -1.102 \text{ Гс}/\text{K}$, $T_c = 327.8 \text{ K}$, $\gamma = 1.415$, $\eta = 20.09$. $\blacktriangle$ $H_{\perp}$ (б) и $\Delta H_{\perp}$ (в); $\blacksquare$ $H_{\parallel}$ (б) и $\Delta H_{\parallel}$ (в).

где $\eta = \beta q_m / \alpha$ и q_m – максимальное значение волнового вектора q .

Аномальные сдвиги резонансных полей тесно связаны с изменением D -тензора. Учет линейной связи между резонансным значением положения линии ЭПР и величиной D [10, 11] приводит к аналогичному (2) выражению для температурной зависимости положения резонансных полей иона Cr^{3+} в параэлектрических фазах.

Температурные зависимости $H_{\parallel}$ и D были аппроксимированы, используя выражение (2) (рис. 4). Как видно из рисунка, такая аппроксимация хорошо описывает экспериментальные данные, что подтверждает влияние мягкой моды на спектры ЭПР ионов хрома соединения **1** в параэлектрической фазе. Значения параметров γ и η близки к значениям характерным для ферроэлектрических (сегнетоэлектрических) фазовых переходов, фиксируемых методом ЭПР [9, 10].

Таким образом, аномальные температурные зависимости параметра D и резонансного $H_{\parallel}$ значения поля соединения **1** в параэлектрической фазе обусловлены влиянием мягкой моды спектра колебаний кристаллической решетки.

Проявление в спектрах ЭПР мезофаз комплекса хрома мягкой моды обусловлено динамическим процессом дипольного упорядочения в системе. Конкретная структура, приводящая к модели двухъямной потенциальной энергии, необходимой для объяснения динамического процесса, также как и необычные для соединений хрома (III) значения g -фактора будут обсуждены нами в отдельной работе.

Полученный результат, независимо от объясняющей его конкретной структурной модели, представляет интерес в связи с проблемой поиска жидкокристаллических надмолекулярных структур с коллективными дипольными свойствами.

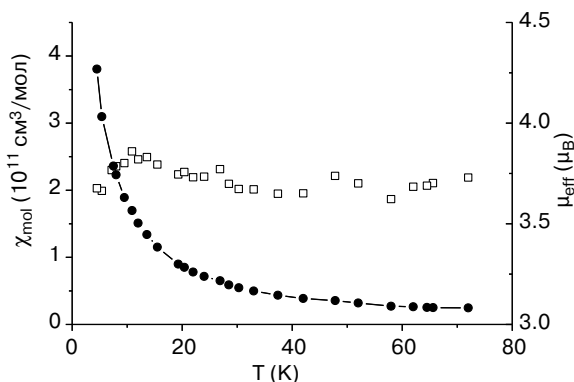


Рис. 5. Температурная зависимость молярной магнитной восприимчивости (●) и магнитного момента (□) соединения **1**.

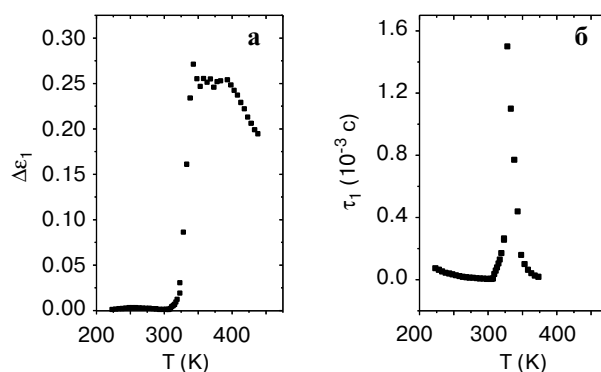


Рис. 6. Температурная зависимость изменения действительной части диэлектрической проницаемости соединения **1** (а) и времени диэлектрической релаксации (б) в Col_{hd} -фазе.

ЭПР соединения 2

Спектр ЭПР (X-диапазон) соединения **2** (L2CrCl_3) во всей области существования колончатой пластической фазы и в застеклованном анизотропном растворителе (эвтектической смеси МББА (4-метоксибензильден-4'-*n*-бутиланилин) + ЭББА(4-этоксибензильден-4'-*n*-бутиланилин)) имел идентичную форму и состоял из двух линий с эффективными g -факторами $g_{\text{ef}} \approx 2$ и $g_{\text{ef}} \approx 4$. Наблюдаемый тип порошкообразного спектра (реализуется случай сильных кристаллических полей) хорошо изучен в литературе и идентичен спектру трис-хелатного ацетилацетонатного комплекса хрома $\text{Cr}(\text{acac})_3$. Регистрируемые линии тонкой структуры принадлежат переходу $1/2 \rightarrow -1/2$ в параллельной ($g_{\text{ef}} \approx 2$) и перпендикулярной ($g_{\text{ef}} \approx 4$) ориентациях магнитного поля относительно выделенной молекулярной C_3 -оси комплекса. В Q-диапазоне длин волн ($\nu = 36.5$ ГГц) сдвиг линии, обязанной перпендикулярной ориентации, позволил определить величины параметров тонкой структуры: $D = 0.6 \text{ см}^{-1}$; $E = 0.008 \text{ см}^{-1}$; $g = 1.98$. Ориентирование соединения **2** в анизотропной жидкокристаллической матрице (эвтектической смеси МББА + ЭББА) показало, что способ ориентирования комплекса L2CrCl_3 также аналогичен способу ориентирования $\text{Cr}(\text{acac})_3$ в этой матрице, а именно, осью C_3 вдоль направления директора, при таком способе ориентирования параллельная компонента спектра ЭПР с $g_{\text{ef}} \approx 2$ максимальна по интенсивности при $\gamma = 0$, где γ – угол между внешним магнитным полем и направлением директора.

Таким образом, структуру колончатой пластической фазы соединения **2** формирует один тип мономерных парамагнитных центров хрома, в этих центрах выделенной молекулярной осью симметрии является ось C_3 (вдоль нее направлена магнитная z -ось D -тензора); октаэдрическая симметрия координацион-

ного узла иона хрома имеет достаточно сильное аксиальное ($D = 0.6 \text{ см}^{-1}$) и незначительное ($E = 0.008 \text{ см}^{-1}$) ромбическое искажение.

Настоящая работа выполнена согласно плану научных исследований лаборатории молекулярной радиоспектроскопии по теме “Магнитные жидкие кристаллы” совместно с немецкими химиками (Латтерманном Г., Фачером А.), синтезировавшими исследуемые соединения (Университет Байройта, Германия). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 99-03-32716) и опубликована в ФТТ **43**, 1145–1151 (2001).

Литература

1. Giroud-Godquin A.M., Maitlis P.M.: Metal complexes in organized fluid phases. *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.* **30**, 375 (1991)
2. Hudson S.A., Maitlis P.M.: Metal-containing liquid crystals with rod-like shapes. *Chem. Rev.* **93**, 861 (1993)
3. Serrano J.L. (ed.): *Metallomesogens: Synthesis, Properties and Applications*. New York: VCH 1996.
4. Galyametdinov Y., Ivanova G., Ovchinnikov I., Prosvirin A., Guillon D., Heinrich B., Dunmur D., Bruce D.: X-ray and magnetic birefringence studies of some lanthanide metallomesogens with Schiff base ligands. *Liq. Cryst.* **20**, 831 (1996)
5. Blinov L.M.: On the way to polar achiral liquid crystals. *Liq. Cryst.* **24**, 143 (1998)
6. Huber D.L., Seehra M.S.: Electron paramagnetic resonance in anisotropic magnets. *Phys. Stat. Sol. (b)* **74**, 145 (1976)
7. Yokozawa Y.: Short range order effects on EPR frequencies in Heisenberg linear chain antiferromagnets. *J. Phys. Soc. Jap.* **31**, 1590 (1971)
8. Tzuchida K., Abe R.: Anomalous temperature dependence of D tensor in the ESR spectrum of Fe^{3+} ions doped in KDP and DKDP crystals. *J. Phys. Soc. Jap.* **46**, 1225 (1979)
9. Barb D., Grecu N.M., Grecu V.V., Popescu F.F.: EPR evidence of soft mode contribution to the ferroelectric transition in ammonium sulphate. *Chem. Phys. Lett.* **56**, 355 (1978)
10. Mamin G.V., Efimov V.N.: The Ti^{2+} paramagnetic defects in K_2SeO_4 crystals. *Ferroelectrics* **233**, 111 (1999)
11. Burns G.: EPR in powders. *J. Appl. Phys.* **32**, 2048 (1961)

ЭПР супрамолекулярных сетчатых структур с четырьмя центрами меди

Н. Е. Домрачева

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Методом ЭПР исследованы тетраядерные кластеры меди. Определены взаимодействия, ответственные за эффективность внутримолекулярного обмена в кластере, найдены их величины.

Настоящая работа выполнена совместно с немецкими физиками (В. Бичем и А. Миреа, Университет Байройта, Германия) в рамках гранта SFB 481.

Исследовались четырехцентровые супрамолекулярные кластеры. Эти объекты интересны тем, что служат молекулярными строительными блоками для наноструктурных функциональных материалов и являются идеальными модельными системами для исследования внутримолекулярных (прогнозируемых) магнитных свойств, в частности, изучения механизма обменных взаимодействий между четырьмя спинами, упакованными в плоско-квадратную решетку (сетку). Методом ЭПР исследовалась структура, образованная четырьмя ионами меди, обменно-связанными четырьмя бис(бипиридил)-пирамидиновыми лигандами (рис. 1а, б). Данные измерений температурной зависимости интенсивности линий ЭПР (рис. 1в) обнаружили антиферромагнитный характер внутримолекулярной связи спинов Cu(II) в кластере. Определены величины изотропных обменных ($J = -5 \div -47$ К) взаимодействий в кластерах с различными функциональными заместителями в пирамидиновом лиганде. Используя ЭПР данные для моноядерного аналога Cu(II)-(терпиридин)₂, для которого удалось наблюдать сверхтонкую структуру ядер N и H, входящих в лиганд, в работе показано, что два вклада, такие как анизотропный спиновый обмен и кооперативный эффект Яна-Теллера, ответственны за эффективность внутримолекулярных обменных взаимодействий в четырехцентровых кластерах. Для случая статического эффекта Яна-Теллера определены величины анизотропных обменных взаимодействий.

Работа опубликована: Electronic Properties of Molecular Nanostructures (Kuzmany H. et al., eds.), vol. 591, pp. 529–532. New York: AIP 2001.

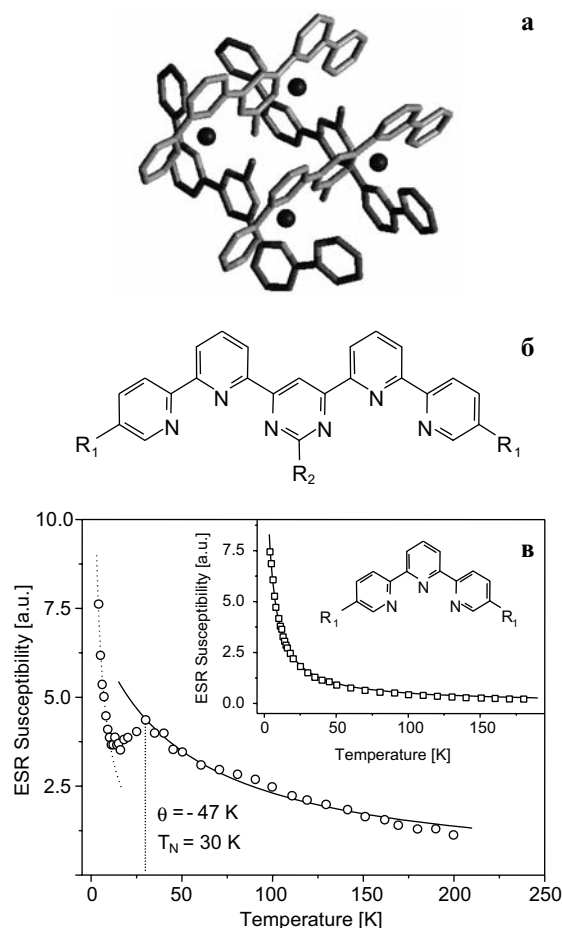


Рис. 1. а Схематический вид тетраядерного Cu-[2×2] комплекс катиона (восемь PF₆⁻ анионов не показано). б Схематическое представление бис(бипиридил)-пирамидинового лиганда. в Температурная зависимость интегральной ЭПР интенсивности для Cu-[2×2] структуры с заместителями R₁ = CH₃; R₂ = H и моноядерного Cu-[1×1] аналога с терпиридиновым лигандом R₁ = CH₃ (вставка). Сплошная линия для тетраядерного комплекса соответствует закону Кюри-Вейса.

Электронная релаксация в водных и водно-глицериновых растворах нитрата гадолиния

Г. П. Вишневская, Е. Н. Фролова, А. Р. Фахрутдинов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Методом нерезонансного парамагнитного поглощения в параллельных полях измерены времена электронной спин-решеточной релаксации ионов Gd^{3+} , а также исследованы спектры ЭПР для водно-глицериновых растворов $Gd(NO_3)_3$ в широком диапазоне температур и вязкостей. Экспериментальные данные интерпретированы на основе теории, согласно которой спиновая релаксация обусловлена модуляцией компонент тензора тонкого расщепления вращательным движением аквакомплексов. Показано, что линии ЭПР уширены неоднородно, и их анализ дает завышенные значения времен корреляции и эффективных в релаксации параметров тонкой структуры. Точные значения этих параметров определены из данных по спин-решеточной релаксации и подтверждены на основе симуляции спектров ЭПР с разрешенной тонкой структурой в растворах с большим содержанием глицерина и в разбавленных (<0.01 М Gd^{3+}) водных растворах. Установлена связь релаксационных параметров со структурой растворов и её перестройками.

Настоящая работа выполнена согласно плану научных исследований лаборатории молекулярной радиоспектроскопии: исследование растворов парамагнетиков радиоспектроскопическими методами, и включает в себя результаты, полученные в 2001 г. Необходимость ее выполнения связана с существующим в литературе большим разбросом подходов к интерпретации температурных зависимостей ширины линий ЭПР в разбавленных водных растворах соединений Gd^{3+} [1–4]. Он заключается в выборе механизмов релаксации, моделей для времен корреляции, статической или динамической природы параметров тонкой структуры. Авторы работ [1–4] полагали, что линии ЭПР уширены только за счет релаксационных процессов, хотя для систем со спином $S > 1/2$ они могут испытывать и неоднородное уширение вследствие неполностью усредненной тонкой структуры даже в водных растворах [5]. В последнем случае использование метода ЭПР дает неточную оценку величин времен спин-решеточной релаксации T_1 , знание которых имеет большое значение при использовании растворов Gd^{3+} в качестве контрастных веществ в ЯМР-томографии. Значительные разногласия существуют также в оценке координационного числа N для аквакомплексов гадолиния в водных растворах, которое, согласно данным разных методов [3–7], может иметь значение, равное 8 или 9 и соответствовать различному статическому искажению гидратных оболочек.

В представляемой работе мы рассмотрим особенности проявления внутримолекулярной электронной релаксации не только в водных, но и в водно-глицериновых растворах нитрата гадолиния и попытаемся решить некоторые из перечисленных проблем. При этом мы будем опираться на преимущества ис-

пользования двух независимых и дополняющих друг друга радиоспектроскопических методов: ЭПР и позволяющего проводить прямые измерения времен электронной релаксации T_1 и T_2 метода нерезонансного парамагнитного поглощения в параллельных полях (НПП) [8, 9].

Теория

Согласно механизмам внутримолекулярной релаксации в растворах для систем, обладающих начальным расщеплением в нулевом магнитном поле, средние значения скоростей релаксации для спина $S = 7/2$ имеют вид [10–12]:

$$\left\langle \frac{1}{T_1} \right\rangle = \frac{12}{5} \Delta^2 \left(\frac{\tau_r}{1 + \omega_0^2 \tau_r^2} + \frac{4\tau_r}{1 + 4\omega_0^2 \tau_r^2} \right), \quad (1)$$

$$\left\langle \frac{1}{T_2} \right\rangle = \frac{6}{5} \Delta^2 \left(3\tau_r + \frac{5\tau_r}{1 + \omega_0^2 \tau_r^2} + \frac{2\tau_r}{1 + 4\omega_0^2 \tau_r^2} \right). \quad (2)$$

Для центрального перехода ($1/2 \leftrightarrow -1/2$) [3]:

$$\frac{1}{T_2} = \Delta^2 \left[\frac{(10.5 \pm 0.5)\tau_r}{1 + (0.637 \pm 0.006)\omega_0^2 \tau_r^2} + \frac{(1.5 \pm 0.5)\tau_r}{1 + (9.2 \pm 3.1)\omega_0^2 \tau_r^2} \right]. \quad (3)$$

Здесь $\Delta^2 = (2/3)D^2 + 2E^2$ – параметр тонкой структуры, эффективный в релаксации; если параметр ромбичности $E = 0$, аксиальное искажение локальной симметрии комплекса характеризуется величиной $D = \sqrt{1.5} \Delta$; τ_r – время корреляции соответствующего движения, модулирующего величину расщепления в нулевом магнитном поле; ω_0 – частота Лармора.

Результаты

Примеры экспериментальных зависимостей ширины линий ЭПР от состава растворителя и температуры представлены на рис. 1 и 2. Согласно экспериментальным данным, основной вклад в релаксацию, особенно при условии $\omega_0^2 \tau_2^2 > 1$, дает переход $+1/2 \leftrightarrow -1/2$. Поэтому для извлечения микроскопических параметров из ширины линий ЭПР следует пользоваться формулой (3).

Методом НПП измерены времена спин-решеточной T_1 и спин-спиновой T_2 релаксации ионов Gd^{3+} . Установлено, что значения T_1 практически не зависят от концентрации Gd^{3+} , т.е. определяются внутримолекулярными механизмами релаксации, тогда как T_2 изменяются с ростом концентрации ($T_2 \sim C^{-1}$) и определяются преимущественно диполь-дипольными взаимодействиями при $C \geq 0.1 \text{ М}$ (см. таблицу 1).

Значения параметров тонкой структуры Δ для аквакомплексов Gd^{3+} при 298 К, полученные из анализа ширины линий при формальном предположении, что они уширены однородно, приведены на рис. 3. Здесь же представлены величины Δ , определенные из данных по T_1 . Величины Δ , полученные обоими методами, не зависят от нагревания в растворах с преимущественным содержанием воды и незначительно возрастают при нагревании до 400 К в растворах с преимущественным содержанием глицерина, стремясь к величинам Δ в чисто водных растворах. Слабая зависимость или отсутствие зависимости Δ от температуры и вязкости свидетельствует о статической природе эффективного в релаксации параметра тонкой структуры, т.е. определяющим релаксационным механизмом является механизм Мак-Гарви [10, 11], т.к. в механизме Бломбергена-Моргана [12] па-

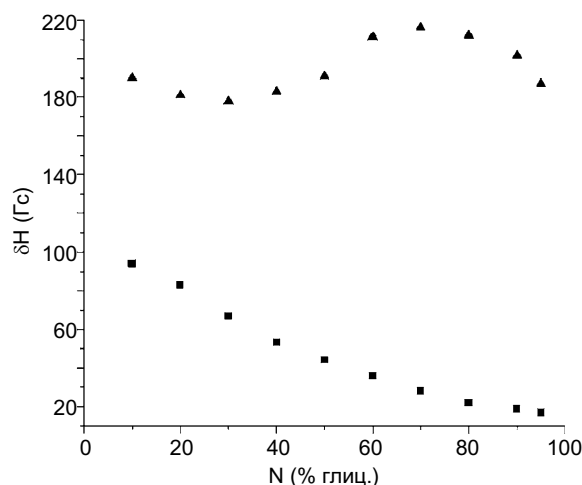


Рис. 1. Зависимость δH_0 ($\delta H_0 = \delta H_{\text{экс}} - \delta H_{\text{дл}}$, где $\delta H_{\text{экс}}$ – экспериментальная ширина линий ЭПР, $\delta H_{\text{дл}}$ – теретическая оценка вклада, обязанного диполь-дипольному взаимодействию) для 0.1 М растворов $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ от содержания глицерина в растворе при 298 К в X- (▲) и Q-диапазоне длин волн (■).

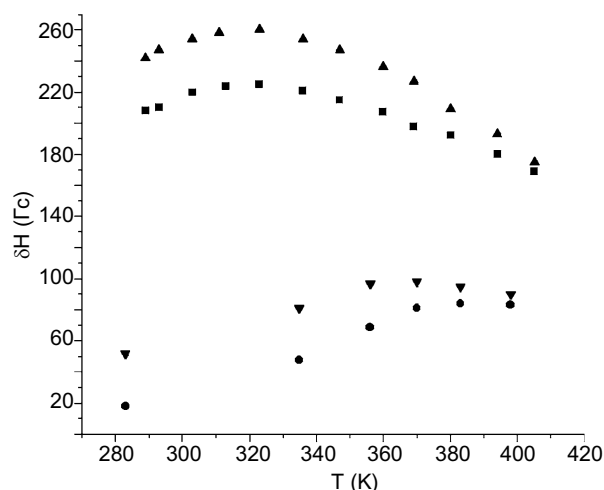


Рис. 2. Температурные зависимости экспериментальных ($\delta H_{\text{экс}}$) ширины линий в X- (▲) и Q- (▼) диапазонах длин волн и δH_0 ($\delta H_0 = \delta H_{\text{экс}} - \delta H_{\text{дл}}$) в X- (■) и в Q- (●) диапазонах длин волн для 0.1 М $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ в растворителе, содержащем 85% глицерина и 15% воды.

раметр Δ должен меняться с изменением интенсивности столкновений аквакомплекса с молекулами растворителя.

Несмотря на качественное согласие в температурных и вязкостных зависимостях величин Δ , определенных различными методами, количественно они существенно различаются. Показано, что причиной такого разногласия является неоднородное уширение линий ЭПР. Прямым доказательством наличия такого уширения является неравенство $\delta H_{\text{ЭПР}} > \delta H_{\text{рел}}$. Здесь

$$\delta H_{\text{рел}} = \frac{2}{\gamma\sqrt{3}} \left(\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_2} \right),$$

а T_1 и T_2 измерены методом НПП. Например, при $C = 0.2 \text{ М}$ $\delta H_{\text{ЭПР}} = 300 \text{ Гс}$, $\delta H_{\text{рел}} = 85 \text{ Гс}$; при $C = 2 \text{ М}$ $\delta H_{\text{ЭПР}} = 490 \text{ Гс}$, $\delta H_{\text{рел}} = 215 \text{ Гс}$. Установлено, что неоднородное уширение линий ЭПР возникает в результате взаимодействия растворенного вещества со стенками тонких “волосных” капилляров (более подробно явление адсорбции будет рассмотрено в последующих работах). В результате в разбавленных водных

Таблица 1. Значения времен спин-решеточной T_1 и спин-спиновой релаксации T_2 ($\times 10^{-9} \text{ с}$) при различных концентрациях Gd^{3+} в водных и глицериновых (95%) растворах; $\omega = 0.6 \cdot 10^{10} \text{ рад/с}$, $T = 298 \text{ К}$.

C (М)	Водные растворы		Глицериновые растворы	
	T_1	T_2	T_1	T_2
0.1–0.5	3.67		9.9	
0.5		1.00		0.19
1.0			6.8	
3.6	2.71	0.14		

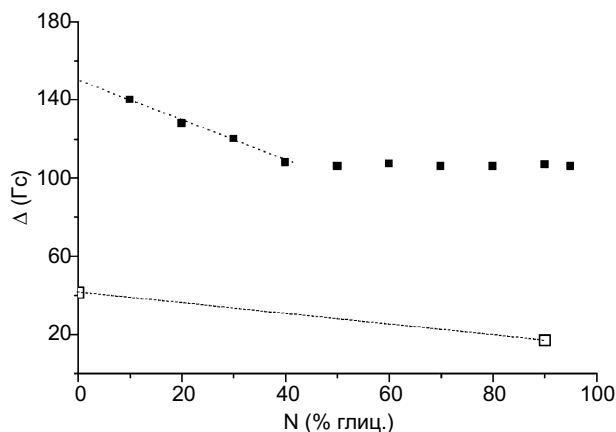


Рис. 3. Величины параметров тонкой структуры Δ при различном содержании глицерина в растворе, полученные из анализа ширины линий (■) и времен спин-решеточной релаксации (□), измеренных при различных ω_0 (298 К).

растворах $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ наблюдается частично разрешенная тонкая структура спектров ЭПР (рис. 4), которая описывается спин-гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = g\beta\mathbf{H}\mathbf{S} + D\left[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1)\right] + E(S_x^2 - S_y^2)$$

с $D \ll h\nu$ и $E \ll D$.

Полностью разрешенная тонкая структура спектров ЭПР наблюдается в Q-диапазоне длин волн для 0.1 М растворов $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ с содержанием глицерина от 70 до 95% (величина $D = \sqrt{1.5} \Delta = 110 \pm 5$ Гс). Точность величин Δ , определенных из данных по T_1 , подтверждена на основе симуляции спектров ЭПР с использованием указанных параметров и их согласием с экспериментальными спектрами. Малые абсолютные значения параметров тонкой структуры свидетельствуют о преимущественном присутствии в растворах аквакомплексов с высокой локальной симметрией, которые следует отнести к 8-координированным ионам Gd^{3+} .

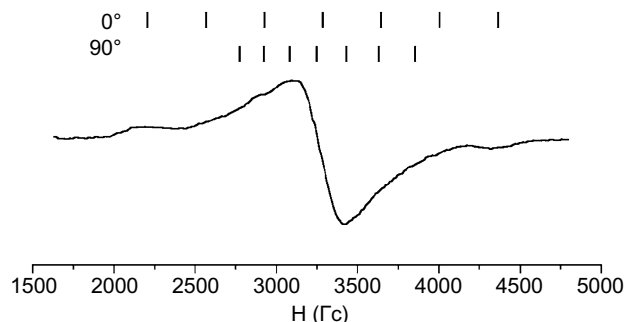


Рис. 4. Спектр ЭПР 0.01 М водного раствора $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ в X-диапазоне длин волн при 298 К. Положение линий тонкой структуры рассчитано с использованием величины $D = 180$ Гс, полученной из данных по T_1 .

Температурные и вязкостные зависимости времен корреляции для вращательного движения комплексов, приведены на рис. 5. Они объяснены на основе применения понятия о микровязкости, действующей на границе парамагнитный комплекс-растворитель. Определены параметры микровязкости $k = \tau_c/\tau_D$, где τ_D вычислено по формуле Дебая, и показано, что в концентрированных по глицерину растворах $k \rightarrow 0$ (скольжение в “клетке” структурированного растворителя). Определены энергии активации, имеющие в водных растворах в диапазоне температур 298–400 К величины $E_1 = 3.35$ ккал/м (из данных ЭПР) и $E_2 = 2.5$ ккал/м (из данных T_1). Здесь $E_1 > E_2$ в результате эффектов адсорбции в тонких капиллярах.

В растворах с преимущественным содержанием глицерина (80–95%) энергии активации, полученные обоими методами, совпадают. Но их величины различаются для разных температурных диапазонов: $E_1 = 3.8$ ккал/м в области температур 290–340 К и $E_2 = 2.65$ ккал/м в области температур 350–410 К.

Анализ микропараметров, полученных из релаксационных данных, позволяет установить их связь со структурой растворов. Незначительное уменьшение величин Δ с увеличением содержания глицерина может быть связано с внедрением аквакомплексов Gd^{3+} в “клетки” сильно структурированного водородосвязанного растворителя. Симметрия аквакомплексов может также повышаться за счет связывания глицерином молекул воды из нестабильных внешних гидратных оболочек гадолиния. Следует считать, что формирование упорядоченной структуры раствора при 298 К заканчивается при содержании глицерина 60 и больше объемных процентов. Наличие в таких растворах двух величин энергий актива-

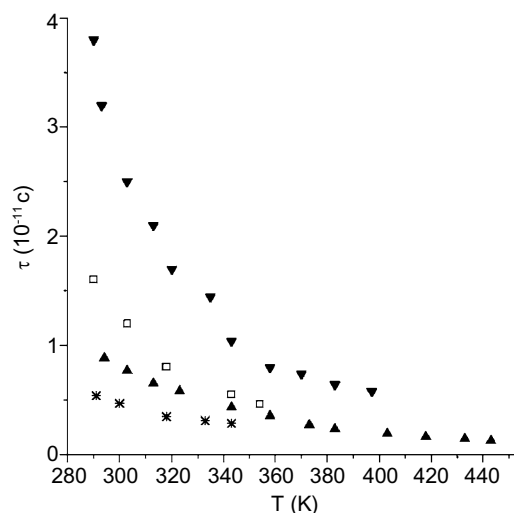


Рис. 5. Температурные зависимости времен корреляции τ_c : для водных 0.1 М растворов Gd^{3+} , полученных из анализа времен спин-решеточной релаксации (*) и ширины линий ЭПР (▲), и для водно-глицериновых (90% глицерина) 0.1 М растворов Gd^{3+} , полученных из анализа времен спин-решеточной релаксации (□) и ширины линий ЭПР (▼).

ции отражает ситуацию, при которой аквакомплексы Gd^{3+} вращаются или в “клетках” сильно структурированного растворителя или в растворителе, упорядоченная структура которого разрушилась при нагревании. Установлено, что перестройка структуры раствора происходит в узком диапазоне температур ~ 10 К.

Основные выводы

Впервые прямым методом измерены времена спин-решеточной релаксации ионов Gd^{3+} в водных и водно-глицериновых растворах.

Установлено, что в разбавленных по гадолинию растворах линии ЭПР уширены неоднородно.

Выявлено, что механизм релаксации обязан модуляции компонент тензора тонкого расщепления, имеющего статическую природу, вращательным движением комплексов.

Определены точные значения эффективных в релаксации параметров тонкой структуры, величины которых свидетельствуют о преимущественном содержании в жидких растворах аквакомплексов с координационным числом 8 в ближайшем окружении ионов Gd^{3+} .

Определены времена корреляции, энергии активации и параметры микровязкости, характеризующие вращательную подвижность комплексов в широком диапазоне температур и вязкостей.

Установлена связь релаксационных параметров со структурой растворов и ее перестройками.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 00-03-32915а и ее полный вариант будет опубликован в журнале Физической химии, т. 76, № 5 (2002).

Литература

1. Reuben J.J.: Electron spin relaxation in aqueous solutions of gadolinium (III). Aqua, cacodilate, and bovine serum albumin complexes. *Phys. Chem.* **75**, 3164 (1971)
2. Southwood-Jones R.V., Earl W.L., Newman K.E., Merbach A.E.: Oxygen-17 NMR and EPR studies of water exchange from the first coordination sphere of gadolinium (III) aquoion and gadolinium (III) propylenediaminediaminetetraacetate. *J. Chem. Phys.* **73**, 5909 (1980)
3. Powell D.H., Merbach A.E., Gonzales G. et al.: Magnetic-field-dependent electronic relaxation of Gd^{3+} in aqueous solutions of the complexes $[Gd(H_2O)_8]^{3+}$, $[Gd(propene-1,3-diamine-N,N,N',N'-tetraacetate)(H_2O)_2]$, and $[Gd(N,N'-bis[(N-methylcarbamoyl)methyl]-3-azapentane-1,5-diamine-3,N,N'-triacetate)(H_2O)]$ of interest of magnetic-resonance imaging. *Helvetica Chimica Acta* **76**, 2129 (1993)
4. Sandip K., Sur S.K., Bryant R.G.: Ionic association and electron spin relaxation rates in aquo gadolinium (III) complexes. *J. Magn. Reson. B* **111**, 105 (1996)
5. Kanno H., Hiraishi J.: Raman study of aqueous rare-earth nitrate solutions in liquid and glassy states. *J. Phys. Chem.* **88**, 2787 (1984)
6. Kanno H., Akamo Y.: A glass formation study of aqueous rare-earth electrolyte solutions. *J. Phys. Chem.* **91**, 1263 (1987)
7. Yamaguchi T., Nomura M., Wakita H., Ohtaki H.: An extended X-ray absorption fine structure study of aqueous rare-earth perchlorate solutions in liquid and glassy states. *J. Chem. Phys.* **89**, 5153 (1988)
8. Вишневская Г.П.: Электронная релаксация и резонанс парамагнитных ионов в растворах. Радиоспектроскопия конденсированных сред (Зарипов М.М., ред.), стр. 13–45. Москва: Наука 1990.
9. Волков Б.А., Вишневская Г.П., Горожанин В.А., Рамазанов Р.Т.: Интегрирующий релаксометр для измерения времен электронной парамагнитной релаксации. *ПТЭ* **4**, 167 (1973)
10. McGarvey B.R.: Line widths in the paramagnetic resonance of transition ions in solution. *J. Chem. Phys.* **61**, 1232 (1957)
11. McLachlan A.D.: Line widths of electron resonance spectra in solutions. *Proc. Roy. Soc. London A.* **280**, 271 (1964)
12. Bloembergen N., Morgan L.O.: Proton relaxation times in paramagnetic solutions. Effect of electron spin relaxation. *J. Chem. Phys.* **34**, 842 (1961)

Проявление жидкостных и твердотельных свойств растворов по данным электронной релаксации парамагнитных ионов. Немарковские процессы

Г. П. Вишневская, Е. Н. Фролова

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Измерены ширины линий ЭПР и времена спин-спиновой релаксации T_2 (метод нерезонансного поглощения в параллельных полях) ионов Gd^{3+} , Mn^{2+} и Cr^{3+} в водных и водно-органических растворах при концентрациях парамагнитных ионов, обеспечивающих диполь-дипольный механизм релаксации. Экспериментальные данные выявили плавный переход от чисто жидкостного (диффузионного) к квазитвердотельному (режим жесткой решетки) проявлению спиновой релаксации. Для полного теоретического описания экспериментальных зависимостей, в том числе и плавного перехода, использована развитая Р. М. Юльметьевым (КГПУ) немарковская теория спиновой релаксации в неупорядоченных средах. Определены времена корреляции и выявлены случаи, когда твердотельному переходу в спиновой релаксации способствуют структурные преобразования в растворах.

Настоящая работа выполнена согласно плану научных исследований лаборатории молекулярной радиоспектроскопии: исследование растворов парамагнетиков радиоспектроскопическими методами, и включает в себя результаты, часть которых получена в 2001 г. (результаты по Gd^{3+} и определению времен корреляции).

В представляемой работе проведены исследования электронной спиновой релаксации, обусловленные диполь-дипольными взаимодействиями. Основное внимание уделено ситуации, при которой происходит изменение масштабов времен спин-спиновой релаксации T_2 и времен корреляции трансляционного броуновского движения τ_c : $T_2 \gg \tau_c$, $T_2 \sim \tau_c$, $T_2 \ll \tau_c$.

Исследования проведены в водных, водно-глицериновых и водно-полиэтиленгликолевых растворах $Gd(NO_3)_3$, $Cr(NO_3)_3$ и $Mn(NO_3)_2$. Использовались концентрации парамагнитных ионов, при которых основной вклад в релаксацию дают диполь-дипольные взаимодействия. Времена спин-спиновой релаксации T_2 оценивались из ширины линий ЭПР или измерялись прямым методом нерезонансного поглощения в параллельных полях (НПП) [1, 2].

Экспериментальные данные позволили выявить плавный переход от чисто жидкостного (диффузионного) к квазитвердотельному (режим жесткой решетки) проявлению спиновой релаксации (см. для примера рис. 1). Наблюдаемые экспериментальные зависимости, за исключением области плавного перехода, описываются известными и хорошо апробированными формулами [3–5]:

$$\frac{1}{T_2} = 1.78 \cdot 10^{23} \frac{g^4 \beta^4}{h^2 k} \frac{\eta}{T} C S(S+1) \quad (1)$$

в жидкостном приближении ($\tau_c < T_2$) и

$$\frac{1}{T_2} = 26.29 \cdot 10^{20} \frac{g^2 \beta^2}{h} C \sqrt{S(S+1)} \quad (2)$$

в твердотельном приближении ($\tau_c > T_2$). Здесь η – макроскопическая вязкость раствора; C – концентрация парамагнитных ионов в М. При высоких концентрациях парамагнитных ионов для гауссовой формы линии скорость релаксации в твердотельном приближении может быть выражена через второй момент:

$$\frac{1}{T_2} = 2 \left[\frac{3}{5} \frac{g^4 \beta^4}{h^2} S(S+1) \sum_k r_{jk}^{-6} \right]^{1/2} \quad (3)$$

где r_{jk} – расстояние между парамагнитными центрами j и k .

$$\tau_c = \frac{2\pi a^3 \eta}{kT}, \quad (4)$$

где a – радиус комплекса.

Значения времен корреляции, рассчитанные по формуле (4), и экспериментальные значения времен релаксации для исследованных систем приведены в таблице 1.

Для полного теоретического описания экспериментальных зависимостей, в том числе и наблюдаемого плавного перехода, использована развитая Р. М. Юльметьевым (кафедра теоретической физики КГПУ) немарковская теория спиновой релаксации в неупорядоченных средах. Опираясь на результаты работ [6, 7], были получены формулы для вычисления скорости релаксации:

$$\frac{1}{T_2} = \sum \sigma_{1\beta}^2 \tau_c^* \quad (5)$$

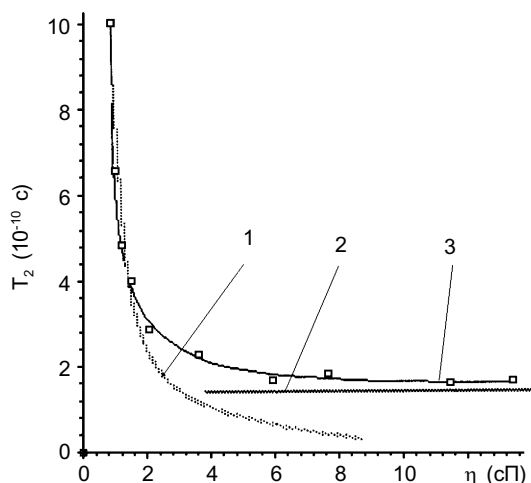


Рис. 1. Зависимость времени спин-спиновой релаксации от вязкости при 298 К в водных растворах $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$; значения вязкости соответствуют различным концентрациям $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$; $\square$ экспериментальные данные; кривая 1 – теоретические результаты в жидком приближении; кривая 2 – теоретические результаты в твердом приближении; кривая 3 – результаты немарковской теории спиновой релаксации.

Здесь $\sigma_{\alpha\beta}^*$ – компоненты второго момента в магнитном резонансе, τ_c^* представляет эффективное время корреляции, описывающее совместное существование двух каналов спиновой памяти, связанных с молекулярным диффузионным движением и спин-спиновыми взаимодействиями в квазитвердой решетке:

$$\tau_c^* = \frac{\sqrt{1 + 4\gamma_\beta^2 \tau_c^2} - 1}{2\gamma_\beta^2 \tau_c}. \quad (6)$$

В двух предельных случаях

$$\tau_c^* = \begin{cases} \tau_c, & \text{при } \tau_c \rightarrow 0 \text{ или } \tau_c \gamma_\beta \rightarrow 0, \\ \tau_\gamma = \gamma_\beta^{-1}, & \text{при } \tau_c \rightarrow \infty \text{ или } \tau_c \gamma_\beta \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (7)$$

$\gamma_\beta^2 = M_4/M_2$ – отношение компонент четвертого момента к компонентам второго момента линий ЭПР в квазитвердой решетке.

Теоретические расчеты выполнены по формулам (5)–(7) с использованием значений $\tau_\gamma = 4.54 \cdot 10^{-10}$ с для растворов Gd^{3+} , $\tau_\gamma = 2.2 \cdot 10^{-10}$ с для растворов Mn^{2+} , $\tau_\gamma = 17.8 \cdot 10^{-10}$ с для растворов Cr^{3+} и значений τ_c , рассчитанных по формуле (4). Результаты расчета для растворов Gd^{3+} представлены на рис. 1.

Показано, что в ряде случаев твердотельный переход может вызываться различными структурными преобразованиями в растворах. Например, в водных растворах $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ вокруг ионов хрома образуются стабильные многослойные гидратные оболочки [2, 8]. Поэтому в водных растворах $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ граница полной гидратации достигается уже при концентрации ~ 2.2 – 2.3 М и значениях вязкости $\eta = 10$ – 12 сП. Струк-

Таблица 1. Значения времен корреляции τ_c , вычисленные по формуле (4), в сравнении с экспериментальными значениями T_2 для аквакомплексов Cr^{3+} (T_2 определены из ширин линий ЭПР), Mn^{2+} , Gd^{3+} (T_2 измерены методом НПП) (в 10^{-10} с).

η (сП)	Cr^{3+}		Mn^{2+}		Gd^{3+}	
	τ_c	T_2	τ_c	T_2	τ_c	T_2
1.2	1.38		0.50	18.0	1.00	10.00
1.5	1.63		0.62	13.5	1.26	4.75
2.2	2.40	26.0	0.90	9.5	1.84	3.60
2.5	2.72	20.8	1.03	8.3	2.09	3.30
3.5	3.81	14.0	1.44	6.4	2.93	2.40
4.0	4.36	11.5	1.65	6.0	3.35	2.10
6.0	6.54	5.0	2.47	5.0	5.03	1.80
8.8	9.60	3.8	3.62	4.5	7.90	1.70
10.0	10.90	3.5	4.12	4.2	8.38	1.60
12.0	13.10	3.0	4.94	4.0	10.80	1.60
15.0	16.35	2.9	6.18	3.9	12.55	1.60
20.0			8.24	3.9	16.76	1.64
30.0			12.36	3.6		
40.0			16.50	4.0		
60.0			24.70	4.0		

туру растворов, начиная с границы полной гидратации и выше, следует полагать подобной размытой псевдокристаллической структуре. Диполь-дипольные взаимодействия в таких растворах соответствуют твердотельному приближению.

В области промежуточных концентраций для многих водных растворов солей характерно микрорасслаивание растворов на микрообласти со структурой свободного растворителя и со структурой, близкой к кристаллогидрату [9, 10]. Внутри кристаллогидратоподобных областей ионы находятся на близких расстояниях, и их поступательное движение заторможено. Именно такая модель может быть использована для описания особенностей проявления диполь-дипольных взаимодействий в водных растворах различных концентраций солей Mn^{2+} и Gd^{3+} .

Таким образом, предложенная Р. М. Юльметьевым теория дает наиболее полное описание экспериментальных результатов для всех исследованных ионов, включая и область плавного перехода от марковского режима к квазимарковскому и немарковскому. Именно в этой области наблюдается совместное проявление жидкостных и твердотельных свойств в спин-спиновой релаксации парамагнитных ионов в изученных растворах. Рассмотрены случаи, когда различные структурные преобразования в растворах способствуют указанному переходу.

Литература

1. Волков Б.А., Вишневская Г.П., Горожанин В.А., Рамазанов Р.Т.: Интегрирующий релаксометр для измерения времен электронной парамагнитной релаксации. ПТЭ 4, 167 (1973)

2. Вишневская Г.П.: Электронная релаксация и резонанс парамагнитных ионов в растворах. Радиоспектроскопия конденсированных сред (Зарипов М.М., ред.), стр. 13–45. Москва: Наука 1990.
3. Абрагам А.: Ядерный магнетизм. Москва: ИЛ 1963.
4. Альтшулер С.А., Козырев Б.М.: Электронный парамагнитный резонанс, 2-е изд. Москва: Наука 1972.
5. Замираев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М.: Спиновый обмен. Новосибирск: Наука 1977.
6. Юльметьев Р.М.: Описание спиновой релаксации в жидкостях на основе идеи Боголюбова об иерархии времен релаксации. Теор. и мат. физика **30**, 264 (1977)
7. Shurygin V.Yu., Yulmetyev R.M.: Physical criterion of the degree of non-Markovity of relaxation processes in liquids. Phys. Lett. A **148**, 199 (1990)
8. Caminiti R., Licheri G., Piccaluga G., Pinna G.: Hydration water – external water interactions around Cr^{3+} ions. J. Chem. Phys. **69**, 1 (1978)
9. Самойлов О.Я.: Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. Москва: Издательство АН СССР 1957.
10. Эрдени-Груз Т.: Явления переноса в водных растворах. Москва: Мир 1976.

Динамическое фазовое расслоение в сверхпроводящих купратах лантана

Г. Б. Тейтельбаум

Лаборатория физики перспективных материалов

С помощью комплексного ЭПР и ЯМР анализа исследованы особенности динамического фазового расслоения лантан-стронциевых металлоксидов. Установлено, что во всей области фазовой диаграммы, соответствующей сверхпроводимости, последняя сосуществует с волной спиновой плотности. В области слабого допирования доминирует почти магнитное состояние, а при сильном допировании – стандартное металлическое. Исследованы квазистатические и динамические свойства страйп-фазы, возникающей при концентрации носителей вблизи $1/8$. Показано, что в магнитном поле расслоение подстраивается к образующейся решетке вихрей, нормальные коры которых служат центрами антиферромагнитно скоррелированных квазистатических областей. Их размеры при слабом допировании сравнимы с расстоянием между вихрями, а при сильном – уменьшаются до длины когерентности. Полученные данные могут рассматриваться как подтверждение гипотезы о том, что высокотемпературная сверхпроводимость в металлоксидах возникает в результате микроскопического расслоения фаз.

Введение

Уже на самом первом этапе исследований высокотемпературной сверхпроводимости появились серьезные аргументы в пользу того, что она возникает в системах, испытывающих микроскопическое фазовое расслоение. Более того, были высказаны предположения [1] о том, именно это, имеющее динамический характер, расслоение служит необходимой деталью механизма высокотемпературной сверхпроводимости. Экспериментальные данные, накопленные к настоящему времени, укрепили эту точку зрения. Однако для построения полной физической картины не хватает как информации о локальных свойствах сосуществующих фаз (распределения спиновой и зарядовой плотности), так и знания всех деталей соответствующей фазовой диаграммы.

Именно это обстоятельство определило основную цель представленных здесь исследований: проанализировать особенности динамического фазового расслоения и, в частности, необычную (полосовую) корреляцию зарядов и спинов и ее связь со структурой металлоксидов, их сверхпроводящими и магнитными свойствами.

Для достижения поставленной цели мы использовали радиоспектроскопические методы, обладающие уникальными возможностями получения информации на локальном уровне. Прежде всего здесь следует назвать ЯКР, который не требует внешнего поля, фиксирующего выделенное направление, и для которого разница между поликристаллическими и монокристаллическими образцами не играет роли. В силу того, что частота ЯКР определяется градиентом внутрикристаллического электрического поля, этот метод позволяет непосредственно фиксировать неоднородности распределения заряда в задачах об электронном фазовом расслоении. В случае, когда имеется

локальный магнитный порядок, внутреннее магнитное поле может быть измерено с помощью ЯМР в нулевом внешнем поле. Отметим также, что измерения температурной зависимости относительной амплитуды сигнала ЯКР и ядерной спиновой релаксации, определяемых флуктуациями намагниченности, позволяют проследить за поведением последних в диапазоне частот от 10^5 до 10^{14} с⁻¹.

Интересные возможности предоставляет также метод ЭПР на спиновых метках Gd, внедряемых в исследуемое соединение, позволяющий провести исследования спиновой динамики в медь-кислородных плоскостях $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ в широкой области изменения концентрации носителей тока. Дело в том, что между ионами Gd и спинами меди в CuO_2 плоскостях существует небольшая обменная связь, и спиновая релаксация ионов Gd определяется магнитными возбуждениями в медь-кислородных плоскостях.

Локальная структура и пиннинг страйп-фазы

К моменту начала работы было известно, что корреляция между спинами и зарядами наиболее ярко проявляется в НТТ (низкотемпературной тетрагональной) фазе металлоксидов лантана, где характерные неоднородности CuO_2 плоскостей, связанные с разворотами CuO_6 октаэдров, способны пинниговать полосовые (страйп) флуктуации [2]. Поэтому на первом этапе наши усилия были сфокусированы на исследовании металлоксидов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, допированных европием или неодимом (роль Eu или Nd состоит в стабилизации НТТ фазы при температурах $T_{\text{НТТ}} \sim 140$ и 70 К соответственно). В результате проведенных исследований удалось показать, что корреляция между зарядами и спинами существенно зависит от уровня допирования металлоксидов носителями тока:

А. При средних уровнях дырочного допирования ($0.08 < x < 0.18$) в НТТ фазе обнаружена структура спектров ЯКР меди, соответствующая наличию неэквивалентных узлов меди в CuO_2 плоскости, причем некоторые имеют ненулевой магнитный момент. Это свидетельствует о сочетании неоднородного распределения зарядовой плотности с локальным антиферромагнитным порядком – страйп-фазе (аналогичные выводы следуют из особенностей спектров ЯКР на ядрах лантана, наблюдаемых нами в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, допированных европием или неодимом). Статический характер подобной структуры обусловлен ее пиннингом на характерных для НТТ фазы неоднородностях CuO_2 плоскостей. Объем запиннированной страйп-фазы весьма чувствителен к уровню дырочного допирования и в окрестности $x = 1/8$ возрастает больше, чем на порядок. Это демонстрирует важность эффектов соразмерности при пиннинге и указывает на плоский характер распределения магнитной и зарядовой плотности [3].

Плоские структуры, образующиеся в статическом пределе, соответствуют заряженным доменным границам конечной толщины и антиферромагнитным моментам с величиной порядка $0.25\text{--}0.30 \mu_B$ (магнетонов Бора). Наши данные [3, 4] позволяют говорить о нескольких типах возможных структур: i) центрированные на узлах заряженные границы, разделенные параллельными им тремя антиферромагнитными спиновыми цепочками (трехногими спиновыми лестницами, рис. 1а); ii) заряженные границы, центрированные на Cu-Cu связях и представляющие собой сдвоенные цепочки CuO , разделенные между собой лишь двумя антиферромагнитными цепочками (двухногими спиновыми лестницами, рис. 1б) и другие.

Б. Обнаружено, что с ростом допирования (при $x > 0.18$), когда искажения CuO_2 плоскости (развороты CuO_6 октаэдров) становятся меньше определенного критического значения, происходит депин-

нинг страйп-фазы и соединение переходит в состояние с обычной объемной сверхпроводимостью.

Кинетика флуктуаций в страйп-фазе

Исследована кинетика зарядового и спинового упорядочения в страйп-фазу соединений НТТ симметрии. Продемонстрировано, что стабилизация зарядовых и спиновых возбуждений происходит поэтапно. Для анализа зарядовых и спиновых флуктуаций использована высокая чувствительность сигнала ядерного спинового эхо к скорости магнитных флуктуаций. При каждой конкретной температуре можно выделить зоны быстрых и медленных флуктуаций и разделяющую их щель, соответствующую настолько быстрому спаду сигнала ядерного спинового эхо, что регистрация импульсного ЯМР становится невозможной. В условиях, когда зависящее от температуры распределение частот магнитных флуктуаций попадает в эту щель, происходит подавление наблюдаемого сигнала ЯМР. Поэтому поведение относительной амплитуды сигнала ЯМР (пропорциональной числу ядер, участвующих в наблюдаемом резонансе) способно дать ценную информацию о распределении флуктуационных частот [5]. Измерения показали, что при понижении температуры в диапазоне от 70 до 40 К происходит полное подавление резонанса на ядрах меди. В диапазоне от 35 до 10 К имеет место впервые наблюдаемое нами подавление ЯМР на ядрах лантана для всех трех наблюдаемых переходов. При дальнейшем понижении температуры происходит восстановление амплитуды наблюдаемого сигнала, которое связано с выходом замедляющихся магнитных флуктуаций из диапазона частот, соответствующих подавлению ЯМР. Эти особенности позволяют оценить ширину распределения флуктуационных частот.

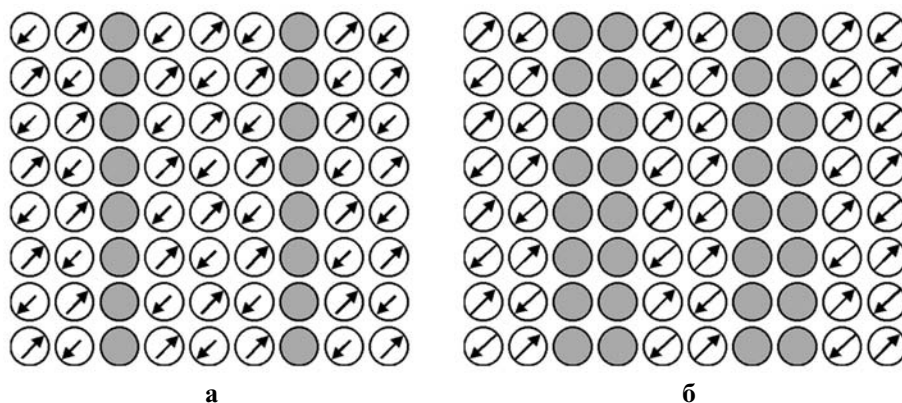


Рис. 1. Возможные типы плоских страйп-структур – центрированные на узлах заряженные границы, разделенные трехногими антиферромагнитными спиновыми лестницами (а); заряженные границы, центрированные на Cu-Cu связях и разделенные между собой двухногими спиновыми лестницами (б). Кружки соответствуют ионам меди, стрелки указывают ориентацию их магнитных моментов. Заштрихованные кружки изображают немагнитные узлы, по которым распределена дырочная плотность. В первом случае средняя дырочная плотность равна 0.5, во втором – 0.25.

Анализ ядерной спиновой релаксации в соединениях со страйп-структурой показал, что в широком температурном диапазоне время жизни флуктуаций намагниченности подчиняется термоактивационному закону, причем величина спиновой жесткости, определяющей энергию активации ($\sim 150\text{--}200$ К), на порядок меньше, чем в недопированном магнетике La_2CuO_4 . Это связано с ослаблением спинового обмена в CuO_2 плоскости в направлении, перпендикулярном к заряженным доменным границам, и свидетельствует о том, что страйп-соединения гораздо ближе к квантовой критической точке.

Установлено, что переход в страйп-фазу имеет спин-стекольный характер, связанный с пространственно неоднородным распределением частоты флуктуаций по образцу. По температурной зависимости амплитуды ЯМР и времен ядерной спиновой релаксации определена соответствующая величина разброса энергий активации ($\sim 15\%$). Заметим, что характерные времена жизни магнитных флуктуаций в соединениях, где НТТ фаза индуцирована допированием Nd, почти на порядок длиннее, чем в соединениях, допированных Eu. Это обуславливает различную степень пиннинга страйп-структуры и приводит к разнице в скоростях ядерной спиновой релаксации. Особенности страйп-фазы в лантан-бариевых соединениях и в металлооксидах с электронным типом проводимости обсуждены соответственно в публикациях [6, 7].

Особенности фазового расслоения в сверхпроводящем состоянии

На втором этапе исследований основные усилия были направлены на исследование неоднородных зарядовых и спиновых структур в металлооксидах, не содержащих специальных допантов, подавляющих сверхпроводимость и способных стабилизировать известную [2] страйп-структуру. В этом случае все характерные флуктуации отвечают диапазону более высоких частот. Интерес к этой проблеме был стимулирован публикациями [8, 9], в которых сообщалось о наблюдении с помощью нейтронного рассеяния антиферромагнитных корреляций в лантан-стронциевых металлооксидах сверхпроводящего состава. Ключевым моментом наших исследований являлось построение фазовой диаграммы [10] магнитных флуктуаций сверхпроводящей системы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ в частотном диапазоне ЭПР и высокополевого ЯМР. С этой целью была изучена серия порошков $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ с содержанием стронция, соответствующим различным точкам области сверхпроводимости, которые были допированы 1 ат.% Gd, служившим в качестве ЭПР пробы.

Была проанализирована температурная и концентрационная зависимость ширины линии наиболее интенсивной компоненты спектра ЭПР Gd^{3+} , соответ-

ствующего тонкой структуре иона с $S = 7/2$ в электрическом кристаллическом поле.

Обнаружено, что в дополнение к температурно независимому неоднородному уширению ширина линии содержит различные вклады, связанные с магнитными свойствами CuO_2 плоскостей:

а) линейный по температуре корринговский вклад, обусловленный взаимодействием Gd^{3+} с носителями тока;

б) критический вклад за счет взаимодействия спинов Gd с медными спинами, имеющий максимум при понижении температуры до температуры замерзания T_m , когда частота магнитных флуктуаций снижается до резонансной частоты (поведение Бломбергена-Парсела-Паунда).

Наш анализ показал, что в зависимости от содержания Sr температурная зависимость ширины линии трансформируется от поведения Бломбергена-Парсела-Паунда (с максимумом) к чисто корринговскому (линейному) поведению. Это означает, что при малых x спин Gd чувствует почти магнитное состояние, а при больших x – почти немагнитный металл. При этом важно, что зависимость температуры магнитного перехода $T_m(x)$ почти совпадает с аналогичной зависимостью температуры сверхпроводящего перехода $T_c(x)$ при всех x , соответствующих сверхпроводящему состоянию (см. рис. 2). Это указывает на тесную связь сверхпроводящих и магнитных свойств.

В связи с тем, что измерения проводятся в ненулевом магнитном поле, были исследованы эффекты, связанные с наличием вихревой решетки. В характерных для ЭПР полях (~ 0.3 Тл), ориентированных перпендикулярно CuO_2 слоям, ее период составляет 860 Å, а размер коры вихрей для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ – 20 Å. Так как верхнее критическое поле составляет 62 Тл, то ясно, что в условиях ЭПР сердцевина вихрей занима-

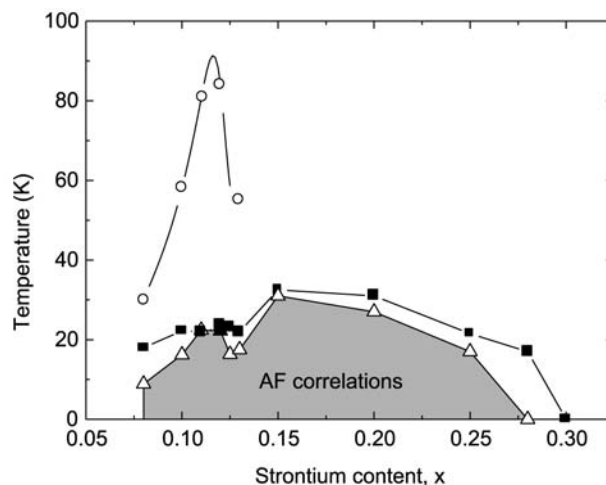


Рис. 2. Фазовая диаграмма магнитных флуктуаций сверхпроводящей системы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. ▲ Температуры магнитного перехода $T_m(x)$, ■ температуры сверхпроводящего перехода $T_c(x)$, ○ энергии активации магнитных флуктуаций $E_a(x)$.

ют около 0.5% площади CuO_2 плоскостей. Поэтому построенная нами фазовая диаграмма указывает, что в отличие от гипотезы [11] о том, что только нормальная сердцевина вихря находится в антиферромагнитном состоянии, в реальности низкочастотные АФ корреляции простираются на расстояния порядка магнитного корреляционного радиуса, который при малом допировании превышает 600–700 Å [12]. Из нашей фазовой диаграммы следует также, что с увеличением допирования стронцием магнитный корреляционный радиус уменьшается до размеров порядка длины когерентности (сердцевины вихря).

Численная обработка температурных зависимостей спектров ЭПР для соединений с различным содержанием Sr позволила определить эффективное поле в редкоземельных позициях, характерные частоты магнитных флуктуаций и соответствующие энергии активации (спиновую жесткость, рис. 2).

Для оценки величины упорядоченных магнитных моментов при ориентации магнитного поля параллельно CuO_2 слоям были проведены измерения Cu и La ЯМР в полях 20–25 Тл с использованием резистивного магнита высокой однородности в Национальной лаборатории сильных магнитных полей (Таллахасси, США). Были исследованы температурные и концентрационные зависимости ЯМР спектров $^{63,65}\text{Cu}$ и ^{139}La для ориентированных порошков $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Измерения в магнитном поле перпендикулярном оси c показали, что для значений x вблизи 1/8 при охлаждении до температур ниже 40–50 К происходит уширение центральных пиков как для ядер Cu, так и для La. Наблюдаемое уширение связано с замедлением магнитных флуктуаций упорядочивающихся спинов меди. Оно позволяет оценить эффективный момент на меди как $\sim 0.09 \mu_B$, что почти в два раза меньше значений, полученных из данных ЭПР для нормальной ориентации поля. Это обстоятельство подчеркивает существенную роль вихревой решетки в пиннинге магнитных флуктуаций.

Заключение

Таким образом, выполненный анализ показал, что, согласно построенной фазовой диаграмме, специфической сверхпроводящего состояния в купратах является присутствие квазистатических антиферромагнитных корреляций. Это обстоятельство можно рассматривать как указание на то, что сверхпроводимость возникает в результате фазового расслоения на микромасштабах.

При содержании стронция вблизи 1/8 такое сосуществование фаз реализуется в форме динамических страйпов. Соответствующее возрастание спиновой жесткости свидетельствует о плоском характере неоднородных распределений спина и заряда, обуславливающих при наличии сильного пиннинга различ-

ные типы квазистатических антиферромагнитных доменов и заряженных доменных стенок.

Благодарности

В этой статье отражены результаты, полученные совместно с О. де Гронкелем (Институт физики твердого тела Научного центра, Юлих, Германия), О. Бахаревым, Х. Бромом, Абу Шика (Лаборатория Каммерлинг-Оннеса, Лейден, Нидерланды), Я. Зааненом (Институт Лоренца, Лейден, Нидерланды), Ф. Кюнсом, В. Моултоном, А. Рейесом (Национальная лаборатория сильных магнитных полей, Таллахасси, США) и моими коллегами по Казанскому физико-техническому институту Е. Вавиловой, В. Катаевым, Е. Куковицким. Поддержка настоящих исследований частично осуществляется в рамках проекта РФФИ 01-02-17533 и программы NIS/NHMFL.

Литература

- Gorkov L.P., Sokol A.V.: The phase separation of the electron liquid in the novel superconductors. JETP Lett. **46**, 420 (1987)
- Tranquada J.M., Sternlieb B.J., Axe J.D., Nakamura Y., Uchida S.: Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors. Nature **375**, 561 (1995)
- Teitel'baum G.B., Buechner B., Gronckel H.: Cu NQR study of the stripe phase local structure in the lanthanum cuprates. Phys. Rev. Lett. **84**, 2949 (2000)
- Teitel'baum G.B., Buechner B., Gronckel H.: The direct Cu NQR study of the stripe phase in the lanthanum cuprates. Physica C **341-348**, 1755 (2000)
- Teitel'baum G.B., Abu-Schiekah I.M., Bakharev O., Brom H.B., Zaanen J.: Spin dynamics and ordering of a cuprate stripe-antiferromagnet. Phys. Rev. B **63**, 020507 (R) (2001)
- Vavilova E., Kukovitskij E., Teitel'baum G.: Spin dynamics and ordering of a cuprate stripe-antiferromagnet. Physica B **280**, 205 (2000)
- Brom H., Abu-Schiekah I.M., Bakharev O., Bernal O., Kes P., Ming-Li, Nikolaev E., Teitel'baum G.B., Nugroho A., Menovsky A., Zaanen J.: Stripe and spin dynamics in hole doped nickelates and cuprates and electron doped cuprates seen by nuclear resonance. Int. J. Mod. Phys. B **14**, 3368 (2000)
- Yamada K., Lee C.H., Kurahashi K., Wada J., Wakimoto S., Ueki S., Kimura H., Endoh Y., Hosoya S., Shirane G., Birgeneau R.J., Greven M., Kastner M.A., Kim Y.J.: Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting transition temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Phys. Rev. B **57**, 6165 (1998)
- Suzuki T., Goto T., Chiba K., Shinoda T., Fukase T., Kimura H., Yamada K., Ohashi M., Yamaguchi Y.: Observation of modulated magnetic long-range order in $\text{La}_{1.88}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$. Phys. Rev. B **57**, R3229 (1998)
- Kuhns P., Reyes A., Moulton W., Kukovitskij E., Vavilova E., Teitel'baum G.: The inhomogeneous magnetic fluctuations in the superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Physical Phenomena in High Magnetic Fields – IV Proceedings, Santa Fe, 2001. World Scientific (in print)
- Arovas D.P., Berlinsky A.J., Kallin C., Zhang S.C.: Superconducting vortex with antiferromagnetic core. Phys. Rev. Lett. **79**, 2871 (1997)
- Lake B., Aeppli G., Clausen K.N., McMorro D.F., Lefmann K., Hussey N.E., Mangkorntong N., Nohara M., Takagi H., Mason T.E., Schröder A.: Antiferromagnetic vortex state in a high-temperature superconductor. Science **291**, 832 (2001)

Эффект близости в тонкопленочных слоистых гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик

И. А. Гарифуллин

Лаборатория физики перспективных материалов

Исследован эффект близости сверхпроводник/ферромагнетик (С/Ф) в тонкопленочных слоистых структурах Pb/Fe и V/Fe. Установлено, что в ферромагнитных слоях мультислоев С/Ф реализуется состояние Ларкина-Овчинникова-Фульде-Феррела и что коэффициент прохождения интерфейса С/Ф куперовскими парами ограничен вследствие обменного расщепления зоны проводимости ферромагнитного слоя и вследствие отсутствия химического сродства металлов, находящихся в контакте. В образцах V/Fe впервые наблюдалось явление “возвратной” сверхпроводимости, когда с увеличением толщины слоя железа сверхпроводимость сначала пропадает, а затем появляется вновь при больших толщинах слоя железа.

Введение

Исследования эффекта близости сверхпроводник/ферромагнетик (С/Ф) в мультислоях С/Ф проводятся в лаборатории физики перспективных материалов уже с 1994 года. В настоящее время в них принимают участие Гарифьянов Н.Н., Хлебников С.Я. и Тихонов Д.А. На ранних стадиях этих исследований в числе исполнителей был Горюнов Ю.В.

Интерес к проблеме сосуществования сверхпроводимости и ферромагнетизма в разбавленных сплавах и интерметаллических соединениях не ослабевает уже в течение последних 30 лет (см., например, обзор [1]). В искусственно созданных гетероструктурах и мультислоях взаимодействие между сверхпроводимостью и магнетизмом (эффект близости С/Ф) ставит новые вопросы и открывает практически неограниченные возможности для исследования любых комбинаций материалов. Несмотря на то, что этот эффект в тонкопленочных системах начал исследоваться еще в 60-х годах (см., например, обзор [2]), а также несмотря на активность в этой области в последние годы, проблема еще далека не только от количественного, но и качественного понимания. Наиболее эффективным результатом, полученным в последние годы при исследовании эффекта близости С/Ф, было наблюдение осцилляций температуры сверхпроводящего перехода T_C как функции толщины слоя ферромагнитного металла d_F [3–5]. Увеличение T_C с увеличением d_F в мультислоях С/Ф противоречит физической интуиции, поскольку естественно ожидать, что сильное обменное поле в Ф-слое должно разрушить сверхпроводимость. Проведенный нами анализ показал, что в большинстве систем, изученных ранее, ответственным за немонокотное поведение T_C является наличие дополнительного слоя на интерфейсе С/Ф, образованного вследствие взаимной диффузии С- и Ф-материалов через их границу раздела (интер-

фейс). Это означает, что непосредственный контакт Ф- и С-слоев отсутствует. Таким образом, при исследовании истинного эффекта близости С/Ф необходимо было найти пары материалов С/Ф, для которых взаимная диффузия была бы минимальной. В результате всестороннего анализа нами были выбраны две системы: Pb/Fe и V/Fe.

Эффект близости С/Ф в системе Pb/Fe

В первую очередь нами были проведены детальные исследования эффекта близости С/Ф в многослойной пленочной системе Pb/Fe на подложках из монокристаллического сапфира Al_2O_3 (1120) [6]. На первом этапе исследовано влияние различных технологических факторов (скорости напыления, температуры подложки) на рост пленок с целью оптимизации режимов их выращивания методом радиочастотного распыления. На образцах, приготовленных в оптимальных условиях, проведены комплексные исследования эффекта близости сверхпроводник/ферромагнетик. Для исследования влияния магнетизма на сверхпроводимость были проведены измерения температуры сверхпроводящего перехода T_C и верхнего критического поля по изменению электросопротивления на постоянном токе и намагниченности на переменном токе. Для исследования магнитного состояния слоев железа проводились измерения намагниченности с помощью СКВИД-магнитометра и ферромагнитного резонанса. Последние позволили показать, что железо остается ферромагнитным вплоть до монослойной толщины, что свидетельствует о наличии прямого контакта Ф- и С-слоев. Эта ситуация очень благоприятна при исследовании эффекта близости С/Ф, поскольку она соответствует рассматриваемым теоретическим моделям. Мы обнаружили (рис. 1) осцилляции в зависимости температуры сверхпроводящего

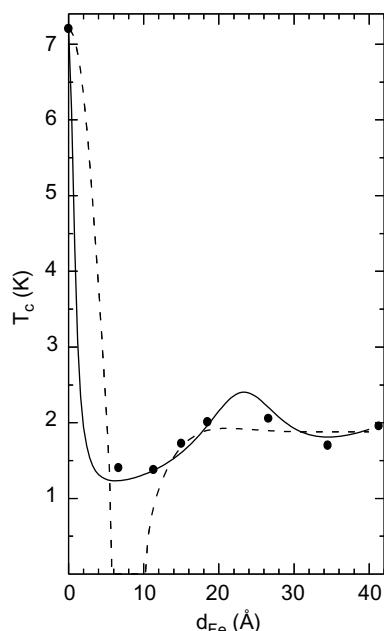


Рис. 1. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода в системе Fe/Pb/Fe при фиксированном значении толщины слоя свинца $d_{Pb} = 730$ Å. Сплошная линия – результат подгонки теории, разработанной в [8], со значениями параметров, приведенными в тексте.

перехода от толщины слоя железа d_{Fe} , которые, по нашему предположению, свидетельствуют о реализации необычной сверхпроводимости с неоднородным параметром порядка в ферромагнитном слое, так называемого состояния Ларкина-Овчинникова-Фулде-Феррела [7]. Мы описали полученные результаты с помощью теории [8]. Показанная на рис. 1 оптимальная подгонка была получена при следующих параметрах теории: длина когерентности в сверхпроводнике $\xi_s = 170$ Å; параметр прозрачности интерфейса $T_m = 0.4$; длина когерентности в ферромагнетике $\xi_l = 7.7$ Å; длина свободного пробега электронов проводимости в ферромагнетике $l_m = 15$ Å; отношение $N_m v_{Fm} / N_s v_{Fs} = 1.3$, где N_m и N_s – плотности состояний электронов на уровне Ферми, а v_{Fm} и v_{Fs} – фермиевские скорости электронов в Ф- и С-слоях соответственно. Наиболее интересным результатом, полученным при сравнении этой теории с экспериментом, является установление факта сильно ограниченного коэффициента прозрачности интерфейса Pb/Fe для куперовских пар. Квантовомеханический коэффициент прохождения интерфейса куперовскими парами $T = T_m / (1 + T_m)$ оказался равным 0.3. Мы полагаем, что основной физической причиной ограничения прозрачности интерфейса Pb/Fe является обменное расщепление зоны проводимости ферромагнетика. Электроны отражаются интерфейсом вследствие несовпадения фермиевских моментов электронов проводимости сверхпроводящего и ферромагнитного слоев на интерфейсе. Очевидно, что фермиевские моменты двух элект-

ронов с противоположными спинами, образующих куперовскую пару, никогда не совпадут одновременно с фермиевскими моментами электронов обменно расщепленной зоны проводимости ферромагнетика. Кроме того, в системе Pb/Fe вследствие отсутствия химического сродства и, как следствие, отсутствия гибридизации зон проводимости этих двух металлов, на интерфейсе возникает потенциальный барьер, отражающий электроны проводимости. Высота этого барьера должна быть выше для контакта Pb и Fe, которые нерастворимы друг в друге даже в жидкой фазе, чем для контакта V и Fe, которые образуют твердые растворы при любой концентрации компонентов.

“Возвратная” сверхпроводимость в системе V/Fe

В дальнейшем мы провели исследования эффекта близости С/Ф в системе V/Fe [9]. Исследованные нами образцы готовились методом радиочастотного распыления на подложки из монокристаллического сапфира Al_2O_3 (1120). Серии 1 и 2 готовились при температуре подложек, равной 300°C, а серии 3 и 4 – при 260°C. Было найдено, что оптимальная скорость испарения для железа составляет 0.3 Å/сек, а для ванадия – 0.5 Å/сек. При этих скоростях достигались оптимальные структурные свойства слоев. Для того, чтобы тщательно изучить зависимость T_c от толщины d_{Fe} (или d_V) нами готовились серии из 10 или 16 трехслойных пленок Fe/V/Fe с различными значениями d_{Fe} (d_V) при постоянном значении d_V (d_{Fe}) в одном акте напыления. При напылении слоя V в сериях образцов с $d_V = \text{const}$ держатель подложек 4 раза поворачивался на 90° для того, чтобы исключить разброс значений d_V в пределах серии. На заключительной стадии образцы покрывались защитным слоем окиси алюминия толщиной порядка 50 Å.

Измерения малоуглового рентгеновского рассеяния дали величину шероховатости интерфейса порядка 10 Å для серий 1 и 2 и 6 Å для серий 3 и 4. Измерения электросопротивления R проводились четырехконтактным методом на постоянном токе. Величина $RRR = R_{300K} / R_{4.2K}$ для исследованных нами образцов менялась между 4 и 5. Полученное значение RRR позволяет оценить длину свободного пробега электронов проводимости $l = 50$ Å и соответствующую сверхпроводящую длину когерентности порядка 75 Å. Это значение длины когерентности использовалось при подгонке теории к экспериментальным результатам по зависимостям T_c от толщины С- и Ф-слоев.

Зависимость намагниченности образцов в магнитном поле 3 кЭ от толщины слоев железа явно указывает на то, что магнитный момент насыщения слоев железа совпадает с его значением для массивных образцов Fe и что железо в исследованных образцах остается магнитным вплоть до монокристаллического уровня так же, как и в образцах Pb/Fe.

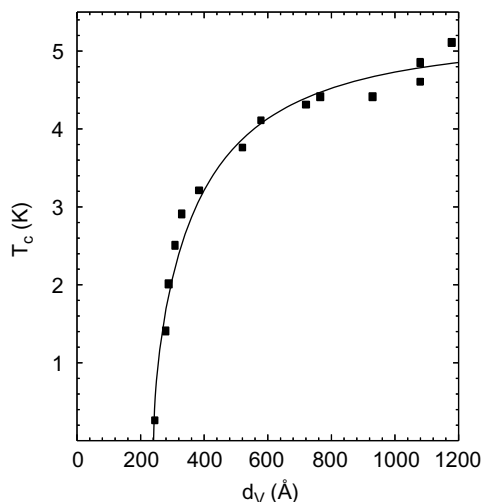


Рис. 2. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от толщины слоя ванадия при фиксированном значении толщины слоя железа $d_{\text{Fe}} = 50$ Å для трехслойных пленок Fe/V/Fe (■). Сплошная линия – теоретическая кривая, вычисленная по теории [8], со значениями параметров $N_m v_{\text{Fm}}/N_s v_{\text{Fs}} = 0.27$, $\xi_0 = 440$ Å, $\xi_s = 75$ Å, $T_m = 1.6$.

Нами были исследованы два типа зависимостей T_C , а именно, зависимость $T_C(d_V)$ для трехслойных образцов Fe/V/Fe с фиксированной толщиной слоя железа $d_{\text{Fe}} = 50$ Å (рис. 2) и $T_C(d_{\text{Fe}})$ для четырех серий образцов с фиксированными значениями толщин слоя

V d_V . Форма зависимости $T_C(d_V)$ очень простая: с уменьшением d_V T_C медленно уменьшается при больших d_V , а затем с приближением к критической толщине порядка 240 Å наблюдается все более и более резкое уменьшение.

Наиболее интересный результат был получен при исследовании зависимости $T_C(d_{\text{Fe}})$ для образцов с фиксированными d_V (рис. 3 и 4). Для образцов серий 1 и 2 (рис. 3) при малых толщинах слоев железа T_C резко уменьшается с увеличением d_{Fe} до 5 Å. Затем при $d_{\text{Fe}} = 9$ Å наблюдается минимум в T_C . Глубина этого минимума растет с уменьшением d_V . Образцы из серий 3 и 4 с приблизительно теми же толщинами демонстрируют несколько иное поведение T_C (рис. 4). С увеличением d_{Fe} до 7 Å сверхпроводимость исчезает, затем при $d_{\text{Fe}} = 12$ Å она появляется вновь; T_C увеличивается и насыщается. Предполагая, что ниже 0.3 К сверхпроводимость в образце с $d_{\text{Fe}} = 7$ Å не появляется (а эта температура является предельно низкой для использованного нами в этой работе криогенного оборудования), мы можем классифицировать наблюдаемое поведение $T_C(d_{\text{Fe}})$ на рис. 4 как “возвратное”. Подгонка теории, развитой в работе [8], к экспериментальным зависимостям $T_C(d_V)$ и $T_C(d_{\text{Fe}})$ показана на рис. 2–4. При этом были использованы подгоночные параметры, указанные в подписи к рис. 2. Единственным параметром, который отличался при подгонке теории к экспериментальным данным, приведенным

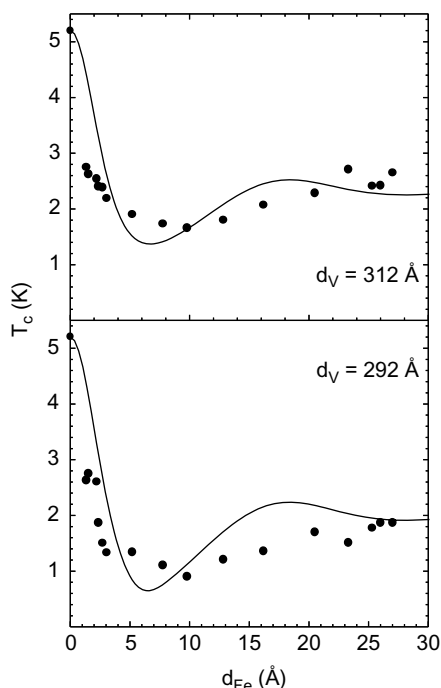


Рис. 3. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от толщины слоя железа при двух фиксированных значениях толщины слоя ванадия для трехслойных пленок Fe/V/Fe серий 1 и 2. Сплошная линия – теоретическая кривая, вычисленная по теории [8], со значениями параметров, приведенными в подписи к рис. 2, и $l_m/\xi_1 = 1.0$.

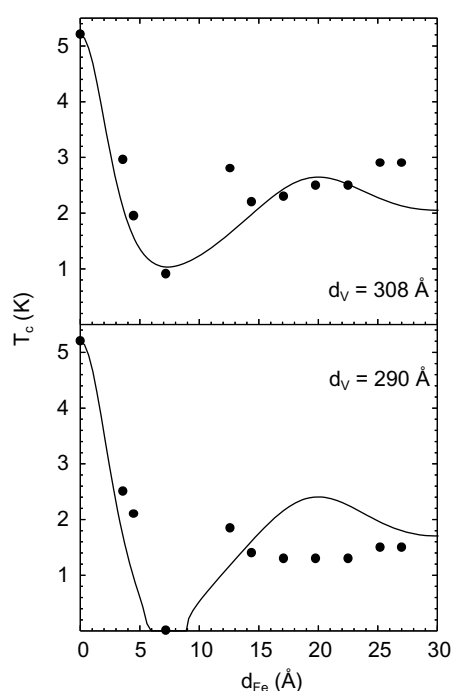


Рис. 4. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от толщины слоя железа при двух фиксированных значениях толщины слоя ванадия для трехслойных пленок Fe/V/Fe серий 3 и 4. Сплошная линия – теоретическая кривая, вычисленная по теории [8], со значениями, приведенными в подписи к рис. 2, и $l_m/\xi_1 = 1.6$.

на рис. 3 и 4, было отношение длины свободного пробега электронов проводимости в Ф-слое l_m к длине когерентности ξ_I ; остальные параметры были определены из наших данных по электросопротивлению и подгонки теории к зависимости $T_C(d_V)$ (рис. 2), которая нечувствительна к значению отношения l_m/ξ_I . Из сравнения рис. 3 и 4 видно, что различие отношения l_m/ξ_I вызывает “возвратное” поведение T_C на рис. 4, которое на рис. 3 не наблюдается. Мы полагаем, что более плоские интерфейсы в образцах серий 3 и 4 несомненно ответственны за большие длины свободного пробега l_m в образцах этих серий.

В соответствии с [6], параметр прозрачности интерфейса $T_m = 1.6$, определенный при подгонке теории к эксперименту, позволяет оценить квантовомеханический коэффициент прохождения интерфейса Ф/С куперовскими парами $T = T_m/(1 + T_m) = 0.6$. Как мы и ожидали, это значение T вдвое больше величины T , полученной нами ранее для интерфейса Pb/Fe [6]. Мы полагаем, что единственной физической причиной ограничения прозрачности интерфейса V/Fe является обменное расщепление зоны проводимости ферромагнетика в отличие от случая интерфейса Pb/Fe, где отсутствие гибридизации зон проводимости Pb и Fe также дает свой вклад.

Литература

1. Bulaevskii L.B., Buzdin A.I., Kulić M.L., Panjukov S.V.: Coexistence of superconductivity and magnetism. *Adv. Phys.* **34**, 175 (1985)
2. Jin B.Y., Ketterson J.B.: Artificial metallic superlattices. *Adv. Phys.* **38**, 189 (1989)
3. Jiang J.S., Davidovic D., Reich D.H., Chien C.L.: Oscillatory superconducting transition temperature in Nb/Gd multi-layers. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 314 (1995)
4. Mühge Th., Garif'yanov N.N., Goryunov Yu.V., Khaliullin G.G., Tagirov L.R., Westerholt K., Garifullin I.A., Zabel H.: Possible origin for oscillatory superconducting transition temperature in superconductor/ferromagnet multilayers. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1857 (1996)
5. Mühge Th., Garif'yanov N.N., Goryunov Yu.V., Westerholt K., Zabel H., Garifullin I.A., Khaliullin G.G.: Magnetism and superconductivity of Fe/Nb/Fe trilayers. *Phys. Rev. B* **55**, 8945 (1997)
6. Lazar L., Westerholt K., Zabel H., Tagirov L.R., Goryunov Yu.V., Garif'yanov N.N., Garifullin I.A.: Superconductor/ferromagnet proximity effect in Fe/Pb/Fe trilayers. *Phys. Rev. B* **61**, 3711 (2000)
7. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н.: Неоднородное состояние сверхпроводников. *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1965); Fulde P., Ferrel R.A.: Superconductivity in a strong spin-exchange field. *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964)
8. Tagirov L.R.: Proximity effect and superconducting transition temperature in superconductor/ferromagnet sandwiches. *Physica C* **307**, 145 (1998)
9. Tagirov L.R., Garifullin I.A., Garif'yanov N.N., Khlebnikov S.Ya., Tichonov D.A., Westerholt K., Zabel H.: Re-entrant superconductivity in the V/Fe superconductor/ferromagnet layered system. *J. Mag. Mag. Mat.* **240**, 577 (2002)

Квазиклассическая теория гигантского магнетосопротивления в наноразмерных магнитных контактах

Б. П. Водопьянов

Лаборатория физики перспективных материалов

Создана квазиклассическая теория проводимости и магнетосопротивления магнитных наноразмерных точечных контактов. Вычислены их максимально возможные значения магнетосопротивления как для баллистического, так и для диффузионного режима транспорта в области контакта. Найдены условия, необходимые для реализации гигантских значений магнетосопротивления.

Суть явления гигантского магнетосопротивления (ГМС), открытого чуть более десяти лет тому назад, состоит в том, что проводимость контакта двух магнитных доменов существенно зависит от взаимной ориентации их намагниченностей. Проводимость контакта магнетиков при параллельной ориентации их намагниченностей значительно больше, чем при антипараллельной. Несмотря на то, что применения эффекта ГМС уже реализованы в виде магниторезистивных головок чтения в скоростных жестких дисках компьютеров и микросхем магниторезистивной памяти, физического понимания и математического описания эффекта ГМС не было. Недавно выполнены эксперименты по измерению магнетосопротивления точечных контактов двух магнитных доменов (поперечный размер контакта порядка 1 нм). Магнетосопротивление достигало 280% [1, 2].

Данная работа посвящена объяснению эффекта гигантского магнетосопротивления, наблюдающегося в контактах магнетиков различного вида. В ней развита квазиклассическая теория проводимости и магнетосопротивления магнитных наноразмерных точечных контактов, которые представляет собой физически предельно малый магнеточувствительный элемент магнетoeлектроники. На примере точечных магнитных контактов установлены причины возникновения ГМС и условия, при которых оно реализуется. Вычислены максимально возможные значения магнетосопротивления как для баллистического, так и для диффузионного режима транспорта в области контакта. Впервые получены решения, справедливые при произвольном соотношении между величиной спинового расщепления зоны проводимости и скоростью релаксации импульса электрона, а также между импульсной длиной свободного пробега электрона проводимости в контактирующих магнетиках и диаметром контакта. Таким образом, теория описывает спин-поляризованный транспорт через точечный контакт от баллистического до диффузного режимов проводимости в области контакта. Для ферромагнитных металлов группы железа теория предсказывает уве-

личение магнетосопротивления при достижении баллистического режима транспорта до нескольких сот процентов.

Точечный контакт рассматривался как отверстие с радиусом в несколько ангстрем в непроницаемой мембране, разделяющей два магнитных домена на направление намагниченности в которых может изменяться относительно друг друга. Магнетосопротивление определяется как отношение разности проводимостей контакта при параллельной и антипараллельной ориентации намагниченностей к проводимости контакта при антипараллельной ориентации намагниченностей, выраженное в процентах.

При антипараллельной ориентации намагниченностей доменов, образующих контакт, доменная стенка создается внутри отверстия с характерными размерами порядка диаметра отверстия. Когда прикладывается напряжение, электроны со спином, направленным вверх, и со спином, направленным вниз, пересекают доменную стенку. Если спин сохраняется при прохождении доменной стенки, тогда электроны со спином вверх левого домена должны быть приняты подзоной со спином вверх правого домена. Аналогично для электрона со спином вниз. Рассматривается зеркальное отражение электронов от границы.

В этом случае из-за большой разности фермиевских импульсов в подзонах только электроны с узким конусом углов падения вокруг нормали к границе (параллельная границе компонента импульса сохраняется) пропускаются областью точечного контакта. Электроны, имеющие большие углы падения, испытывают полное внутреннее отражение. Это обуславливает большое магнетосопротивление точечных магнитных контактов. Этот механизм образования GMR является общим для всех видов магнитных контактов. Чтобы спин электрона проводимости сохранялся при прохождении доменной стенки, необходимо, чтобы баллистическое время пролета через доменную стенку было короче времени его продольной релаксации T_1 . В этом случае доменная стенка для электрона проводимости является эффективно резкой.

Для ступенчатого потенциала в баллистическом пределе получено следующее выражение для магнетосопротивления:

$$MR = \frac{(1 - \delta)(5\delta^3 + 15\delta^2 + 9\delta + 3)}{8\delta^3(\delta + 2)}.$$

Здесь δ – поляризованность магнетика: отношение фермиевских импульсов спиновых подзон, δ меньше единицы.

Для произвольного соотношения между диаметром отверстия $2a$ и длиной свободного пробега электрона проводимости l , магнетосопротивление рассчитано численно и представлено на рис. 1.

Теория хорошо согласуется с имеющимися экспериментами на наноразмерных никель-никелевых и кобальт-кобальтовых точечных контактах, показывающих гигантские величины магнетосопротивления достигающие 300% при комнатной температуре. Теория предсказывает еще большие значения магнетосопротивления, достигающие 1000 и более процентов, если нанокontakt будет сделан из синтезированных недавно магнитных материалов (например, монокристаллического диоксида хрома, CrO_2), обладающих рекордно большими спиновыми поляризациями зоны проводимости.

Полный расчет магнетосопротивления точечного контакта магнетиков опубликован в статье [3].

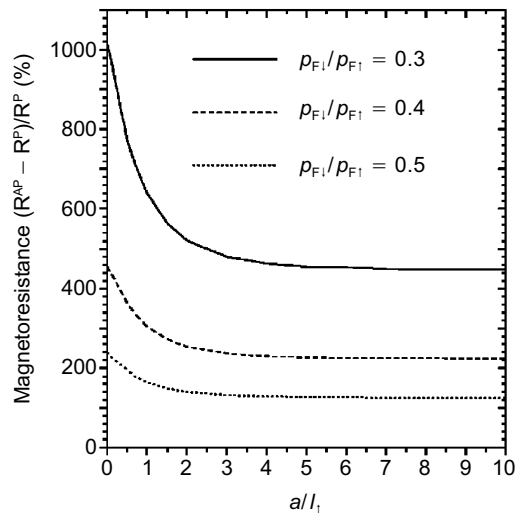


Рис. 1. Зависимость магнетосопротивления от радиуса контакта. $l_t/l_t = 2.0$ [3].

Литература

1. Garcia N., Munoz M., Zhao Y.-W.: Magnetoresistance in excess of 200% in ballistic Ni nanocontacts at room temperature and 100 Oe. Phys. Rev. Lett. **82**, 2923 (1999)
2. Tataru G., Zhao Y.-W., Munoz M., Garcia N.: Domain wall scattering explains 300% ballistic magnetoconductance of nanocontacts. Phys. Rev. Lett. **83**, 2030 (1999)
3. Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.V.: Ballistic versus diffusive magnetoresistance of a magnetic point contact. Phys. Rev. B **63**, 104428 (2001)

Влияние размерных факторов на механизмы пиннинга вихрей в тонких сверхпроводящих пленках

Ю. И. Таланов

Лаборатория физики перспективных материалов

В широком интервале магнитных полей и температур проведены исследования поведения плотности критического тока, намагниченности, профиля магнитного потока и линии необратимости тонких пленок оксидного сверхпроводника $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, подвергнутых облучению в пучке ионов ^{238}U с энергией до 2 ГэВ. В образцах с большой концентрацией колончатых дефектов, образовавшихся в результате облучения, обнаружено аномальное уменьшение плотности критического тока, которое обусловлено ослаблением пиннинга из-за малых расстояний между дефектами и влиянием поверхностного слоя. Исследование необратимых по магнитному полю процессов с помощью регистрации петель гистерезиса намагниченности и микроволнового поглощения показало, что при температурах, близких к критической, вихревая динамика определяется взаимодействием двумерных вихрей с поверхностью сверхпроводящей пленки. Обнаружено, что поверхностный барьер проникновению вихрей сильно ослабляется при формировании колончатых дефектов вблизи границы, как было предсказано в теоретической работе А. Е. Кошелева и В. М. Винокура.

Введение

В рамках исследований вихревого состояния ВТСП материалов основные наши усилия были направлены на решение проблемы закрепления магнитного потока в тонких пленках слоистых сверхпроводников, на определение влияния структурных элементов различного типа (поверхности, точечных, колончатых и объемных дефектов) и их комбинаций на пиннинг, характер движения вихрей и фазовую диаграмму вихревой системы слоистых высокотемпературных сверхпроводников.

Задача закрепления магнитного потока в сверхпроводнике для обеспечения бездиссипативного протекания электрического тока может быть решена многими способами. Часть их связана с существованием барьера для движения вихрей на границе раздела сверхпроводящей и несверхпроводящей сред, например, барьер Бина-Ливингстона, краевой геометрический барьер и т.п. Другим способом фиксации вихрей является их пиннинг на различных дефектах кристаллической структуры сверхпроводящего материала. Наиболее эффективными центрами пиннинга являются дефекты колончатой формы, которые взаимодействуют с вихревой линией на протяжении всей ее длины и при условии совпадения диаметра колонки с диаметром нормальной сердцевинки вихря обеспечивают максимальное понижение энергии сверхпроводника в магнитном поле. Колончатые дефекты создаются путем облучения материалов пучками ионов тяжелых элементов, разогнанными в ускорителе до энергий порядка 1 ГэВ. Естественные и самые многочисленные дефекты кристаллической решетки, дефекты точечного типа, обладают наименьшей эффектив-

ностью в качестве препятствия движению вихрей. Они могут захватить вихри только в режиме коллективного пиннинга, т.е. при условии одновременного взаимодействия связки вихрей с большим количеством точечных центров пиннинга. Это обстоятельство приводит к сильной зависимости плотности критического тока от величины внешнего магнитного поля, а именно, критический ток быстро убывает по мере увеличения поля.

Эффективность взаимодействия вихревых нитей с центрами пиннинга может существенно измениться в случае тонкой пленки сверхпроводника, помещенной в магнитное поле, перпендикулярное ее плоскости. В такой ситуации длина вихревой нити и длина колончатого дефекта, равные толщине пленки, достаточно малы. Это приводит к ослаблению силы пиннинга. С другой стороны, отношение характерного размера точечного дефекта к полной длине вихревой нити с уменьшением толщины возрастает. В пределе толщины, сравнимой с радиусом взаимодействия, это может привести к необычной ситуации, когда потенциал пиннинга точечного дефекта сравним с таковым для колончатого центра пиннинга. В связи с этим одной из задач наших исследований является определение эффективности центров пиннинга различной формы в сверхпроводящих пленках различной толщины.

Еще одним фактором, определяющим вихревую динамику в высокотемпературных сверхпроводниках, является их слоистое строение. В условиях, когда расстояние между сверхпроводящими слоями превышает длину когерентности, происходит распад вихревых нитей на отдельные двумерные вихри, которые движутся в своих слоях независимо от вихрей сосед-

них слоев. Такие двумерные вихри взаимодействуют с центрами пиннинга только в пределах своего слоя. Это обстоятельство отражается на потенциале пиннинга центров различной формы. Влияние двумерного режима движения вихрей на эффективность точечных и колончатых центров пиннинга в оксидных сверхпроводниках с различной степенью слоистости также является предметом наших исследований.

Внимательное рассмотрение взаимного влияния различных механизмов пиннинга иногда приводит к неожиданным результатам. Одним из примеров этого может служить предложенное совсем недавно в теоретических расчетах А. Е. Кошелева и В. М. Винокура [1] понижение поверхностного барьера при создании вблизи поверхности колончатых дефектов, которые облегчают проникновение вихрей внутрь сверхпроводника. Можно ожидать аналогичное понижение барьера объемного пиннинга, когда дистанция между колончатыми центрами пиннинга уменьшается до величины, существенно меньшей глубины проникновения магнитного поля, а их число становится значительно больше количества вихрей, присутствующих в сверхпроводнике [2]. Такие случаи уже удалось наблюдать (см., например, [3]). Поэтому мы проводим исследования с целью нахождения оптимального соотношения числа колончатых центров пиннинга и вихрей.

Ниже приведены результаты исследования вихревого состояния облученных и необлученных пленок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, полученные в 2001 году.

Детали эксперимента

Образцы

Тонкие пленки $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ были приготовлены нами в лаборатории профессора Х. Адриана (Институт физики Университета Гутенберга, г. Майнц, Германия) методом магнетронного распыления этого соединения в атмосфере кислорода и осаждения материала на монокристаллическую подложку LaAlO_3 с последующим отжигом при температуре 820°C и давлении кислорода 3.3 мбар. Размеры подложки $10 \times 10 \times 1 \text{ мм}^3$. Толщина пленок 200 нм. Температуры перехода пленок в сверхпроводящее состояние до облучения варьировались в пределах от 82 до 86 К.

Для формирования в сверхпроводниках центров пиннинга колончатого типа, пленки облучались пучком ионов ^{238}U , с энергией до 2 ГэВ. Облучение тонких пленок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ осуществлялось на ускорителе GSI, г. Дармштадт, Германия. После облучения критическая температура сверхпроводящих пленок заметно понижалась, как это показано на рис. 1, что связано с образованием несверхпроводящих областей в радиационных треках. Здесь и ниже доза облучения приводится в единицах так называемого “поля совпа-

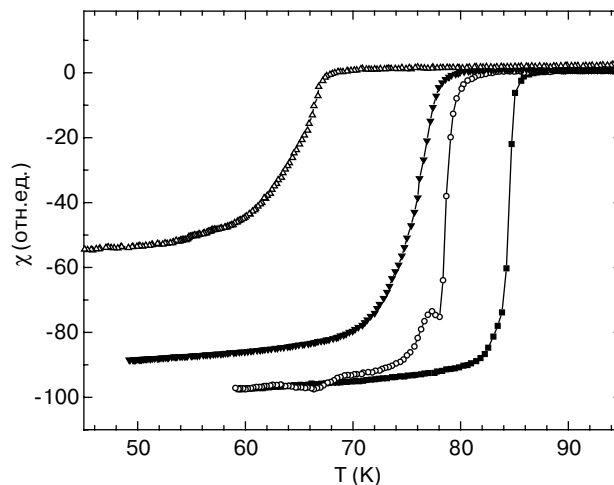


Рис. 1. Переходы в сверхпроводящее состояние четырех пленок серии B261000, с дозами облучения B_ϕ от 0 до 3 Тл, полученные с помощью измерений температурной зависимости высокочастотной магнитной восприимчивости. ■ 0 Тл, ○ 1 Тл, ▼ 2 Тл, ▲ 3 Тл.

дения” B_ϕ — магнитного поля такой величины, при которой плотность вихревых линий совпадает с плотностью треков (колончатых дефектов), образовавшихся при облучении.

Методы исследований

Специфика объектов исследования, представляющих из себя магнитные образования — нити магнитного потока, определяет методы исследования, которые используются для получения информации о вихревой системе сверхпроводников. Это методы, основанные на взаимодействии магнитного потока сверхпроводника с постоянным, медленно меняющимся или осциллирующим магнитным полем. Среди них — измерения зависимости намагниченности от величины магнитного поля и температуры, магнитной восприимчивости, релаксации магнитного потока и поглощения микроволнового поля. Для определения плотности критического тока, в тех случаях, когда невозможно это сделать напрямую, путем транспортных измерений, применяются измерения намагниченности в сочетании с определением профиля магнитного потока с помощью поверхностных магнитных зондов.

Резонансные (ЭПР) и нерезонансные (МВП) измерения микроволнового поглощения проводились на модуляционном спектрометре BER-418s фирмы Брукер. Диапазон рабочих частот 9.2–9.7 ГГц. Чувствительность $5 \cdot 10^{10}$ спин/Гс. Подводимая к резонатору мощность менялась в пределах от 1 до 250 мВт. Добротность резонатора 5000. Использовалась модуляция поля с частотой 100 кГц и амплитудой до 10 Э.

Для исследования распределения (профиля) магнитного поля в сверхпроводниках использовался разработанный нами метод подвижного спинового зонда.

Величина локального поля в месте расположения зонда определяется по сдвигу сигнала ЭПР. В качестве спинового (парамагнитного) зонда используется кристалл дифенил-пикрилгидразила (ДФПГ), содержащего свободные радикалы. Его размеры $0.1 \times 0.1 \times 0.05$ мм³. Спектр ЭПР ДФПГ состоит из одиночной линии лоренцевой формы с шириной от пика до пика $\delta H_{pp} = 1.7$ Э и g -фактором, равным 2.0036. В условиях эксперимента, при работе спектрометра на частоте 9.42 ГГц, резонансное поле сигнала составляет 3320 Э. Подробное описание метода и техники измерений можно найти в работах [4, 5].

Измерение петли гистерезиса намагниченности, полученные на разных образцах при разных температурах, позволяют проследить поведение плотности критического тока с изменением дозы облучения и температуры измерения. Если провести калибровку измеряемой необратимой намагниченности сверхпроводников с помощью сопоставления с измерениями профиля поля при тех же условиях, то можно получить зависимости абсолютных значений плотности критического тока от внешних условий и облучения. Намагниченность сверхпроводящего образца определялась как разность поля в образце и внешнего поля. Эти поля измерялись с помощью холловских датчиков, один из которых помещался непосредственно на поверхность исследуемого образца, а другой на значительном удалении от него, причем оба – в зазоре магнита. Электромагнит позволяет изменять внешнее поле от 0 до 7000 Э.

Результаты

Влияния облучения тяжелыми ионами тонких сверхпроводящих пленок на плотность критического тока

Исследование зависимости плотности критического тока от напряженности магнитного поля, температуры и дозы облучения проводилось путем регистрации петли намагничивания $M(H)$ в изменяемых внешних условиях. В качестве меры намагниченности использовалась величина разности $B - H$. Здесь H – внешнее поле, B – поле на поверхности образца. Петли намагничивания, полученные для одного из образцов при разных температурах, показаны на рис. 2.

При использовании только холловских датчиков для измерения намагниченности невозможно определить абсолютную величину плотности критического тока. Есть несколько обстоятельств, не позволяющих сделать это: 1) поле измеряется на поверхности сверхпроводника, а не в объеме, на расстоянии не менее 10 мкм; 2) размер рабочей зоны холловского датчика (0.5×0.5 мм²) меньше, чем размер образца; 3) соотношение площадей образца и рабочей зоны датчика поля изменяется от образца к образцу. Поэтому мы исполь-

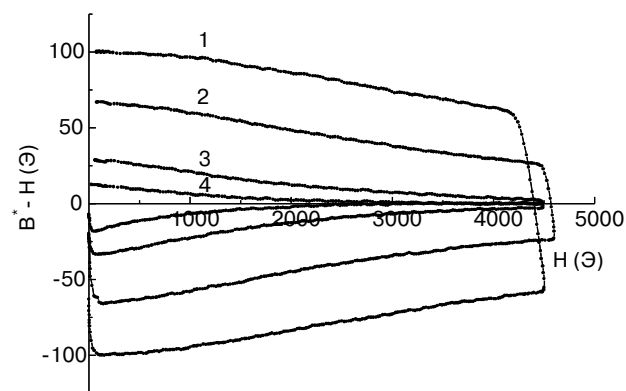


Рис. 2. Петли намагничивания необлученного образца B1711 при нескольких температурах: 1 – 20 К, 2 – 34 К, 3 – 50 К, 4 – 60 К.

зовали измерения распределения поля на поверхности пленок, чтобы прокалибровать полученные величины намагниченности в единицах плотности критического тока.

Распределение поля измерялось при тех же температурах, что и намагниченность, на тех же образцах пленок, вырезанных в форме полосы шириной 1.5–2 мм и длиной 3–3.5 мм. Распределение определялось с помощью техники подвижного спинового зонда, описанной в предыдущем параграфе. Пример такого распределения, полученного на тонкой пленке B1711, показан на рис. 3.

Чтобы получить величину плотности критического тока j_c , мы проводили сравнение теоретического выражения для распределения поля с экспериментальными данными. Для этой цели использовалась фор-

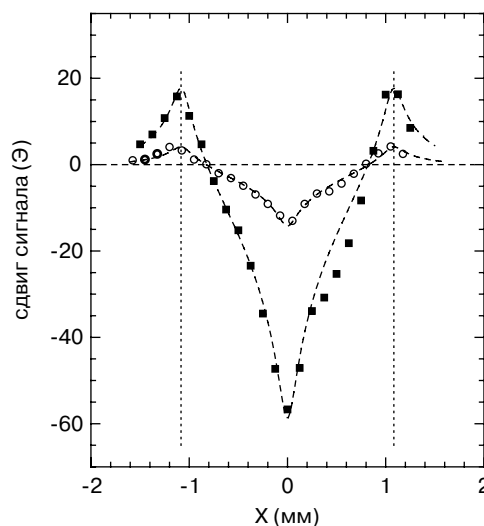


Рис. 3. Зависимость сдвига ЭПР сигнала от положения зонда на поверхности необлученного образца B1711 при двух температурах. Штриховые линии соответствуют уравнению (1) с параметрами: $j_c = 2.6 \cdot 10^6$ А/см² при $T = 27$ К (■) и $j_c = 6.3 \cdot 10^5$ А/см² при $T = 42$ К (○). $z = 70$ мкм. Вертикальные пунктирные прямые обозначают края пленки.

мула для профиля поля в случае объемного пиннинга из работы [6]:

$$\Delta H(x, z) = -\frac{j_c d}{c} \ln \left(\frac{[(x-w)^2 + z^2][(x+w)^2 + z^2]}{(x^2 + z^2)^2} \right). \quad (1)$$

Здесь $\Delta H(x, z)$ – величина разности между локальным полем в точке расположения зонда и внешним полем в зависимости от положения зонда относительно центра образца. Положение зонда задается двумя координатами в направлениях, перпендикулярных самому длинному ребру пластины (x – в базисной плоскости, z – перпендикулярно ей). d – толщина, а w – ширина полосы. Это уравнение содержит только два параметра (не считая x): плотность критического тока j_c и расстояние от поверхности сверхпроводника до центра спинного зонда z . Эти параметры влияют на распределение поля различным образом. Разница между экстремальными величинами распределения (на краю полосы и в центре) очень чувствительна к величине критического тока, в то время как расстояние z сильно влияет на форму распределения. Это обстоятельство позволяет зафиксировать параметр z и подбирать в расчетах только плотность критического тока. Результат подгонки уравнения (1) к точкам экспериментальной зависимости $\Delta H(x)$, полученной на образце B1711 при двух температурах и внешнем поле около 3300 Э, показан на рис. 3 штриховыми линиями.

На рис. 4 приведены зависимости плотности критического тока от внешнего поля для наших исходных и облученных пленок и соответствующие данные для толстых лент, взятые из работы [7]. Из сравнения зависимостей $j_c(H)$ разных образцов можно видеть, что при одинаковых температурах в полях меньше 5 кЭ плотность критического тока облученных пленок значительно меньше, чем у исходных. Это довольно неожиданный результат, который противоречит и предсказаниям теории пиннинга колончатых дефектов [2], и результатам полученным на толстых образцах исследуемого соединения [7]. Рассматривая, как меняется зависимость $j_c(H)$ с уменьшением толщины сверхпроводящих образцов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ и после облучения их тяжелыми ионами, можно отметить несколько интересных моментов. Во-первых, при уменьшении толщины необлученных образцов (т.е. при переходе от ленты толщиной 13 мкм к пленке толщиной 0.2 мкм) плотность критического тока в нулевом поле не меняется. Однако, ее величина в толстой ленте сильно зависит от поля (возможно, экспоненциально) и значительно слабее – в тонкой пленке. Так что в полях, больших 1 кЭ, критический ток тонкой пленки превышает таковой в ленте в 2–3 раза. Облучение толстых лент пучком тяжелых ионов (создание в них большого числа колончатых дефектов) приводит к значительному увеличению плотности критического тока, при этом зависимость от поля остается очень сильной. С другой стороны, облучение

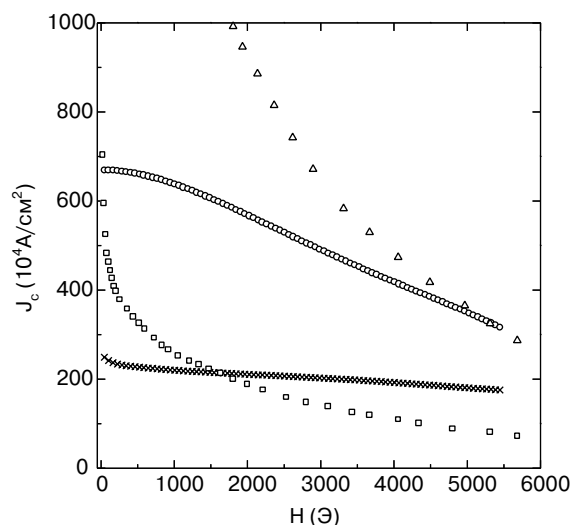


Рис. 4. Плотность критического тока в зависимости от внешнего поля для четырех образцов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$: $\square$ необлученная лента толщиной 13 мкм; Δ та же лента, облученная пучком ионов золота дозой 3 Тл; $\circ$ необлученная пленка толщиной 0.2 мкм (B1711); $\times$ пленка, облученная ионами урана дозой 1 Тл. Измерения проводились при температуре 20 К. Данные для толстых лент взяты из работы [7].

тонких пленок дает в результате как уменьшение величины критического тока, так и ослабление полевой зависимости.

Уменьшение плотности тока после облучения в нулевом поле может быть обусловлено ослаблением объемного пиннинга посредством механизма, аналогичного тому, что приводит к подавлению поверхностного барьера колончатыми дефектами [1]. Несмотря на это, почти полное отсутствие полевой зависимости критического тока тонких пленок, облученных ионами урана, является безусловно положительным фактом, поскольку они позволяют осуществлять бездиссипативный транспорт тока, хотя и меньшей величины, но в гораздо более высоких полях.

Линия необратимости

Линия необратимости (ЛН) является границей между областями фазовой диаграммы с обратимым по полю (высокие поля и температуры) и необратимым (низкие поля и температуры) поведением магнитных характеристик сверхпроводника. Точки линии необратимости $H_{lr}(T)$ были получены двумя способами: 1) как точки, в которых гистерезис намагниченности спадает до 0; 2) как поле коллапса петли гистерезиса микроволнового поглощения. Зависимости $H_{lr}(T)$, полученные этими разными способами, практически совпадают, что можно увидеть на рис. 5. Необходимо отметить еще две важные особенности построенных на этом рисунке линий необратимости: 1) облучение пленок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ионами урана с дозами до $B_\phi = 1$

Тл приводит к сдвигу ЛН в сторону высоких полей и температур. При больших дозах облучения ЛН смещается в противоположную сторону, т.е. в низкие поля и температуры. 2) ЛН тонких пленок (как облу-

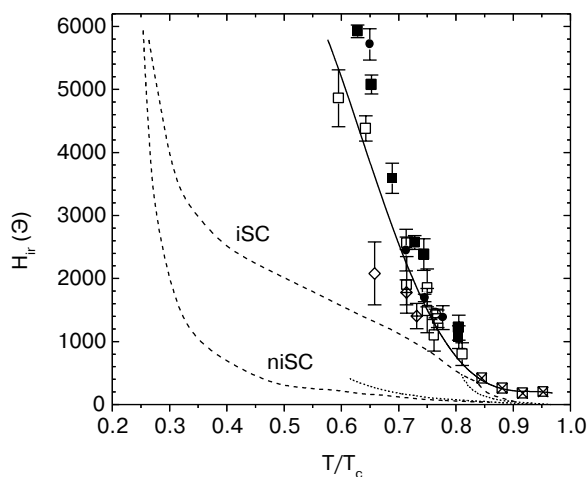


Рис. 5. Линия необратимости тонких пленок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, исходных (□) и облученных разными дозами ионов урана (■ $B_\phi = 0.3$ Тл, ● $B_\phi = 1$ Тл, ◇ $B_\phi = 2$ Тл), и для монокристаллов, необлученных (niSC) и облученных пучком ионов свинца (iSC). Данные для монокристаллов взяты из работ [8, 9].

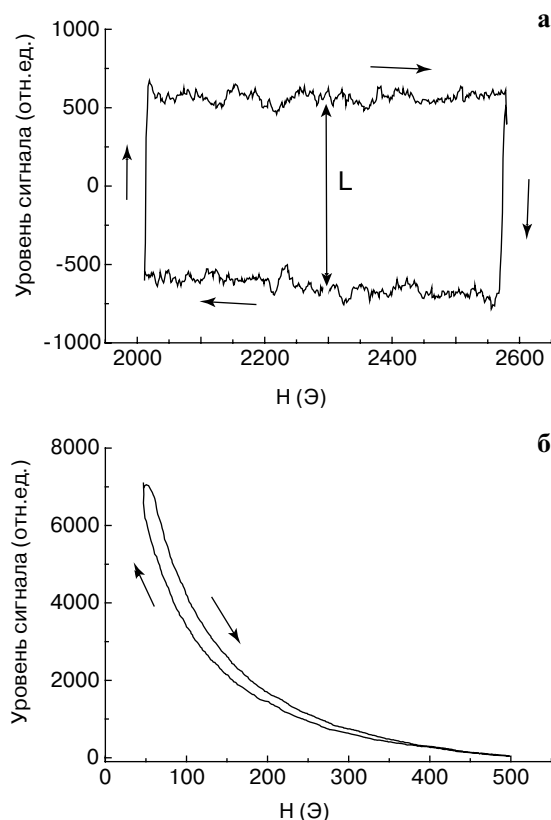


Рис. 6. Петли гистерезиса МВП в образце B1711, полученные при разных условиях: **а** $T = 27$ К, $2.0 \leq H \leq 2.6$ кЭ, форма петли характерна для объемного пиннинга [10]; **б** $T = 71$ К, $50 \leq H \leq 500$ Э, форма петли определяется поверхностным (краевым) барьером.

ченных, так и исходных) лежит в полях значительно выше таковой для монокристаллов. (Данные для монокристаллов взяты из работ [8, 9].)

При достаточно высоких температурах, $T > 0.8T_c$, эффективность пиннинга точечных и колончатых дефектов в пленках $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ понижается до нуля. В этих условиях пиннинг и гистерезис магнитных параметров определяются поверхностным (краевым) потенциальным барьером проникновению точечных двумерных вихрей в сверхпроводник через боковую поверхность. Это наглядно показывают измерения гистерезиса микроволнового поглощения, который кардинально меняет свою форму при изменении характера пиннинга (см. рис. 6).

На рис. 5 точки линии необратимости образца B1711, полученные при температурах выше 70 К, показаны в виде квадратов с крестом. Они соответствуют пиннингу поверхностным барьером. Важно отметить, что в облученных образцах гистерезис, связанный с поверхностным барьером, исчезает в значительно более низких полях (65 Э при $T = 71$ К), чем в случае необлученных пленок (280 Э при $T = 73$ К). Этот факт находится в хорошем соответствии с теоретическими предсказаниями [1] о подавлении поверхностного барьера колончатыми дефектами.

Заключение

Анализ поведения плотности критического тока, намагниченности, профиля магнитного потока и линии необратимости тонких пленок высокотемпературного сверхпроводника $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ в широком интервале магнитных полей и температур позволяет сделать следующие выводы:

1. Облучение пленок в пучке ионов урана большими дозами ($B_\phi > 1$ Т) приводит к образованию колончатых дефектов с большой концентрацией и уменьшению плотности критического тока, что связано с ослаблением пиннинга из-за малых расстояний между дефектами и с влиянием поверхностного слоя.
2. При температурах, близких к критической, вихревая динамика определяется взаимодействием двумерных вихрей с поверхностью сверхпроводящей пленки. Обнаружено, что поверхностный барьер проникновению вихрей сильно ослабляется при формировании колончатых дефектов вблизи границы, как было предсказано в теоретической работе [1].

Литература

1. Koshelev A.E., Vinokur V.M.: Suppression of surface barrier in superconductors by columnar defects. arXiv:cond-mat/0106284 (2001)
2. Nelson D.R., Vinokur V.M.: Boson localization and correlated pinning of superconducting vortex arrays. Phys. Rev. B **48**, 13060 (1993)

3. Krushin-Elbaum L., Civale L., Thompson J.R., Field C.: Accommodation of vortices to columnar defects: evidence for large entropic reduction of vortex localization. *Phys. Rev. B* **53**, 11744 (1996)
4. Khasanov R.I., Talanov Yu.I., Vashakidze Yu.M., Teitel'baum G.B.: Critical state of an YBaCuO strip in perpendicular magnetic field as revealed by moving ESR-probe. *Physica C* **242**, 333 (1995)
5. Таланов Ю.И.: Исследование вихревого состояния оксидных сверхпроводников методами микроволнового поглощения. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Казань 2000.
6. Khasanov R.I., Talanov Yu.I., Assmus W., Teitel'baum G.B.: Cross-over from bulk pinning to geometrical barrier in a $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ single crystal as revealed by a scanning ESR-probe method. *Phys. Rev. B* **54**, 13339 (1996)
7. Kazumata Y., Kumakura H., Togano K.: Vortex pinning in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ tapes irradiated by ions. *Phys. Rev. B* **54**, 16206 (1996)
8. Konczykowski M., Chikumoto N., Vinokur V.M., Feigelman M.V.: Experimental evidence for Bose-glass behavior in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ crystals with columnar defects. *Phys. Rev. B* **51**, 3957 (1995)
9. Zech D., Lee S.L., Keller H., Blatter G., Janossy B., Kes P.H., Li T.W., Menovsky A.A.: Correlation of flux lines in single-crystal $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ with columnar defects. *Phys. Rev. B* **52**, 6913 (1995)
10. Shaposhnikova T., Vashakidze Yu., Khasanov R., Talanov Yu.: Peculiarities of the vortex dynamics in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ single crystals as revealed by irreversible microwave absorption. *Physica C* **300**, 239 (1998)

Феноменологическая теория релаксоров и свойства электронной системы

Р. Ф. Мамин

Лаборатория физики перспективных материалов

Развита феноменологическая модель сегнетоэлектриков с размытым фазовым переходом (релаксоров). Показано, что поведение релаксоров можно описывать в рамках теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау. Получено описание температурного и частотного поведения диэлектрической постоянной в области размытого максимума. Показано, что поведение в этой области температур связано с динамикой процессов образования поляронных состояний в результате локализации зарядов на дефектах. Исследованы долго протекающие процессы в низкотемпературной фазе релаксоров. Найдена зависимость времени задержки фазового перехода в однородно поляризованное состояние от температуры и величины внешнего электрического поля. Теория хорошо согласуется с известными экспериментальными данными, имеющимися для соединений $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{1/3}\text{O}_3$ и $\text{Pb}_{1-x}\text{La}_x\text{Zr}_{1-y}\text{Ti}_y\text{O}_3$.

Введение

Исследования влияния электронной подсистемы на структурные фазовые переходы проводятся в лаборатории физики перспективных материалов уже с 1986 года. Последние годы посвящены разработке модели для размытых фазовых переходов в релаксорах. В 2001 году усилия были сконцентрированы на исследованиях поведения диэлектрической постоянной в области размытого максимума и в низкотемпературной фазе релаксоров. Найдено распределение вероятности времен релаксации как функция плотности состояний в примесной зоне. Получены температурные и частотные зависимости диэлектрической постоянной в области размытого максимума. Найдена зависимость времени задержки фазового перехода в однородно поляризованное состояние от температуры и величины внешнего электрического поля. Результаты будут опубликованы в 2002 году.

Соединения с размытыми фазовыми переходами, которые часто называют релаксорами, являются одними из наиболее интенсивно изучаемых сегнетоэлектрических материалов [1–9]. Отличительной особенностью этих соединений является наличие сильно размытого максимума в температурном поведении диэлектрической проницаемости, а также сдвиг этого максимума в сторону более высоких температур с увеличением частоты измерительного поля. Такого рода дисперсия в поведении диэлектрической проницаемости проявляется на относительно низких частотах ($\omega = 1\text{--}10^6$ Гц), нехарактерных для обычных сегнетоэлектриков. Наиболее известными из семейства этих материалов являются следующие соединения: $\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{1/3})\text{O}_3$ [PMN] [2–5] и $\text{Pb}_{1-y}\text{La}_y(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ [PLZT] [6]. Неугасающий интерес к этим соединениям обусловлен совокупностью сегнетоэлектрических, пьезоэлектрических и оптических свойств, а также воз-

можностью использования этих материалов в разнообразных устройствах электронной техники. В частности, оптически прозрачные релаксоры являются прекрасной средой для накопления информации, индуцированной светом.

Несмотря на то, что исследование этих соединений длится уже весьма давно, удовлетворительного понимания физических механизмов и однозначной интерпретации наблюдаемых явлений нет до сегодняшнего дня. Основной проблемой является правильное описание температурного и частотного поведения диэлектрической проницаемости. Долгое время считалось, что поведение релаксоров нельзя описывать в рамках теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау, так как не выполняется закон Кюри-Вейса. Многочисленные экспериментальные данные показывают также, что свойства низкотемпературной фазы зависят от предыстории образцов, таким образом в низкотемпературной фазе проявляется неэргодическое поведение [7]. Природа низкотемпературной фазы остается недостаточно ясной до сих пор. При приложении электрического поля в низкотемпературной фазе после охлаждения без поля наблюдается переход в состояние с однородной поляризацией. В исследованиях [7] наблюдали такой фазовый переход спустя достаточно продолжительное время после начала приложения поля. Были получены зависимости времени задержки t_0 фазового перехода от температуры T и величины внешнего электрического поля E , которые хорошо описываются соотношениями вида: $t_0(E) = \tau_E \exp(E_0/E)$ и $t_0(T) = \tau_T \exp(T_0/T)$. Выяснение физического смысла наблюдаемых закономерностей важно для выяснения всей совокупности явлений в релаксорах.

Вместе с тем выяснение некоторых из этих вопросов может быть достигнуто на основе весьма простых, преимущественно термодинамических, соображений.

Известно, что возникновение релаксаторного поведения связано с существующим беспорядком в расположении атомов [1–5]. Для случая PMN это беспорядок в В-позиции атомов магния и ниобия. Но к релаксаторному поведению приводит не любой беспорядок, а только связанный с беспорядком в распределении зарядов. И можно заметить, что еще одним условием возникновения релаксаторного поведения является совпадение температуры фазового перехода с температурной областью термозаполнения ловушек. Свойства релаксаторов можно существенно менять введением даже незначительного количества примесей, которые влияют на зарядовое состояние соединений. При этом сдвиг температуры максимума диэлектрической проницаемости может достигать 50 К. Добавление лантана, который создает избыточный заряд, в PLZT приводит к релаксаторному поведению. Теоретический подход, описывающий сдвиг температуры фазового перехода за счет заполнения ловушек, хорошо известен. Он был разработан для описания влияния освещения на структурные фазовые переходы. Идея применения подобного подхода для описания размытых фазовых переходов была высказана в нашей ранней работе [10]. Именно такой подход мы осуществили для объяснения поведения релаксаторов.

Важную роль в этой теории играют процессы локализации носителей заряда на локальных центрах, поэтому, для выяснения особенности этих локализованных состояний, мы развиваем сейчас экспериментальные исследования оптических и фотопроводящих свойств этих соединений в содружестве с сотрудниками из различных лабораторий нашего института, а также из лаборатории МРС КГУ.

Модель

Свойства структурных фазовых переходов в полупроводниках во многом определяются взаимным влиянием электронной и решеточной подсистем. Это приводит к изменению энергетических интервалов электронного спектра при фазовом переходе и к сдвигу температуры фазового перехода при изменении заселенности ловушек [10].

С понижением температуры происходит постепенное заполнение уровней прилипания, причем эффективный температурный интервал, где происходит заполнение ловушек, составляет 10–40 К. В этой области температур возможно появление особенностей в структурных свойствах системы. Такое поведение наиболее вероятно, если интересующая нас область температур находится вблизи температуры фазовых переходов. Именно такая ситуация является предметом нашего исследования.

При локализации носителей заряда на локальных центрах вокруг них возникает деформация и появляется локальная поляризация. В этом смысле такое

образование будет представлять локализованный полярон. Характерная частота колебаний такого образования будет определяться характерными временами как решеточной, так и электронной подсистем. Локализованные заряды создают локальные электрические поля, которые, в свою очередь, стимулируют возникновение индуцированной поляризации. Направление этой поляризации определяется пространственным распределением локализованных зарядов. При T_c спонтанная поляризация будет направлена вдоль этих полей.

Основные уравнения

Рассмотрим сегнетоэлектрик с примесными центрами вблизи фазового перехода.

Уравнение, описывающее динамику параметра порядка η , запишем в виде релаксационного уравнения Ландау-Халатникова:

$$\frac{d\eta}{dt} = -\Gamma[(\alpha + am)\eta + (\beta + bm)\eta^3 - E]. \quad (1)$$

Здесь α , β и a , b – коэффициенты разложения решеточной части термодинамического потенциала и энергии электронов на уровнях прилипания соответственно по степеням параметра порядка, m – концентрация электронов на уровнях прилипания, E – внешнее электрическое поле. Особенностью релаксаторов является то, что характерные времена релаксации, τ , индуцированной поляризации будут определяться характерными временами не только решеточной подсистемы τ_l (как это имеет место в обычных сегнетоэлектриках), но и временами τ_m электронной подсистемы: $\tau = \tau_l^{1-\nu} \tau_m^\nu$ ($\nu \sim 0.5$). Таким образом, τ зависит от температуры следующим образом: $\tau(u) = \tau_0 \exp(u/kT)$ ($u = \nu u_m$). Время релаксации τ_m вблизи комнатной температуры становится достаточно большим, что позволяет описать локализацию зарядов на ловушках. Это также позволяет нам описать дисперсионную зависимость диэлектрической проницаемости. Так как при термоллокализации электронов с понижением температуры изменяется распределение электрических полей во всем образце, то изменяются и все характеристики фазового перехода. На термодинамическом уровне это влияние электронной подсистемы на фазовый переход удастся описать через непрерывный сдвиг температуры фазового перехода T_{cm} при постепенном заполнении ловушек:

$$T_{cm} = T_c - \frac{am}{\alpha'}. \quad (2)$$

где T_c – температура фазового перехода в отсутствие электронной подсистемы ($\alpha = \alpha'(T - T_c)$, $\alpha' = 2\pi/C$, C – константа Кюри-Вейсса).

Результаты

Динамика системы определяется тем, что характерные времена изменения параметра порядка η и концентрации электронов в ловушках m существенно различны ($\tau_\eta/\tau_m \ll 1$). Это позволяет исследовать нашу проблему методом разделения быстрых и медленных процессов. В результате для поляризации $P(t) = \int_V \eta(t) dV$ мы имеем:

$$P(t) = \varepsilon_\infty E(t) + \varepsilon_s \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [E(t') - (\beta + bm)P(t')]^3 \times \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau}\right) g(\tau) d\ln(\tau) dt', \quad (2)$$

где $g(\tau)$ – функция распределения времен релаксации $\int g(\tau) d\ln(\tau) = 1$. Функцию распределения времен релаксации, $g(\tau)$, удалось выразить через плотность состояний уровней прилипания, $N_{\text{DOS}}(u)$:

$$g(\ln(\tau)) = kTN_{\text{DOS}}(u(\tau)) = kTN_{\text{DOS}}(kT \ln(\tau/\tau_0)). \quad (4)$$

В результате, температурная зависимость для функции $g(\tau, T)$ имеет характерный вид (рис. 1). Линейный член по полю в уравнении (3) дает нам выражение для комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(\omega, T) = \varepsilon_\infty + \int \frac{\varepsilon_s(T)g(\tau)}{1 + i\tau\omega} d\ln(\tau), \quad T > T_{\text{cm}}. \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon_s(T) = 2\pi/(\alpha + am)$ – статическая диэлектрическая проницаемость. Температурная и дисперсионная зависимости реальной ε' и мнимой ε'' частей диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega, T)$ (5) представлены на рис. 2. В рамках нашего подхода удается естественным образом описать экспериментальную зависимость вида $\varepsilon'(T) \approx (T - T_{\text{cm}})^{-2}$, которая часто обсуж-

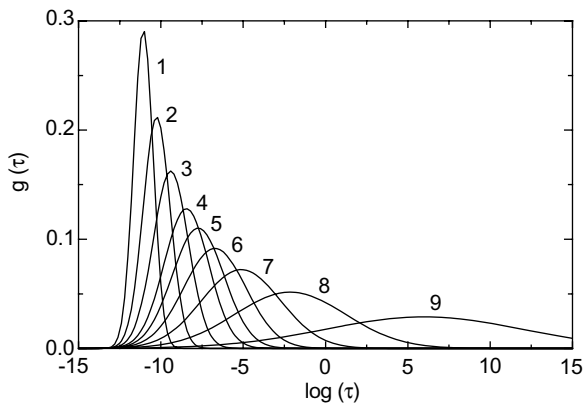


Рис. 1. Функция распределения времен релаксаций $g(\tau)$ для различных температур: 500 К (1), 400 К (2), 340 К (3), 300 К (4), 280 К (5), 260 К (6), 240 К (7), 220 К (8), 200 К (9).

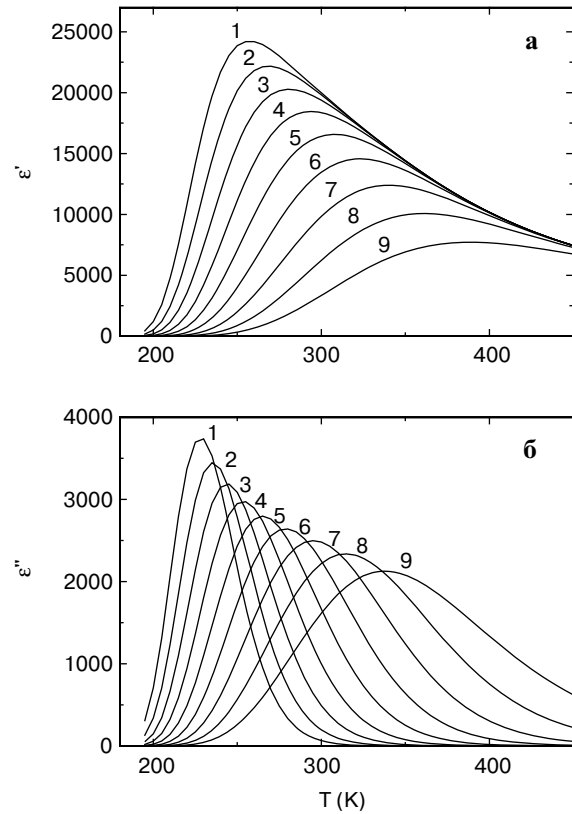


Рис. 2. Температурная зависимость реальной ε' (а) и мнимой ε'' (б) частей диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega, T)$ (5). Кривые: 1 – 0.1 Гц, 2 – 1 Гц, 3 – 10 Гц, 4 – 100 Гц, 5 – 1 кГц, 6 – 10 кГц, 7 – 100 кГц, 8 – 1 МГц, 9 – 10 МГц.

дается при подгонке наблюдаемых зависимостей [1, 3].

При приложении электрического поля в низкотемпературной фазе в достаточно сильных полях носители заряда делокализуются. В результате этого, локальное направление поляризации уже ничем не сдерживается, и поляризация переориентируется вдоль поля. Когда большинство центров пройдут через процесс ионизации, локальная поляризация имеет преимущественное направление вдоль внешнего поля. Становится выгодным, чтобы спонтанная поляризация по всему образцу имела одно направление, в результате происходит фазовый переход в сегнетоэлектрическое состояние. Время задержки фазового перехода описывается следующим выражением [11]:

$$t_0 \approx \frac{M}{n_0 A_0 (kT)^2 E} \exp\left(\frac{U_a}{kT}\right) \exp\left(\frac{E_0}{E}\right),$$

$$E_0 = \frac{\sqrt{2U_i m^*}}{e \varepsilon \tau_e},$$

здесь учтен термоактивационный характер проводимости $\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-U_a/kT)$, τ_e – время релаксации электронов проводимости.

Обсуждение

Некоторые выводы о природе этих центров можно сделать из проведенных ранее ЭПР исследований PLZT [9]. Было показано, что резонансные линии в спектре ЭПР, появляющиеся при облучении образцов перед началом измерений при низких температурах, относятся к F-центрам. Эти линии отсутствуют в экспериментах без освещения, или если освещение проводится при комнатной температуре. По нашему мнению это свидетельствует о том, что при комнатной температуре эти локальные центры еще термоактивированы и носители заряда не могут на них локализоваться, а при низких температурах носители заряда локализуются на этих центрах. Характерно, что эти линии наблюдаются до температуры 200 К. Именно эта температура как раз и соответствует переходу в состояние с локальной спонтанной поляризацией. Поэтому следует предположить, что эти локальные центры начинают термоактивироваться при температурах порядка 200 К. И именно эти локальные центры ответственны за размытость фазового перехода и за дисперсию диэлектрической проницаемости. В работе [9] предполагается, что за эти центры ответственны либо вакансии кислорода, либо вакансии свинца. Согласно [12], проводимость в PLZT скорее всего дырочная, поэтому следует полагать, что эти состояния образуются при расположении вакансии кислорода вблизи вакансии свинца. Энергия активации такого уровня должна быть порядка 0.7 эВ, что хорошо согласуется с результатами теоретического рассмотрения, проведенного выше.

Значения использованных нами параметров хорошо согласуются с экспериментальными данными по проводимости [12]. Значение энергии активации и температурная область локализации носителей заряда определяется из температурной зависимости проводимости. Из работы [12] видно, что температурная область локализации носителей находится вблизи температуры фазового перехода. Как видно из проведенного рассмотрения, процессы локализации носителей заряда на ловушках играют главную роль в дисперсии диэлектрической проницаемости. Поэтому мы рассматриваем различные возможности исследований этих локальных центров. Несмотря на очевидную важность изучения локальных центров и процессов их перезарядки, информация о них ограничена. При этом особенно важно изучение фотостимулированных процессов, что дает новую информацию об этих центрах. Для выяснения природы этих уровней и особенностей процессов локализации носителей заряда нами сейчас проводятся исследования проводящих и оптических свойств этих соединений в кооперации с другими лабораториями нашего института и с Казанским государственным университетом. Будут изучены процессы темновой и фотопроводимости, фото- и термостимулированной люминесценции и других опти-

ческих свойств в соединениях релаксоров PMN и PLZT.

Таким образом, предложен термодинамический подход для описания размытых фазовых переходов в сегнетоэлектриках. Показано, что поведение релаксоров можно описывать в рамках теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау. Показана важность учета процессов локализации носителей заряда на ловушках. Локализованные заряды создают локальные электрические поля и таким образом стимулируют возникновение индуцированной поляризации. Направление этой поляризации определяется пространственным распределением уровней, занятых носителями заряда. При структурном фазовом переходе спонтанная поляризация будет направлена в направлении этих полей. Большая диэлектрическая проницаемость и уровень размытости фазового перехода связаны с процессами локализации носителей заряда на ловушках. Дисперсия диэлектрической проницаемости определяется колебательными свойствами локальных состояний и зависит не только от характерного времени решеточной подсистемы, но также от динамики электронов на уровнях прилипания. Зависимость времени задержки фазового перехода в низкотемпературной фазе релаксоров от температуры и величины внешнего поля в достаточно сильных полях связана с процессами делокализации носителей заряда.

Литература

1. Смоленский Г.А., Исулов В.А., Аграновская А.И., Попов С.Н.: Сегнетоэлектрики кислородно-октаэдрического типа со слоистой структурой. ФТТ **3**, 895 (1961)
2. Cross L.E.: Relaxor ferroelectrics. *Ferroelectrics* **76**, 241 (1987)
3. Setter N., Cross L.E.: The role of B-site cation disorder in diffuse phase transition behavior of perovskite ferroelectrics. *J. Appl. Phys.* **51**, 4356 (1980)
4. Blinc R., Dolinsek J., Grigorovic A., et al.: Local polarization distribution and Edwards-Anderson order parameter of relaxor ferroelectrics. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 424 (1999)
5. Glazounov A.E., Tagantsev A.K.: Phenomenological model of dynamic nonlinear response of relaxor ferroelectrics. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2192 (2000)
6. Kutnjak Z. et al.: Slow dynamics and ergodicity breaking in a lanthanum-modified lead zirconate titanate relaxor system. *Phys. Rev. B* **59**, 294 (1999)
7. Colla E.V. et al.: *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1681 (1995)
8. Westphal V., Kleemann W., Glinchuk M.D.: Diffuse phase transitions and random-field-induced domain states of the "relaxor" ferroelectric $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nd}_{2/3}\text{O}_3$. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 847 (1992)
9. Максименко Ю.Л., Глинчук М.Д., Быков И.П.: Фотоиндуцированные центры в оптически прозрачной PLZT (8/65/35) керамике. ФТТ **39**, 1833 (1997)
10. Мамин Р.Ф.: Влияние термозаполнения ловушек на устойчивость структурных фаз в полупроводниках. Письма ЖЭТФ **58**, 538 (1993)
11. Mamin R.F., Blinc R.: Delay time of phase transition in low-temperature phase of relaxors. *Ferroelectrics Lett.* (в печати)
12. Krumins A.E., Ilyin U.I., Dimza V.I.: Thermal and spectral studies of photorefraction and photoconductivity in transparent ferroelectric PLZT ceramics. *Ferroelectrics* **22**, 695 (1978)

Оптическое сверхизлучение в примесных кристаллах и разработка оптимальных режимов их лазерного охлаждения

В. В. Самарцев

Лаборатория нелинейной оптики

Излагаются экспериментальные и теоретические результаты недавних исследований в области оптического сверхизлучения и лазерного охлаждения примесных кристаллов.

Введение

Данная работа посвящена изложению результатов экспериментальных и теоретических исследований явления оптического сверхизлучения (ОСИ) в двух примесных кристаллах: трифториде лантана, легированном ионами трехвалентного празеодима, и дифениле с молекулами пирена. В итоге этих исследований было показано, что явление ОСИ может быть эффективно использовано в работе оптических запоминающих устройств. Наибольшими перспективами в решении задачи обладает режим триггерного ОСИ. В данной работе кратко излагаются результаты первого твердотельного эксперимента по реализации этого режима в кристалле дифенила с пиреном. Построена теория триггерного ОСИ и анализируются его поляризационные свойства.

Режим оптического сверхизлучения является перспективным для использования в процессе лазерного охлаждения примесных кристаллов. Здесь сообщается о результатах теоретических разработок этого режима, которые могут оказаться полезными для лазерного охлаждения носителей информации оптических фазовых процессоров. Кроме того, установлено, что возможна реализация процесса самоохлаждения активных элементов некоторых твердотельных лазеров.

Результаты исследований оптического сверхизлучения в примесных кристаллах

Оптическое сверхизлучение (ОСИ), предсказанное Робертом Дикке [1], является когерентным спонтанным излучением света с интенсивностью, пропорциональной квадрату от числа предварительно инвертированных излучателей (N^2). Важным свойством ОСИ, по сравнению с другими коллективными явлениями типа фотонного эха, является то, что практически вся энергия, запасенная в среде при инверсии, высвечивается в виде задержанного когерентного светового импульса. Оно возникает благодаря самонаведению корреляций между электрическими дипольными момен-

тами оптических переходов атомов, молекул или ионов через общее для них поле излучения, являясь, по существу, саморазвивающимся процессом, когда когерентность возбужденных состояний и связанная с ней волна макроскопической поляризации возникают из первоначально некогерентного состояния. Важными параметрами, характеризующими ОСИ, являются время самонаведения корреляции τ_c (равное $8\pi S T_1 / 3\lambda^2 N$, где T_1 – радиационное время жизни атома, S – активное сечение образца, λ – длина волны света и N – число предварительно инвертированных атомов) и время задержки t_0 (равное $\tau_c \ln N$). Для того, чтобы согласование фаз излучателей, достигнутое в процессе формирования ОСИ, не исчезало за счет разрушающего действия релаксации, необходимо, чтобы время τ_c было короче характеристических времен необратимых релаксаций, а также чтобы инвертирующей среду импульс успел возбудить всю среду до того, как механизм самонаведения корреляций через поле излучения свяжет излучатели в единый сфазированный ансамбль (т.е., чтобы $L/c < \tau_c$, где L – линейные размеры среды, c – фазовая скорость света).

Первый эксперимент по ОСИ был поставлен в газовой среде (HF) в 1973 году группой американских исследователей во главе с М. Фелдом [2]. Затем последовали другие эксперименты по сверхизлучению в газах, описанные в обзоре [3]. Как правило, в качестве исследуемых газов выбирались пары щелочных металлов, обладающие большими значениями электрических дипольных моментов перехода, что, в свою очередь, приводило к улучшению процесса самонаведения корреляций. Немногочисленные эксперименты по ОСИ в конденсированных средах были поставлены лишь на примесных кристаллах. Трудности с постановкой подобных экспериментов связаны с тем, что времена фазовой релаксации в этих кристаллах на два-три порядка короче, чем в газах, а электрические дипольные моменты переходов, как правило, на два порядка меньше. Особенности ОСИ в примесных кристаллах связаны с плотной упаковкой активных центров, с симметрией кристаллической матрицы и сложной энергетической структурой уровней. Первые

такие эксперименты были проведены лишь в начале 80-х годов на O_2^- -центрах в кристалле KCl [4] и на молекулах пирена в кристалле дифенила [5]. В конце 90-х годов были поставлены эксперименты на кристаллах, легированных некрамерсовыми ионами: $LaF_3:Pr^{3+}$ [6] и $YAG:Tm^{3+}$ [7]. И, наконец, недавно был проведен первый твердотельный эксперимент по триггерному оптическому сверхизлучению [8]. В качестве иллюстраций обычного и триггерного ОСИ на рис. 1 и 2 приведем осциллограммы, заимствованные из наших работ [8] и [9].

С позиций научных и практических приложений более перспективен режим триггерного ОСИ, когда в промежутке между инвертирующим импульсом (накачкой) и моментом коллективного высвечивания обычного ОСИ на среду воздействует слабый инжекционный (триггерный) импульс, который создает в среде затравочную макроскопическую поляризацию и вызывает в своем направлении “срыв” фотонной лавины. Такой эксперимент был поставлен на молекулах пирена в матрице дифенила. Схема рабочих уровней и энергетических переходов пирена изображена на рис. 2а. Видно, что обычное сверхизлучение наблюдается на двух энергетических переходах. Инжекционный импульс воздействует на энергетическом переходе 1-2 (0-0-переход) и, как следствие, вызывает испускание триггерного ОСИ на том же переходе. Соответствующие осциллограммы приведены на рис. 2б. Совместные исследования (КФТИ КНЦ РАН, г. Казань и ФТИНТ АН Украины, г. Харьков) оптического сверхизлучения в кристалле дифенила с пиреном были продолжены в условиях, когда этот кристалл находился в резонаторе [10]. Наблюдалось изменение формы сигнала ОСИ и времени его задержки. Развита теория ОСИ в резонаторе в рамках метода неравновесного статистического оператора.

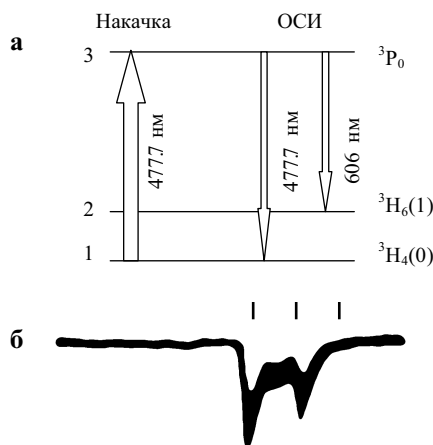


Рис. 1. Схема рабочих уровней иона Pr^{3+} в матрице LaF_3 (а) и осциллограмма детектируемых сигналов (б). Сигнал справа – сигнал оптического сверхизлучения; сигнал слева – инвертирующий импульс. Интервал между метками равен 10 нс [6]. Оптическое сверхизлучение наблюдалось на двух энергетических переходах, указанных на схеме (а).

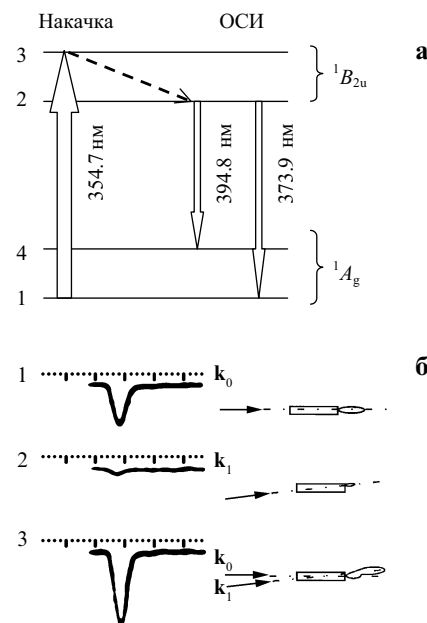


Рис. 2. Схема рабочих уровней молекул пирена в матрице дифенила (а) и осциллограммы наблюдаемых сигналов и пространственное распределение интенсивностей обычного и триггерного ОСИ в кристалле дифенила с пиреном (б). 1 – сигнал обычного ОСИ; 2 – инжекционный импульс; 3 – сигнал триггерного ОСИ на фоне обычного ОСИ [8]. Расстояние между метками 20 нс. Угол между волновыми векторами импульса накачки k_0 и k_1 равен 6° .

Известно [1], что момент времени высвечивания сигнала обычного сверхизлучения (нередко называемого “чистым”) является неуправляемым. Результаты работы [8] (см. также рис. 2) показывают, что частично проблема управления моментом и направлением высвечивания ОСИ может быть решена в режиме триггерного сверхизлучения. Расширение возможностей этого режима достигается в условиях многоимпульсного возбуждения, когда после резонансного воздействия на среду нескольких лазерных импульсов в ней формируются пространственные динамические “решетки” неравновесной населенности и поляризации оптических центров [11]. В результате этой средой могут высвечиваться несколько сигналов ОСИ в различных направлениях, определяемых условиями пространственного синхронизма (УПС). Особо перспективен режим четырехволнового смешения, при котором УПС совпадают с аналогичными условиями для стимулированного фотонного эха (СФЭ). В работе [11] теория ОСИ обобщается на случай многоуровневых сред и анализируется возможность реализации “долгоживущего” ОСИ в кристаллах, легированных некрамерсовыми редкоземельными ионами. Весь комплекс этих экспериментальных и теоретических исследований направлен на включение перспективного явления оптического сверхизлучения в процесс записи-хранения-считывания информации в оптических процессорах [12]. Решение этой задачи существенно облегчается в условиях ис-

пользования в оптической схеме таких процессоров волоконно-оптической головки считывания информации [13].

Результаты теоретических исследований проблемы лазерного охлаждения примесных кристаллов и стекол

Проблема лазерного охлаждения твердых тел является одной из наиболее актуальных и практически значимых в лазерной физике [14–15]. Хорошо известны успехи в лазерном охлаждении газов, подтвержденные присуждением в 1997 году Нобелевской премии С. Чу, К. Кoen-Таннуджи и В. Филлипсу. Достижение таких же успехов в лазерном охлаждении конденсированных сред позволило бы создать миниатюрные лазерные рефрижераторы, функционирующие без использования криогенных жидкостей. К настоящему времени в США поставлено несколько экспериментов по лазерному охлаждению стекол, легированных редкоземельными ионами (см., например, [16–18]). В основе этих экспериментов лежит антистоксов режим излучения поглощенной энергии, когда испускаемый средой квант света больше кванта поглощенного света на величину энергии фонона. Ситуация пояснена на рис. 3а, где приведена упрощенная схема антистоксова режима лазерного охлаждения примесных кристаллов и стекол, где $\hbar\Omega$ – квант фонона, $\hbar\omega$ – квант фотона накачки, $\hbar(\omega + \Omega)$ – квант фотона флуоресценции (или сверхизлучения). Энергия фонона уносится из образца в результате флуоресценции. Первые подобные эксперименты [16, 17] были поставлены на тяжелометаллическом флюоридном стекле

(ZBLANP), легированном ионами трехвалентного иттербия (Yb^{3+}), структура рабочих уровней которого и реализующиеся энергетические переходы пояснены на рис. 3б.

С 1996 года начались наши теоретические разработки проблемы лазерного охлаждения твердых тел на основе метода неравновесного статистического оператора. Результаты этих разработок суммированы нами в книге [14]. В этих работах был сделан существенный шаг в понимании процессов, протекающих в эксперименте [16]. Недавно этот же метод был использован для описания процесса лазерного охлаждения примесных кристаллов с учетом пространственной неоднородности фононных состояний (обязанной, например, неоднородности потока фононов вблизи границ образца) и неоднородности внутренней структуры охлаждаемых примесных кристаллов [19]. Результаты этой работы позволяют сделать вывод о том, что при низких температурах в процессе лазерного охлаждения целесообразно использовать зеемановские (а не штарковские) подуровни.

В отличие от [19], в работе [20] был применен другой математический подход к решению проблемы, основанный на методе исключения полевых переменных и вытекающий из самой сути явления. Часто используемое приближение заданных внешних сил (когда электромагнитное поле можно считать заданной функцией и вместо совокупности описывающих его величин использовать их средние значения) в этом методе приобретает точный характер и позволяет самосогласованным образом учесть влияние поля, явно исключив полевые операторы из уравнений для величин атомной подсистемы. В итоге, в данном подходе вывод уравнений можно выполнять для меньшего числа динамических переменных и вся процедура сводится к вычислению коммутаторов. Этот подход был использован в работе [21] для разработки сверхизлучательного режима лазерного охлаждения, эффективность которого в $N\lambda^2 K n_c$ раз выше уже обсуждавшегося режима лазерного охлаждения (где N – число активных примесных центров, λ – длина волны сверхизлучения, K – число каналов сверхизлучения, n_c – число сверхизлучательных циклов в секунду). Этот режим пояснен на рис. 4. Образец должен находиться в оптическом криостате при температуре жидкого гелия. Зеемановский подуровень 2 (или набор таких подуровней) оказывается заселенным под действием фононов даже при столь низкой температуре. Непрерывная лазерная накачка осуществляет на энергетическом переходе $2 \rightarrow 3$ возбуждение примесных центров. Для создания инверсии населенностей, необходимой для реализации ОСИ, накачку можно промодулировать с частотой фононного перехода $1 \rightarrow 2$, что приведет к появлению в спектре излучения накачки компоненты с частотой перехода $1 \rightarrow 3$. Эта ситуация пояснена на рис. 4а. На рис. 4б для создания необходимой ин-

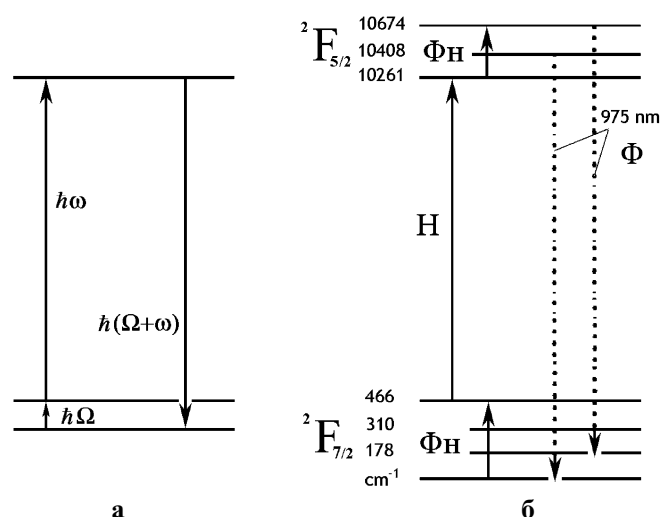


Рис. 3. а Упрощенная схема антистоксова режима лазерного охлаждения. б Структура рабочих энергетических уровней иона Yb^{3+} в стекле ZBLANP и реализующиеся в процессе лазерного охлаждения энергетические переходы [15]. Н – накачка, Ф – флуоресценция, ФН – фонон.

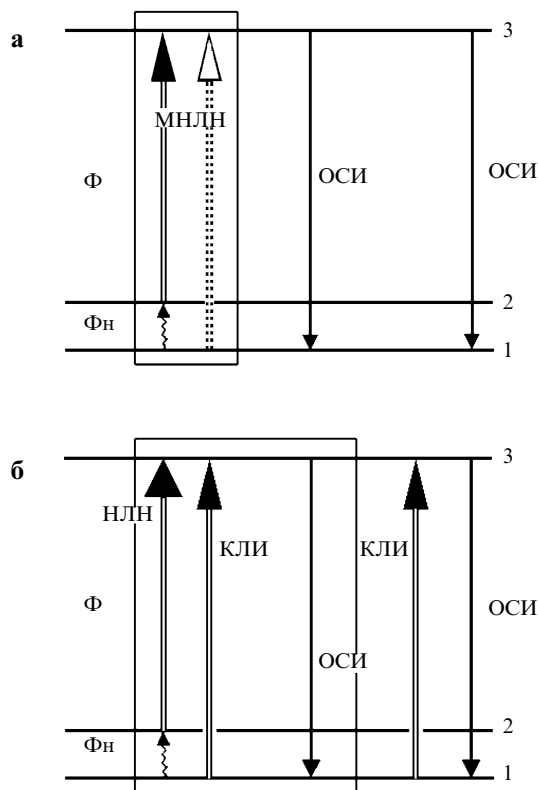


Рис. 4. Сверхизлучательный режим лазерного охлаждения примесных кристаллов и стекол [21]. Обозначения: МНЛН – модулированная непрерывная лазерная накачка, НЛН – непрерывная лазерная накачка, КЛИ – короткий лазерный импульс, ОСИ – оптическое сверхизлучение, Ф – фотон, Фн – фонон; 1, 2, 3 – энергетические уровни.

версии населенностей на примесные центры воздействует короткий лазерный импульс, несущая частота которого резонансна частоте перехода $1 \rightarrow 3$, а длительность короче характеристических времен необратимых релаксаций. При выполнении упоминавшихся ранее неравенств для τ_c примесные центры высвечивают сигнал оптического сверхизлучения, квант энергии которого больше кванта накачки на величину энергии фонона. Затем на переходе $1 \rightarrow 3$ на примесные центры воздействует очередной короткий лазерный импульс, вызывающий высвечивание следующего сигнала сверхизлучения. Подобное короткоимпульсное воздействие должно продолжаться до тех пор, пока из-за понизившейся температуры в образце будут отсутствовать фононы, способные возбудить электроны на уровень 2.

Процесс лазерного охлаждения может быть реализован в активных элементах некоторых твердотельных лазеров. Из-за небольших интенсивностей генерируемого излучения проблема лазерного охлаждения активных элементов этих лазеров пока не была острой, но с ростом интенсивностей накачки и генерации оптимальное решение проблемы их охлаждения, безусловно, окажется важным. Одним из перспективных направлений поиска такого решения

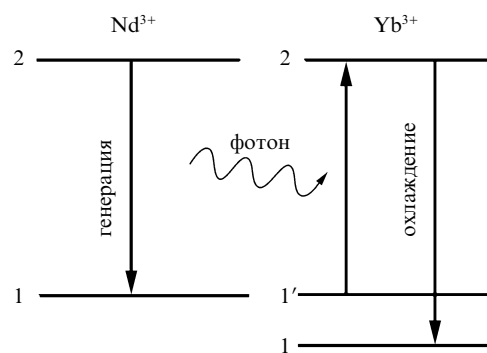


Рис. 5. Совмещение процессов лазерной генерации и лазерного охлаждения в кристалле KY_3F_{10} , легированном ионами Nd^{3+} и Yb^{3+} .

является лазерное охлаждение. Нами было обращено внимание на то обстоятельство, что активные элементы твердотельных лазеров для предотвращения их окрашивания под действием интенсивной накачки дополнительно легируются ионами трехвалентного иттербия. В этом случае оказывается возможным совместить в одном кристалле (например, KY_3F_{10}), легированном ионами Nd^{3+} и Yb^{3+} , сценарии лазерной генерации и лазерного охлаждения. Известно, что в этом кристалле, легированном Nd^{3+} , реализована лазерная генерация на трех длинах волн в области 1000 нм [22]. С другой стороны, именно в этом диапазоне длин волн (≈ 975 нм) на ионах Yb^{3+} в стекле был осуществлен антистоксов режим лазерного охлаждения. Проблема лазерного самоохлаждения была поставлена в работе [23], а попытка ее конкретного теоретического анализа на примере лазера на кристалле KY_3F_{10} с ионами Nd^{3+} и Yb^{3+} была сделана в работе [24] с использованием схемы рабочих энергетических уровней, изображенной на рис. 5.

Заключение

Таким образом, в данной работе представлены обобщающие результаты наших последних экспериментальных и теоретических исследований в области оптического сверхизлучения и лазерного охлаждения примесных кристаллов. Эти результаты опубликованы в работах [8–14, 19–21] и [23, 24], где можно найти детали конкретных исследований.

Автор благодарен своим коллегам и соавторам: В. А. Зуйкову, А. М. Шегаде, А. А. Калачеву, С. В. Петрушкину, А. А. Калинин и Т. Г. Митрофановой (КФТИ КНЦ РАН); С. Н. Андрианову, С. О. Мирумянцу и Л. А. Трофанчук (НПО “ГИПО”); П. В. Зиновьеву и Н. Б. Силаевой (ФТИНТ АН Украины). Эти исследования были поддержаны грантами РФФИ (02-02-16722а), МПНТ РФ, Президиума РАН “Квантовая макрофизика”, грантом CRDF (REC-007).

Литература

1. Dicke R.H.: Coherence in spontaneous radiation process. *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954)
2. Scribanowitz N., Herman I.P., MacGillivray J.C., Feld M.S.: Observation of Dicke superradiance in optically pumped HF gas. *Phys. Rev. Lett.* **30**, 309 (1973)
3. Zinoviev P.V., Samartsev V.V., Silaeva N.B.: Optical superradiance in mixed molecular crystals. *Laser Physics* **1**, 1 (1991)
4. Florian R., Schwan L.O., Schmid D.: Superradiance and high gain mirrorless laser activity of O_2^- -centers in KCl. *Solid State Commun.* **42**, 55 (1982)
5. Зиновьев П.В., Лопина С.В., Набойкин Ю.В., Самарцев В.В., Силаева Н.Б.: Сверхизлучение в кристалле дифенила с пиреном. *ЖЭТФ* **85**, 1945 (1983)
6. Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V., Shegeda A.M.: Optical superradiance in a $LaF_3:Pr^{3+}$ crystal. *Laser Physics* **9**, 951 (1999)
7. Greiner C., Boggs B., Mossberg T.W.: Superradiant emission dynamics of an optically thin material sample in a short-decay-time optical cavity. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3793 (2000)
8. Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V., Silaeva N.B.: Triggered optical superradiance in biphenyl crystals with pyrene molecules. *Laser Physics* **11**, 1307 (2001)
9. Kalachev A.A., Zuikov V.A., Samartsev V.V., Shegeda A.M.: Optical superradiance in Van-Vleck paramagnets. Abstracts of XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals, activated by rare earth and transition metal ions (Kaplyanskii A.A., ed.), p. 57. Kazan: Kazan State University 2001.
10. Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Andrianov S.N., Silaeva N.B., Samartsev V.V.: Optical superradiance in pyrene doped biphenyl crystals in a cavity. *Proceedings SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 310–316. Washington: SPIE 2001.
11. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipulse excitation of optical superradiance in multilevel systems. *Proceedings SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 317–324. Washington: SPIE 2001.
12. Samartsev V.V., Kalachev A.A.: Optical memory based on the long-lived photon echo and optical superradiance in crystals doped by rare-earth ions. Materials of International Conference “Geometrization of physics – V” (Bashkov V.I., ed.), p. 100. Kazan: Kazan State University 2001.
13. Andrianov S.N., Samartsev V.V., Shegeda A.M. et.al.: Fiber-optic read-out and write-down head for the devices of information storage and processing. *Proceedings SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 134–140. Washington: SPIE 2001.
14. Андрианов С.Н., Самарцев В.В.: Оптическое сверхизлучение и лазерное охлаждение в твердых телах. Казань: КГУ 1998.
15. Mungan C.E., Gosnell T.R.: Laser cooling of solids (review). *Advances in atomic, molecular and optical physics* **40**, 161 (1999)
16. Epstein R.I., Buchwald M.I., Mungan C.E. et.al.: Observation of laser-induced fluorescent cooling of a solid. *Nature* **377**, 500 (1995)
17. Gosnell T.R.: Laser cooling of a solid by 65 K starting from room temperature. *Optics Letters* **24**, 1042 (1999)
18. Hoyt C.W., Sheik-Bahae M., Epstein R.I. et.al.: Observation of anti-Stokes fluorescence cooling in thulium-doped glass. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3600 (2000)
19. Андрианов С.Н., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение примесных кристаллов. *Квантовая электроника* **31**, 147 (2001)
20. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Метод исключения бозонных операторов в проблеме лазерного охлаждения твердых тел. *Теоретическая и математическая физика* **126**, 164 (2001)
21. Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: On the collective effects application in laser cooling of solids. *Proceedings SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 195–200. Washington: SPIE 2001.
22. Наумов А.К.: Исследование новых фторидных лазерных сред, активированных неодимом. Дисс. на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Казань: КГУ 1998.
23. Andrianov S.N., Samartsev V.V.: Solid-state lasers with internal laser refrigeration effect. *Proceedings SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 208–213. Washington: SPIE 2001.
24. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение активных элементов твердотельных лазеров. Материалы конференции молодых ученых КФТИ КНЦ РАН, с. 44–50. Казань: КФТИ 2002.

Интерференция каналов возбуждения в квантовой оптике

Р. Н. Шахмуратов

Лаборатория нелинейной оптики

Обсуждается явление интерференции когерентных каналов возбуждения квантовых объектов несколькими резонансными полями. Рассмотрено применение этого явления для усиления электромагнитного излучения без инверсии, электромагнитно-индуцированной прозрачности, гигантского “замедления” скорости распространения электромагнитного импульса и записи информации в резонансной среде.

Введение

В последнее время большой интерес привлекают исследования когерентных явлений, индуцированных двумя или несколькими полями (см., например, обзоры [1–5]). В резонансной среде эти поля создают когерентность, осциллирующую на комбинационной частоте. Наведенная когерентность изменяет свойства среды так, что ее отклик на одно из возбуждающих полей (в дальнейшем мы будем называть его пробным полем) приобретает необычные свойства, совершенно отличающиеся от свойств резонансного отклика на одно резонансное поле в отсутствие дополнительного возбуждения. Это происходит благодаря расщеплению и интерференции каналов (путей) перевода атома в возбужденное состояние из основного состояния. Ансамбль атомов с наведенной фазовой когерентностью получил название фазониум (phaseonium) [2]. Среди новых особенностей, которые появляются в режиме нелинейного возбуждения среды, можно отметить следующие явления. Во-первых, может резко упасть поглощение пробного поля даже в случае, когда среда остается в основном состоянии и согласно обычным представлениям она должна взаимодействовать с полем. Этот эффект называется электромагнитно-индуцированной прозрачностью (ЭИП). Во-вторых, зависимость дисперсионной компоненты отклика от частоты возбуждения в “окне прозрачности” имеет аномально большой наклон, что в итоге приводит к значительному изменению групповой скорости пробного импульса. Появление этих особенностей зависит от соотношения между такими параметрами, как скорость распада наведенной когерентности, время жизни возбужденного состояния и частота Раби, индуцированная одним из вспомогательных полей, которое называется накачкой. Для некоторых объектов эти параметры таковы, что групповая скорость импульса света может быть уменьшена до десятков метров в секунду [6]. Интервал частот, в котором возникает электромагнитно-индуцированная прозрачность, (окно прозрачности), может быть намного уже ширины линии резонансного поглощения и

достигать нескольких килогерц. В атомарных парах щелочных металлов ЭИП, возникающая за счет создания когерентности сверхтонких подуровней основного состояния, обладает очень большой чувствительностью к величине внешнего магнитного поля. Поэтому ЭИП может быть использована для создания прецизионных магнетометров [2].

Подавление поглощения атомов (или других резонансных поглотителей), находящихся в основном состоянии, может быть использовано для создания лазеров без инверсии населенности. Для таких атомов нарушается эквивалентность между процессами индуцированного излучения и резонансного поглощения, так как первый процесс идет с положительной интерференцией каналов излучения, а второй – с отрицательной интерференцией каналов возбуждения. Поглощение может оказаться запертым каналом, а испускание – открытым. Поэтому небольшая населенность возбужденного состояния может привести к усилению электромагнитного поля. Такого сорта лазеры были успешно экспериментально опробованы в оптическом диапазоне частот (см., например, [7]). Нами (совместно с Католическим Университетом Лёвена и Свободным Университетом Брюсселя) была предложена модель гамма-лазера без инверсии [8]. Совместное прохождение гамма-квантов и оптической лазерной накачки в среде с небольшой концентрацией возбужденных ядер рассмотрено в нашей работе [9]. В этой схеме лазерное излучение через сверхтонкое взаимодействие приготавливает спины невозбужденных ядер в темном состоянии. Ядра, которые находятся в этом состоянии, не взаимодействуют как с лазерным излучением, так и с резонансными гамма-квантами, имеющими определенный волновой вектор и поляризацию. Поэтому даже небольшая концентрация возбужденных ядер в образце может привести к когерентному усилению гамма-квантов.

Наведенная когерентность может изменить также процессы насыщения. Нами (совместно с Католическим Университетом Лёвена и Национальным исследовательским советом Канады) было показано, что захват населенности в темном состоянии – особым

когерентном состоянии подуровней основного уровня атома – может привести к значительному уширению линии поглощения в условиях насыщения [10].

Уменьшение групповой скорости импульса резонансного пробного поля в присутствии поля накачки, возбуждающей смежный переход, может быть использовано для задержки и накопления квантов в образце. Этот процесс становится возможным, так как длина когерентности квантов может быть уменьшена до размеров меньших размера образца. Тогда сразу несколько квантов могут быть накоплены в протяженном образце за счет уменьшения их длины и скорости распространения. Быстрое выключение поля накачки приводит к восстановлению прежней скорости цугов излучения, что может привести к группировке фотонов в большой цуг со значительной интенсивностью [11]. Нами также были исследованы возможности записи информации о форме и длительности пробного импульса в когерентности, индуцированной на смежном переходе совместным действием пробного поля и накачки [12].

В настоящем сообщении предложена простая модель, которая на примере трехуровневого атома демонстрирует основные особенности вышеперечисленных явлений.

Трехуровневый атом в бихроматическом поле

Рассмотрим трехуровневый атом, который возбуждается двумя резонансными полями. Энергетическая диаграмма возбуждения показана на рис. 1. Динамическую часть гамильтониана атома можно записать следующим образом:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^3 \omega_n P_{nn} - B_1 (P_{13} \exp(i\Omega_1 t) + P_{31} \exp(-i\Omega_1 t)) - B_2 (P_{23} \exp(i\Omega_2 t) + P_{32} \exp(-i\Omega_2 t)), \quad (1)$$

где ω_n – энергия n -го состояния атома (для простоты обозначений постоянная Планка положена равной единице), Ω_n – частота поля $\mathbf{E}_n(t) = \mathbf{E}_n \cos \Omega_n t$ ($n = 1, 2$).

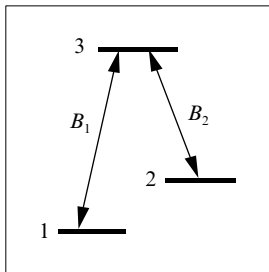


Рис. 1. Энергетическая диаграмма трехуровневого атома с состояниями 1, 2 и 3. Стрелками показаны переходы, возбуждаемые полями B_1 и B_2 .

Константы взаимодействия с этими полями $B_n = (\mathbf{d}_{n3} \mathbf{E}_n)/2$ зависят от матричных элементов индуцированного дипольного момента $\mathbf{d}_{n3} = \mathbf{d}_{3n}$. Операторы P_{mn} определены следующим образом:

$$P_{mn} = |m\rangle\langle n|. \quad (2)$$

Для простоты положим равными константы взаимодействия: $B_1 = B_2 = B$. Тогда, применяя последовательно унитарные преобразования T и S , можно существенно упростить гамильтониан (1):

$$\mathcal{H}_{db} = ST\mathcal{H}T^{-1}S^{-1} = -\sqrt{2}B(P_{b3} + P_{3b}), \quad (3)$$

где

$$T = \exp\left(i \sum_{n=1}^3 \omega_n P_{nn} t\right), \quad (4)$$

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_{d1} + P_{b1} - P_{d2} + P_{b2}) + P_{33}. \quad (5)$$

Этот гамильтониан определен в базисе волновых функций

$$|d\rangle = (|1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{2}, \quad (6)$$

$$|b\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}. \quad (7)$$

Состояние $|d\rangle$ не взаимодействует с полями B_1 и B_2 благодаря деструктивной интерференции каналов возбуждения. Его называют темным состоянием. Состояние $|b\rangle$, напротив, взаимодействует с обоими полями благодаря конструктивной интерференции каналов возбуждения. Это состояние называют светлым состоянием, так как из него атом может перейти в возбужденное состояние 3 и затем спонтанно испустить квант света.

Введение нового базиса $db3$ упрощает гамильтониан трехуровневого атома, взаимодействующего с двумя резонансными полями, и сводит его к гамильтониану двухуровневого атома $b-3$, который взаимодействует с одним эффективным полем (см. гамильтониан (3)). На рис. 2 показана энергетическая диаграмма атома, взаимодействующего с бихроматическим полем, в базисе светлых и темных состояний. В этом

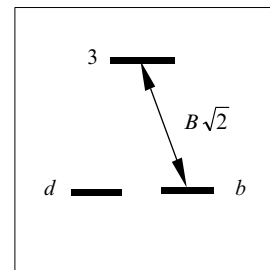


Рис. 2. Та же схема, что и на рис. 1, но в базисе темных и светлых состояний.

базисе эволюцию атома можно очень просто описать с помощью уравнения Блоха для двухуровневой системы b - c ($c = 3$):

$$\dot{w}_{bc} = \chi w_{bc}, \quad (8)$$

$$\dot{v}_{bc} = -\chi v_{bc}, \quad (9)$$

где компоненты вектора Блоха v_{bc} и w_{bc} следующим образом связаны с элементами матрицы плотности в первоначальном базисе:

$$w_{bc} = \rho_{33} - (\rho_{11} + \rho_{22} + u_{12})/2,$$

$$v_{bc} = (v_{13} + v_{23})/\sqrt{2},$$

$$u_{12} = \rho_{12}\exp(-i(\Omega_1 - \Omega_2)t) + \rho_{21}\exp(i(\Omega_1 - \Omega_2)t),$$

$$v_{n3} = -i(\rho_{n3}\exp(-i\Omega_n t) - \rho_{3n}\exp(i\Omega_n t)).$$

Величина $\chi = 2\sqrt{2}B$ является эффективной частотой Раби. Решение уравнения Блоха известны для любых начальных условий. Например, при $\rho_{11}(0) + \rho_{22}(0) = 1$ и $\rho_{33}(0) = \rho_{ij}(0) = 0$ оно имеет вид

$$v_{bc}(t) = -\frac{\sin \chi t}{2}, \quad (10)$$

$$w_{bc}(t) = -\frac{\cos \chi t}{2}. \quad (11)$$

Это решение описывает осцилляции Раби между светлым и возбужденным состояниями. Остальные параметры трехуровневого атома, такие как населенность верхнего и нижних состояний, а также когерентность нижних состояний u_{12} , могут быть найдены простым интегрированием уравнения

$$\dot{u}_{12} = \dot{\rho}_{11} + \dot{\rho}_{22} = -\dot{\rho}_{33} = \frac{\chi}{2} v_{bc}. \quad (12)$$

Так, например, когерентность нижних уровней ведет себя следующим образом:

$$u_{12}(t) = \frac{1}{4}(\cos \chi t - 1). \quad (13)$$

Из этого выражения видно, что даже если в начале ($t = 0$) уровни энергии 1 и 2 были одинаково заселены и когерентность между ними отсутствовала, π -импульс бихроматического поля может создать значительную когерентность $u_{12} = -1/2$. Эта когерентность возникает за счет темной компоненты атома d , которая осталась на нижних подуровнях. Светлая часть переводится π -импульсом в возбужденное состояние 3. До импульсного воздействия обе компоненты, находясь на нижних подуровнях, компенсировали друг друга так, что когерентность в ансамбле атомов отсутствовала.

Наличие релаксационных процессов усложняет описание эволюции трехуровневого атома в бихроматическом поле. Число независимых переменных увеличивается и необходимо решить больше уравнений, чем в отсутствие релаксации. Эти уравнения имеют вид:

$$\dot{v}_{bc} = \chi w_{bc} - \Gamma v_{bc}, \quad (14)$$

$$\dot{w}_{bc} = -\chi v_{bc} + \frac{1}{2}\Gamma_{12}u_{12} - 3A\rho_{33}, \quad (15)$$

$$\dot{u}_{12} = \frac{\chi}{2}v_{bc} - \Gamma_{12}u_{12}, \quad (16)$$

$$\dot{\rho}_{33} = -(\dot{\rho}_{11} + \dot{\rho}_{22}) = -\frac{\chi}{2}v_{bc} - 2A\rho_{33}, \quad (17)$$

где Γ и Γ_{12} – скорости фазовой когерентности n -3 и 1-2, соответственно, A – скорость спонтанного распада из состояния 3 в состояние 1 или 2.

Стационарное решение уравнений (14)–(17) имеет довольно простой вид. Так, например, населенность верхнего состояния 3, ρ_{33} , и когерентность нижних подуровней, u_{12} , удовлетворяют следующим соотношениям

$$(\rho_{33})_{st} = -\frac{\Gamma_{12}}{2A}(u_{12})_{st} = \frac{W}{2A}R, \quad (18)$$

где $W = 4B^2/\Gamma$ и

$$R^{-1} = 2 + 3\frac{W}{2A} + \frac{W}{\Gamma_{12}}. \quad (19)$$

Если одновременно выполняются два условия: $2A \gg \Gamma_{12}$ и $W \gg \Gamma_{12}$, то населенность верхнего состояния становится малой величиной порядка $\Gamma_{12}/2A$, а когерентность нижних подуровней приобретает максимальное значение: $(u_{12})_{st} \approx 1$. Таким образом, атом оказывается почти полностью захваченным в темном состоянии d , которому соответствует большая когерентность нижних подуровней, и только малая его часть возбуждается в состояние 3.

На рис. 3 показаны процессы релаксации и возбуждения трехуровневого атома в базисе темного и светлого состояний. Эта схема помогает качественному пониманию захвата населенности в темном состоянии. До возбуждения атома населенность темного и светлого состояний одинакова, так как предполагается, что уровни 1 и 2 термализованы и некогерентны. Бихроматическое поле вызывает переходы из светлого состояния b в состояние 3. Возбуждение происходит со скоростью W . Из состояния 3 атом может попасть в темное или светлое состояние благодаря спонтанному распаду. Скорость распада определяется величиной A . Спонтанный распад происходит с излучением одного из квантов, частота которого соответствует переходу 3-1 или 3-2. Поэтому спонтан-

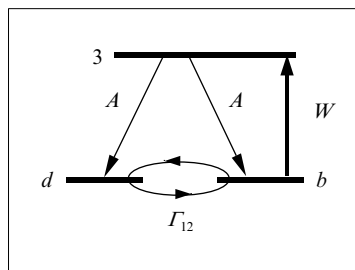


Рис. 3. Процессы возбуждения и релаксации атома в базисе темного и светлого состояний. A – скорость спонтанного распада атома из возбужденного состояния 3. W – скорость возбуждения атома бихроматическим полем из светлого состояния. Γ_{12} – скорость распада когерентности нижних подуровней.

ный переход из состояния 3 в темное состояние разрешен. Проходя несколько циклов возбуждения из светлого состояния в состояние 3 и последующего распада с равной вероятностью в темное или светлое состояния, атом в итоге оказывается в темном состоянии. Этому процессу может помешать некогерентное перемешивание темного и светлого состояний. Скорость перемешивания определяется скоростью фазовой релаксации Γ_{12} состояний 1 и 2. Если возбуждение атома из b в 3 и спонтанный распад из 3 в b и d происходят быстрее, чем распад когерентности нижних подуровней 1 и 2, то атом захватывается в темном состоянии.

Обсуждение

В предыдущем разделе было показано, что при выполнении некоторых условий трехуровневый атом может быть захвачен в темном состоянии. Другими словами, это означает, что первоначально термализованным нижним подуровням можно передать гигантскую поляризацию в когерентном состоянии. Такой захват населенности может быть использован для генерации без инверсии. На рис. 4 показана схе-

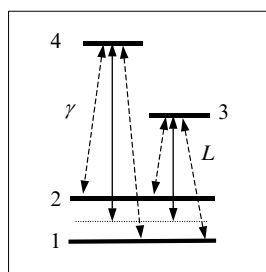


Рис. 4. Энергетическая схема взаимодействия ядра с резонансными гамма-квантами (переходы 1-4, 2-4) и сопутствующего оптического возбуждения электронной оболочки (переходы 1-3, 2-3). Переходы показаны пунктирными стрелками (пояснения см. в тексте). Частоты пробного гамма-поля (γ) и оптической накачки (L) показаны сплошными стрелками. Горизонтальная пунктирная линия находится ровно посередине между уровнями 1 и 2.

ма захвата населенности, которую мы предлагаем для гамма-лазера [8, 9]. Уровни 1 и 2 – выделенная пара спиновых подуровней ядра в основном состоянии. Уровень 4 – возбужденное состояние ядра со спиновой проекцией, которая связана гамма-переходом в нижнее состояние правилом отбора $\Delta M = -1$. Этот переход осуществляется сразу в два состояния, 1 и 2, поскольку мы рассматриваем случай пересечения и смешивания (антипересечения) двух спиновых подуровней ядра в основном состоянии. Антипересечение происходит благодаря конкуренции эффекта Зеемана с квадрупольным расщеплением в кристаллическом поле образца аксиальной симметрии [8]. Расщепление перехода, изображенное на рис. 4 пунктирными стрелками, необходимо для интерференции каналов возбуждения с участием когерентности 1-2. Последняя создается с помощью оптической накачки на переходах 1-3 и 2-3, показанных пунктирными стрелками на рис. 4. Оптическая накачка состояний электронной оболочки поляризует спин ядра благодаря сверхтонкому взаимодействию. Предполагается, что сверхтонкое взаимодействие (СТВ) возбужденной электронной оболочки отличается от СТВ электрона в основном состоянии так, что выделенная пара ядерных спиновых подуровней не пересекается, когда электрон возбужден. Поэтому оптический переход тоже расщепляется на два канала. Благодаря процессам, описанным в предыдущем разделе, оптическая накачка может привести к захвату ядерного спина в темном состоянии. Если правила отбора для гамма-переходов и оптических переходов, показанных на рис. 4, одинаковы, то это темное состояние будет также темным и для гамма-перехода. Тогда все ядра, находящиеся в основном состоянии 1 и 2, не будут взаимодействовать с резонансными гамма-квантами, имеющими заданную поляризацию и направление распространения. При этом, процесс индуцированного излучения возбужденных ядер под действием тех же гамма-квантов будет разрешен, так как он происходит между возбужденным состоянием 3 и светлым, не заселенным, состоянием b . Таким образом, предложенная нами схема безинверсного усиления позволяет в десятки раз снизить порог генерации гамма-лазера.

В нашей схеме интервал между антипересекающимися уровнями 1 и 2 должен быть достаточно малым, чтобы переходы 1-3 и 2-3 возбуждались одним лазерным полем, а гамма-переходы 1-4 и 2-4 происходили с участием одного гамма-кванта. Это условие выполняется, если ширины линий соответствующих переходов существенно превышают расщепление 2-1. Максимальный эффект захвата населенности и усиления без инверсии достигается в случае, когда частоты пробного (гамма) поля и оптической накачки, показанных сплошными стрелками на рис. 4, отстоят от резонанса с соответствующими переходами на одинаковую по модулю величину.

Отстройка от резонансов показана на рис. 4 горизонтальной пунктирной линией.

Рассмотренная нами схема усиления без инверсии называется двойной Λ -схемой. В этой схеме нет аномалий в дисперсионной части отклика. Поэтому групповые скорости цугов гамма-излучения и оптических импульсов одинаковы или отличаются незначительно. В режиме стационарного прохождения пробного поля и накачки через образец мы нашли оптимальную длину образца, при которой достигается максимальное усиление гамма-излучения.

Захват населенности в темном состоянии с привлечением процессов релаксации, помогающих заселять это состояние, не единственный метод подавления резонансного поглощения. Нами был рассмотрен метод адиабатического следования темного состояния в режиме импульсного возбуждения, который тоже приводит к просветлению резонансной среды [11]. На рис. 5 показан мессбауэровский переход между спиновым подуровнем $+1/2$ основного состояния ядра G и подуровнем $+3/2$ возбужденного состояния ядра E . Этот переход возбуждается резонансным цугом гамма-излучения длительности T . Длительность цуга задана временем жизни возбужденного состояния источника гамма излучения. Если приложить радиочастотное поле, вызывающее резонансные переходы между спиновыми подуровнями $+3/2$ и $+1/2$ возбужденного состояния ядра E , то при определенных

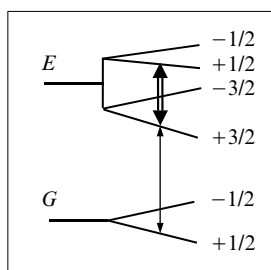


Рис. 5. Энергетическая диаграмма возбуждения ядра резонансным гамма-квантом и радиочастотным полем. В основном состоянии G ядро имеет спин $1/2$, а в возбужденном состоянии E – спин $3/2$.

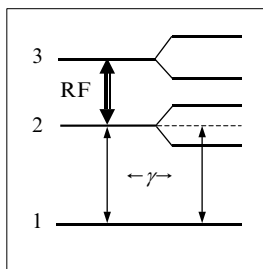


Рис. 6. Та же схема, что и на рис. 5, но уровни, которые не участвуют в импульсном возбуждении, не изображены. Справа показано квазиэнергетическое расщепление уровней 3 и 2, которое соответствует расщеплению Зеемана во вращающейся системе координат.

условиях резонансное поглощение гамма-квантов существенно уменьшается и образец становится прозрачным. На рис. 6 показана упрощенная энергетическая диаграмма возбуждения ядра, на которой оставлены только те уровни, которые взаимодействуют с резонансными полями. Радиочастотное поле перемешивает уровни 2 и 3, которые в результате расщепляются на квартет. В оптическом диапазоне частот (когда перемешивание уровней происходит благодаря резонансному свету) такое изменение спектра называется штарковским расщеплением в переменном поле. В нашем случае более удачным названием является зеемановское расщепление во вращающейся системе координат. Если это расщепление превышает ширину резонансной линии 1-2, то поглощение гамма-кванта уменьшается. Линия 1-2 расщепляется на две компоненты с интервалом между ними, равным частоте Раби, индуцированной радиочастотным полем. Дисперсионная часть отклика состоит из двух близко лежащих дисперсионных линий с аномальным поведением в окне прозрачности. Нами было показано, что групповая скорость гамма-цуга уменьшается и становится равной

$$V = c \frac{(B_{RF}T)^2}{\alpha c T}, \quad (20)$$

где c – фазовая скорость света, α – показатель поглощения Бугера-Ламберта-Бэра для данной среды на выбранной частоте, B_{RF} – частота осцилляций Раби, индуцированных радиочастотным полем. Для “оптически плотной” резонансной среды эта скорость может быть на 3-4 порядка меньшей скорости света в вакууме.

Заключение

За отчетный период (2001 год) получены следующие результаты.

1. Предложена и теоретически исследована схема оптической накачки электронно-ядерной системы для создания условий усиления гамма-излучения без инверсии населенности на гамма-переходе. Показано, что эта схема позволяет понизить порог генерации гамма-лазера в десятки раз.

2. Рассмотрена задача совместного прохождения оптической накачки и гамма-излучения через протяженную среду. Найдена оптимальная длина образца, на которой достигается максимальное усиление гамма-излучения без инверсии населенности.

3. Найдены условия просветления резонансной среды для гамма-квантов при резонансном воздействии радиочастотного поля на спин возбужденного ядра. Показано, что групповая скорость гамма-цугов в окне прозрачности уменьшается на три-четыре порядка. Это может быть использовано для захвата и

хранения поля в среде. Быстрое выключение радиочастотного поля приводит к высвобождению гамма-цугов и их группировки в один цуг большой интенсивности.

4. Исследованы возможности записи и считывания информации в резонансной среде с помощью рамановского возбуждения когерентности на подуровнях основного состояния резонансных атомов. Рассмотрены оптические переходы с большой спектральной неоднородностью, возбуждаемые двумя полями – пробным полем и накачкой. Показано, что считывающее поле (накачка) может возбудить в среде отклик на частоте пробного поля благодаря наличию когерентности подуровней. Эта когерентность создается в режиме записи совместным действием пробного поля и накачки. Показано, что с ростом амплитуды поля накачки в режиме чтения поле отклика истощается и стремится со временем к нулю.

Полученные результаты опубликованы в работах [8–12], из них [9–12] выполнены в 2001 году. Автор выражает благодарность своим соавторам: Джосу Одюрсу и Роману Куссменту (Католический Университет Лёвена, Бельгия), Полю Манделю и Григорию Козыреву (Свободный Университет Брюсселя, Бельгия) и Алексу Сабо (Национальный Исследовательский Совет Канады, Оттава, Канада). Работа получила частичную поддержку Федерального Министерства Науки, Техники и Культуры Бельгии.

Литература

1. Kocharovskaya O.: Amplification and lasing without inversion. *Physics Reports* **219**, 175 (1992)
2. Scally M.O.: From lasers and masers to phaseonium and phasers. *Physics Reports* **219**, 191 (1992)
3. Arimondo E.: Coherent population trapping in laser spectroscopy, in: *Progress in Optics*, vol. XXXV (Wolf E., ed.), pp. 257–354. Amsterdam-London: North-Holland Publishing Company 1996.
4. Harris S.: Electromagnetically induced transparency. *Physics Today* **50**, no. 7, 36 (1997)
5. Scully M.O., Zubairy M.S.: *Quantum Optics*. UK: Cambridge University Press 1997.
6. Liu C., Dutton Z., Behroozi C.H., Hau L.V.: Observation of coherent optical information storage in an atomic medium using halted light pulses. *Nature* **409**, 491 (2001)
7. Peters C., Lange W.: Laser action below threshold inversion due to coherent population trapping. *Appl. Phys. B* **62**, 221–225 (1996)
8. Shakhmuratov R.N., Kozyreff G., Coussement R., Odeurs J., Mandel P.: Gain without inversion for gamma radiation. *Optics Commun.* **179**, 525–536 (2000)
9. Kozyreff G., Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Coussement R., Mandel P.: Inversionless amplification and propagation in electronuclear level-mixing scheme. *Phys. Rev. A* **64**, 013810 (7) (2001)
10. Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Coussement R., Szabo A.: Low-frequency coherence excitation in the ground state manifold and saturation of the quasi-two-level atom by a resonant field. *Laser Physics* **11**, 50–53 (2001)
11. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Electromagnetically induced transparency for gamma-quanta using RF field. *Hyperfine Interact.* **135**, 215–221 (2001)
12. Шахмуратов Р.Н.: Запись и считывание информации с помощью рамановского возбуждения когерентности. *Изв. РАН, Серия Физическая* **66**, 341–344 (2002)

Оптическая фазовая память на основе некогерентного фотонного эха и свободной фотонной индукции

В. А. Зуйков

Лаборатория нелинейной оптики

Экспериментально обнаружены сигналы некогерентного фотонного эха в кристалле рубина и световой индукции в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$. Обсуждаются возможности использования этих явлений в системах оптической памяти.

Введение

Современное развитие вычислительной техники, основанной на использовании магнитных носителей, приближается к пределу скорости и плотности записи информации. В связи с этим, в настоящее время существенно возрос интерес к проблеме создания запоминающих устройств на принципиально иных носителях информации. К таким устройствам относятся квантовые компьютеры и системы на основе фотонного эха. Начало разработки последних положено Хартманом с сотрудниками [1], а последующие этапы отражены в патентах [2–4]. Существенные успехи в области оптических эхо-процессоров достигнуты японскими [5] и американскими [6] исследователями. В нашей стране много внимания уделяется разработке оптических запоминающих устройств на основе долгоживущего фотонного эха (ДФЭ) [7]. ДФЭ представляет собой оптический отклик резонансной среды на воздействие трех и более возбуждающих импульсов в условиях, когда временной интервал между вторым (объектным) и третьим (считывающим) импульсами существенно больше времени жизни возбужденного оптического уровня. Время хранения информации, определяемое интервалом между записывающим и считывающим импульсами, зависит от свойств резонансной среды и может достигать нескольких часов [8]. В наших экспериментах по исследованию ДФЭ в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ время хранения информации достигает нескольких десятков секунд.

Некогерентное фотонное эхо

При создании оптических запоминающих устройств и эхо-процессоров необходимо использование оптических волоконных систем для ввода и вывода информации, что, в свою очередь, является не простой задачей. Дело в том, что фотонное эхо, по определению, формируется в результате воздействия на резонансную среду двух и более когерентных импульсов.

Однако, в реальных световодах за счет дисперсии происходит нарушение когерентности между импульсами и, строго говоря, импульсы, поступающие на резонансную среду после прохождения световодов, не являются когерентными и возбуждение фотонного эха становится проблематичным.

В настоящей работе приводятся результаты экспериментальных исследований (проведенных совместно с Шегедой А.М.) по возбуждению фотонного эха через оптическое волокно. Блок-схема экспериментальной установки для наблюдения некогерентного эха приведена на рис. 1.

Перестраиваемый лазер на красителе (оксазин 1) с частотой повторения импульсов 10–15 Гц, накачиваемый второй гармоникой лазера $\text{YAG}:\text{Nd}^{3+}$, использовался для возбуждения фотонного эха в рубине. Образец рубина с концентрацией ионов Cr^{3+} 0.1% находился в гелиевом криостате при температуре 2 К.

Лазерный импульс длительностью 8 нс делился полупрозрачным зеркалом на два луча, первый из которых проходил через оптическое волокно 50/125 мкм и длиной три метра. Второй луч направлялся на обычную оптическую линию задержки 32 нс. Ввод излучения в оптическое волокно осуществлялся микрообъективом. Волокно было закреплено на трехкоординатном устройстве позиционирования, обеспечивавшем возможность перемещения волокна с точностью 5 мкм.

Было обнаружено, что сигнал светового эха (рис. 2), наблюдавшийся с помощью этой установки, являлся весьма критичным к условиям ввода оптического излучения в волокно. Фотонное эхо не наблюдалось, когда ввод излучения в волокно был оптимальным в коаксиальных условиях и мощность, прошедшая через волокно, была максимальной. Но когда исходное излучение падает на торец волокна под некоторым углом, сигнал фотонного эха возникает. Этот эффект может быть объяснен уменьшением числа мод, возбужденных в волокне, и улучшением качества выходящего из волокна излучения при неаксиальном

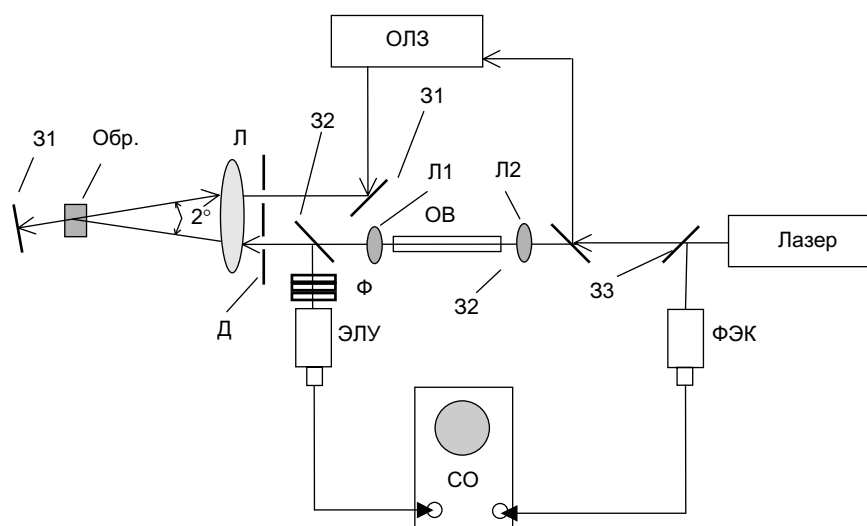


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки. 31 – зеркало с коэффициентом отражения $R \sim 100\%$; 32 – зеркало с $R \sim 40\%$; 33 – стеклянная пластина; Ф – набор нейтральных светофильтров; Л – линза с фокусным расстоянием $F = 50$ см; Л1, Л2 – короткофокусные линзы; ОВ – оптическое волокно; Д – диафрагма; ОЛЗ – оптическая линия задержки; СО – стробоскопический осциллограф; Обр. – образец; ЭЛУ – скоростной фотоумножитель ЭЛУ-ФТ; ФЭК – коаксиальный фотоэлемент ФЭК-15.

вводе. При этом увеличивается идентичность импульсов, прошедших через волокно и через зеркальную линию задержки.

Дело в том, что используемые импульсы состояли из нескольких тысяч цугов когерентности длительностью порядка 10^{-11} с каждый. При прохождении через волокно каждый цуг излучения разбивался во времени на эшелон импульсов из-за многомодовости волокна. Это дает некогерентное сложение эхо-сигналов в каждый момент времени при возникновении эхо-откликов. Кроме того, при прохождении через волокно ухудшается пространственная когерентность излучения. При уменьшении числа мод, возбужденных в волокне, условия конструктивной интерференции при сложении эхо-откликов улучшаются, что способствует уверенному наблюдению сигнала фотонного эха.

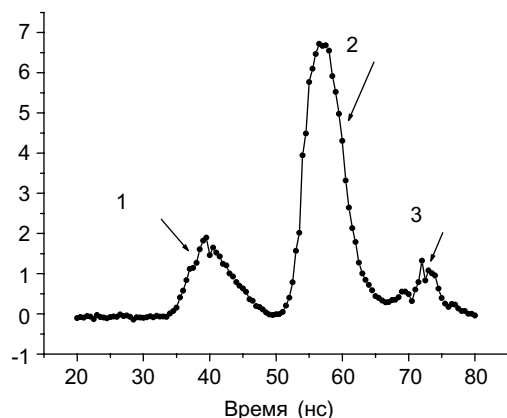


Рис. 2. Осциллограмма импульса (1), прошедшего через волокно, импульса (2), прошедшего через линию задержки, и импульса (3) эхо-сигнала.

Обращенная фотонная индукция

Сигнал свободной фотонной индукции (free induction decay) является когерентным оптическим откликом резонансной среды на воздействие одиночного короткого лазерного импульса. Этот сигнал испускается средой сразу же после воздействия на нее лазерного импульса в направлении его волнового вектора. Непосредственное детектирование сигнала свободной фотонной индукции затруднено, поскольку фотодетектор выходит из строя под действием мощного импульса, а оптические затворы, как правило, не успевают срабатывать. Поэтому первый эксперимент по наблюдению этого сигнала был поставлен с использованием техники штарковского переключения [9]. Однако возможен другой способ возбуждения и детектирования сигнала свободной индукции. Он основан на том, что на резонансную среду одновременно воздействуют импульсы бегущей и стоячей волны [10]. В этом режиме сигнал индукции, получившей название обращенной, испускается средой в направлении, обратном направлению волнового вектора бегущей волны. Поскольку в этом случае сигнал индукции испускается в отсутствии фона возбуждения, отношение “сигнал/шум” возрастает на два порядка.

В данной работе сообщается о первом экспериментальном наблюдении явления обращенной свободной фотонной индукции (ОФИ) в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$. По существу, речь идет о реализации режима четырехволнового смешения при наблюдении этого явления, поскольку импульс стоячей волны можно рассматривать как совокупность двух противоположно распространяющихся импульсов бегущей волны. Ис-

пользование в качестве резонансной среды кристалла $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ имеет важное практическое значение, поскольку этот кристалл является перспективным носителем информации для оптических процессоров. Для функционирования оптических запоминающих устройств и оптических фазовых процессоров важным является процесс аккумуляции и многократного считывания сигналов ОФИ, с использованием в качестве считывающего импульса одного из сигналов, составляющих стоячую волну. Этот режим также анализируется в данной работе.

Экспериментальное наблюдение сигнала обращенной фотонной индукции

Схема возбуждения сигнала ОФИ в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ изображена на рис. 3а. Образец с концентрацией ионов празеодима равной 0.1% помещался в криостат и охлаждался до температуры жидкого гелия $T = 2 \text{ К}$. Возбуждение осуществлялось на переходе $^3\text{P}_0 - ^3\text{H}_4$ ($\lambda = 477.7 \text{ нм}$) в режиме четырехволнового смешения. Излучение лазера делилось на два пучка, один из которых, в направлении волнового вектора $\mathbf{k}_1$, направлялся непосредственно на образец, а второй, отражаясь от зеркала за образцом, формировал стоячую волну. Направление воздействия импульса бегущей волны $\mathbf{k}_1$ составляло угол 6° к оси, образованной импульсом стоячей волны. Сигнал ОФИ согласно условиям пространственного синхронизма ($\mathbf{k}_\text{и} = -\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3$,

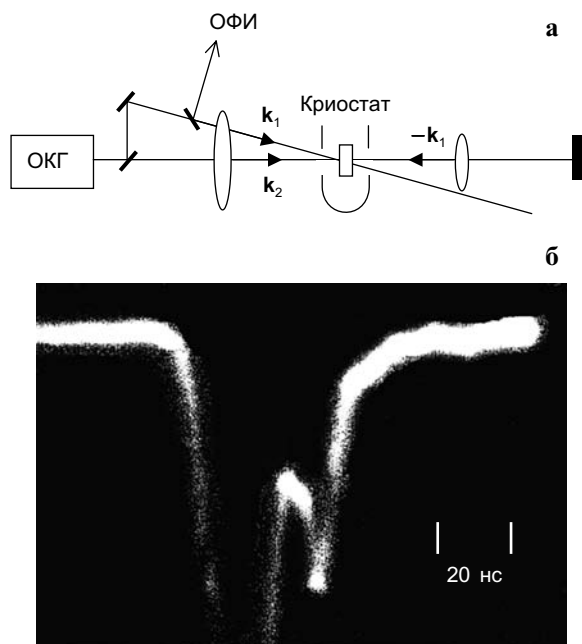


Рис. 3. а Схема возбуждения сигнала обращенной фотонной индукции: $\mathbf{k}_n$ – волновой вектор n -го возбуждающего импульса, О – образец. б Осциллограмма сигнала обращенной фотонной индукции (ОФИ) в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ после возбуждения тремя 10 нс импульсами.

где $\mathbf{k}_2$ и $\mathbf{k}_3$ волновые вектора, образующие стоячую волну) излучался в направлении $-\mathbf{k}_1$ и детектировался фотоприемником с разрешением не хуже 2.3 нс. Использование линии задержки обеспечивало сдвиг импульсов бегущей и стоячей волн относительно друг друга, что позволяло плавно переходить от режима четырехволнового смешения к режиму фотонного эха. Осциллограмма сигнала обращенной фотонной индукции в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ приведена на рис. 3б.

Поскольку в экспериментах использовался кристалл $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$, обладающий долгоживущим сверхтонким подуровнем основного состояния $^3\text{H}_4$, и в нем наблюдалось долгоживущее фотонное эхо, то естественным желанием было наблюдать долгоживущую фотонную индукцию. Чтобы была понятна суть проблемы, обсудим физику формирования сигналов ОФИ. Воздействие трех возбуждающих импульсов можно рассматривать как одновременное действие двух записывающих (с волновыми векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$) и одного считывающего (с волновым вектором $-\mathbf{k}_2$). Записывающая пара, как и в случае стимулированного фотонного эха, создает в резонансной среде решетку населенностей, характеризуемую волновыми векторами $\mathbf{q} = \pm(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$. Тогда сигнал ОФИ можно рассматривать как результат дифракции считывающего импульса на гармонической составляющей решетки населенности $\mathbf{q} = -\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, что и определяет направление его высвечивания $\mathbf{k}_\text{ОФИ} = \mathbf{q} - \mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$. После распада возбужденного оптического уровня информация о воздействии записывающих импульсов остается в среде в виде неравновесной решетки населенности сверхтонких подуровней основного электронного состояния примесных ионов. Время жизни этой решетки определяет время оптической фазовой памяти в среде и может достигать нескольких часов [8]. Для наблюдения долгоживущего сигнала ОФИ использовалась та же схема, что и для обычного ОФИ с тем отличием, что считывающий импульс (в направлении волнового вектора $-\mathbf{k}_2$) задерживался на интервалы времени, кратные 80 мс (время, определяемое частотой следования запускающего $\text{YAG}:\text{Nd}^{3+}$ лазера). К сожалению, из-за сильного рассеивания возбуждающих импульсов, сигнал долгоживущего ОФИ при однократной записи (воздействие одной записывающей пары) не просматривался на фоне последних. Однако он уверенно регистрировался при многократном воздействии записывающих пар. Таким образом, как и в случае аккумуляции фотонного эха [11], происходило накопление информации на долгоживущих подуровнях основного состояния ионов Pr^{3+} . Следует отметить, что если в течении времени жизни решетки населенностей на систему подавать считывающие импульсы, то мы многократно будем воспроизводить сигнал долгоживущего ОФИ. Таким образом, процесс многократного считывания сигнала ОФИ по сути совпадает с процессом многократного считывания сигналов долгоживущего фотонного эха [12], если пос-

леднее возбуждать с нулевым интервалом между записывающими импульсами.

Заключение

В данной работе сообщается о первом наблюдении некогерентного фотонного эха в кристалле рубина и сигналов обращенной фотонной индукции в одном из кристаллов ван-флековских парамагнетиков (LaF_3 : Pr^{3+}). Более детально результаты этих исследований изложены в работах [13–15]. Использование трехвалентного празеодима в качестве рабочего иона является важным для длительного хранения информации, поскольку некрамерсовы ионы (Pr^{3+} , Eu^{3+} , Tb^{3+} , Tm^{3+} , Ho^{3+} , Pm^{3+}) характеризуются сверхтонкой структурой уровней, которые при температуре жидкого гелия имеют времена жизни, достигающие нескольких часов. При увеличении концентрации примесей и длины образца, когда стало выполняться условие $\alpha L > 1$ (где α – коэффициент резонансного поглощения, L – длина образца), в этом кристалле удалось наблюдать оптическое сверхизлучение [16]. Таким образом, изменяя параметры возбуждающих импульсов (длительность и мощность) и интервалы между ними, а также параметры резонансной среды (оптическая плотность), оказывается возможным изучить кинетику взаимоперехода сигналов четырехволнового смешения, обращенной фотонной индукции, обращенного фотонного эха и оптического сверхизлучения.

Благодарности

Данные исследования поддержаны грантами МНТЦ (проект № 737), РФФИ (проекты 01-02-16333а и 02-02-16722а), МПНТ РФ, Президиума РАН “Квантовая макрофизика”. Кроме того, выражаю признательность своим соавторам Самарцеву В.В., Калачеву А.А., Шегеде А.М. и Андрианову С.Н. за помощь в

проведении исследований и интерпретации результатов.

Литература

1. Hartmann S.R., Kurnit N.A., Abella I.D.: Pat. 3638029, USA (Appl. 25.01.72).
2. Mossberg T.W.: Pat. 4459682, USA (Appl. 10.06.84).
3. Friedlander M.A., Meth S.Z.: Pat. 4479199, USA (Appl. 23.10.84).
4. Mossberg T.W., Babbitt W.R., Bai Y.C., Carlson N.W.: Pat. 4670854, USA (Appl. 02.06.87).
5. Mitsunaga M., Yano R., Uesugi N.: Time and frequency-domain hybrid optical memory: 1.6 Kbit data storage in $\text{Eu}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_5$. *Optics Lett.* **16**, 1890 (1991)
6. Kim M.K., Kachru R.: Long-term image storage and phase conjugation by a backward-stimulated echo in $\text{Pr}^{3+}:\text{LaF}_3$. *JOSA* **4**, 305 (1987)
7. Самарцев В.В., Зуйков В.А., Нефедьев Л.А.: Оптическая память на основе долгоживущего фотонного эха. *ЖПС* **59**, 395 (1993)
8. Babbitt W.R., Mossberg T.W.: Time-domain frequency collective optical data storage in a solid state material. *Opt. Commun.* **65**, 185 (1988)
9. Brewer R.G., Shoemaker R.L.: Photon echo and optical induction in molecules. *Phys. Rev. Lett.* **27**, 631 (1971)
10. Зуйков В.А., Самарцев В.В., Туриянский Е.А.: Обращенная световая индукция. *Письма в ЖТФ* **8**, 1250 (1982)
11. Zuikov V.A., Samartsev V.V., Yufin M.A., Stelmah M.F., Yakhsin M.A., Yashin A.N.: Accumulated long-lived photon echo in LaF_3 : Pr^{3+} crystal. *Laser Physics* **1**, 678 (1991)
12. Зуйков В.А., Калачев А.А., Нефедьев Л.А., Самарцев В.В.: Многократное считывание сигналов долгоживущего фотонного эха и ядерная релаксация. *Квантовая электроника* **23**, 273 (1996)
13. Andrianov S.N., Bagautdinov I.R., Lutfullina N.M., Maksimuk V.S., Mirumyants S.O., Samartsev V.V., Shgeda A.M., Trofanchuk L.A., Zalilova N.E., Zuikov V.A.: Fiber-optic read-out and write-down head for the devices of information storage and processing. *Proc. SPIE* **4605**, 134 (2001)
14. Андрианов С.Н., Зуйков В.А., Калачев А.А., Максеев В.С., Мирумянц С.О., Самарцев В.В., Трофанчук Л.А., Шегеда А.М.: Волоконно-оптические системы технического зрения для применения в науке, промышленности, делопроизводстве. *Изв. РАН, сер. физ.* **66**, 369 (2002)
15. Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Phase-conjugate photon induction decay in the regime of four-wave mixing. *Laser Physics* **11**, 361 (2001)
16. Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V., Shgeda A.M.: Optical superradiance in $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ crystal. *Laser Physics* **9**, 951 (1999)

Векторная теорема площадей в кристаллах и поляризационная стабильность солитонов при самоиндуцированной прозрачности

В. Н. Лисин

Лаборатория нелинейной оптики

Теоретически рассмотрено явление самоиндуцированной прозрачности в кристаллах. Учено, что направление вектора дипольного момента перехода оптически возбужденного иона определяется осью локальной симметрии иона, а число различно направленных локальных осей определяется кристаллической симметрией всего кристалла.

Введение

Цель работы состояла в исследовании особенностей явления самоиндуцированной прозрачности (СИП) в кристаллах на примере $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$. МакКол и Хан [1–3] построили теорию СИП для изотропной двухуровневой среды. Они показали, что если падающий световой импульс достаточно мощный, то он проходит через протяженную среду и на выходе из образца мы должны увидеть не один, а несколько задержанных во времени световых импульсов (СИП-солитонов). Существенно, что направления векторов электрического поля всех СИП-солитонов были одинаковы и совпадали с направлением вектора электрического поля (поляризацией) падающего на образец лазерного импульса. Данные авторы считали вектор дипольного момента перехода любого оптически возбуждаемого иона параллельным поляризации падающего лазерного импульса. В отличие от этого, в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ направление вектора дипольного момента перехода иона Pr^{3+} (оптический переход $\Gamma_1-\Gamma_1$) параллельно оси локальной симметрии местоположения иона и не зависит от направления вектора электрического поля лазерного импульса [4]. Следовательно, поляризации световых импульсов на входе и выходе из протяженного кристалла должны отличаться, да и число импульсов на выходе должно зависеть от поляризации падающего импульса. Например, если бы ионы Pr^{3+} занимали в кристалле LaF_3 только один тип мест, то векторы дипольного момента перехода всех ионов Pr^{3+} имели бы одинаковое направление. В отличие от изотропного случая, часть падающего светового импульса с компонентой поляризации, перпендикулярной данному направлению, не поглощалась бы и проходила, не задерживаясь, через протяженный кристалл даже при малой начальной мощности. При увеличении мощности импульса мы дополнительно увидели бы на выходе из кристалла СИП-солитоны, с поляризацией, параллельной данному направлению. Из приведенного примера видно, что учет поляризации

светового импульса существенен для построения теории СИП в кристаллах и теория МакКолла и Хана [1–3] должна быть обобщена.

Локальная симметрия и структура кристалла $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$

Ион Pr^{3+} может замещать ион La^{3+} в шести различных типах мест ($\pm\alpha$, $\pm\beta$, $\pm\gamma$). Локальное окружение каждого из них имеет C_2 симметрию. Эти оси расположены в плоскости, нормальной оптической оси C_3 , и направлены под углом $2\pi/6$ друг к другу (рис. 1).

Вектор дипольного момента перехода иона Pr^{3+} (оптический переход $\Gamma_1-\Gamma_1$) направлен вдоль оси локальной симметрии [4]

$$\mathbf{p}_j = \langle f, \Gamma_1 | -e\mathbf{r} | g, \Gamma_1 \rangle = p\mathbf{e}_j, \quad (1)$$

где $j = 1, \dots, 6$, $\mathbf{e}_j$ – единичный вектор вдоль C_{2j} оси

$$\mathbf{e}_j = \left(\cos\left(j\frac{2\pi}{6}\right), \sin\left(j\frac{2\pi}{6}\right) \right),$$

$$\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_j = 0. \quad (2)$$

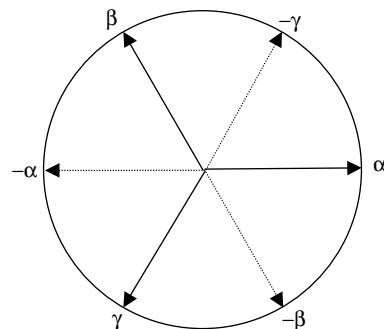


Рис. 1. Направления осей локальной C_2 -симметрии для различных мест иона Pr^{3+} в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$. Оптическая ось C_3 нормальна плоскости рисунка.

Векторная площадь

Определим векторную площадь импульса Θ следующим соотношением:

$$\Theta = \frac{p}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathbf{E}(z, t), \quad (3)$$

где $\mathbf{E}(z, t)$ – векторная амплитуда поля светового импульса, p – абсолютное значение матричного элемента электрического дипольного оптического перехода.

Векторная теорема площадей

Принимая во внимание уравнения (1–3) и используя те же аргументы, что и в работе [3], мы можем записать теорему для векторной площади в следующем виде:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z} = -\alpha \frac{1}{6} \sum_{j=6}^6 \mathbf{e}_j \sin(\Theta \cdot \mathbf{e}_j), \quad (4)$$

где α – коэффициент поглощения.

Карта особых точек векторной площади

Положив равной нулю правую часть уравнения (4), можно найти особые значения векторной площади, при которых $\partial \Theta / \partial z = 0$ для любого значения z . Однако намного легче и наглядней сделать это графически. Можно переписать уравнение (4) как

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \Theta} \frac{\alpha}{6} \sum_{j=6}^6 \cos(\Theta \cdot \mathbf{e}_j), \quad (5)$$

и задача сводится к определению точек двумерной плоскости, в которых функция $\sum \cos(\Theta \cdot \mathbf{e}_j)$ имеет экстремумы. Двухмерность связана с тем, что мы рассматриваем случай, когда лазерный луч распространяется вдоль оптической оси C_3 , т.е., по нормали к C_2 -осям локальной симметрии. Круги и треугольники на рис. 2 представляют контурный график этой функции. Легко находим, что существует три типа особых значений векторной площади, при которых, как предсказывается, векторная площадь сохраняется во время распространения лазерного импульса через образец. Центры кругов на рис. 2 являются устойчивыми узлами, центры треугольников – неустойчивые узлы, середины отрезков, соединяющие центры треугольников – седловые точки. Как видно на рис. 2, особые точки векторной площади образуют двумерную периодическую решетку. Элементарная ячейка решетки определяется симметрией кристалла. Для $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ это правильный шестиугольник. Если интенсивность и поляризация лазерного импульса тако-

вы, что его начальная векторная площадь Θ_{in} попадает внутрь какой-либо элементарной ячейки, то при распространении через кристалл векторная площадь должна изменяться до тех пор, пока она не достигнет центра этой элементарной ячейки. При этом время достижения устойчивого состояния, в отличие от [1–3], зависит не только от интенсивности падающего импульса, но и от его поляризации. Базисные векторы решетки – Θ_+ и Θ_- . Они направлены между кристаллографическими осями. Проекция Θ_+ на оси симметрии $\pm\alpha$ и $\pm\gamma$ равна по модулю 2π . Отметим, что вектор Θ_+ нормален к оси $\pm\beta$. Отсюда следует, что лазерный импульс с векторной площадью Θ_+ возбуждает только четыре $(\pm\alpha, \pm\gamma)$ подгруппы ионов и является для этих ионов 2π -импульсом. Подобно этому, импульс Θ_- возбуждает только $(\pm\alpha, \pm\beta)$ ионы и является для них 2π -импульсом.

Если Θ_{in} падает внутрь элементарной ячейки с центром в точке $m\Theta_+$, то лазерный импульс разбивается на m солитонов Θ_+ , где m – произвольное целое число. Это следует и из численных расчетов, и из метода обратной задачи, и из физических соображений, так как Θ_+ -солитон фактически является 2π -импульсом МакКолла и Хана. Подобно предыдущему случаю импульс с начальной векторной площадью, лежащей в ячейке с центром $n\Theta_-$, разбивается на n Θ_- -солитонов.

Пусть поляризация лазерного импульса направлена вдоль оси α , т.е. $\Theta_{\text{in}} \parallel \Theta_0$, где $\Theta_0 = \Theta_+ + \Theta_-$ (рис. 2). Численные расчеты показывают, что импульс с данной поляризацией и начальной площадью, лежащей в элементарной ячейке $q\Theta_0$, разбивается на q солитонов Θ_0 , где q – произвольное целое число (рис. 3). Как видно на рис. 2, Θ_0 -импульс является 2π -импульсом для $(\pm\gamma, \pm\beta)$ ионов и 4π -импульсом для $\pm\alpha$ ионных подгрупп. К середине импульса $\pm\alpha$ -ионы находятся точно в основном состоянии. Следовательно, поле, излучаемое ими, должно уменьшать поле импульса, что следует из физики СИП МакКолла и Хана. Поэтому, казалось бы, что середина импульса должна выедаться и импульс должен разбиваться на два солитона. Однако этого не происходит из-за того, что $(\pm\gamma, \pm\beta)$ -ионы к середине импульса находятся точно в инвертированном состоянии и результирующее поле, излучаемое ими, компенсирует уменьшение поля за счет $\pm\alpha$ -ионов. В конце Θ_0 -импульса все ионы находятся в основном состоянии, поэтому Θ_0 -импульс устойчив относительно изменения интенсивности. Отсюда понятно разбиение начального импульса на Θ_0 -солитоны. Подчеркнем, что существование Θ_0 -солитона – чисто кристаллический эффект, такой солитон отсутствует в изотропной среде.

Пусть начальная векторная площадь Θ_{in} не параллельна Θ_0 , но лежит внутри элементарной ячейки с центром $q\Theta_0$. Тогда, как видно на рис. 2 и 3, небольшое отклонение поляризации падающего импульса от кристаллографической оси приводит к тому, что каж-

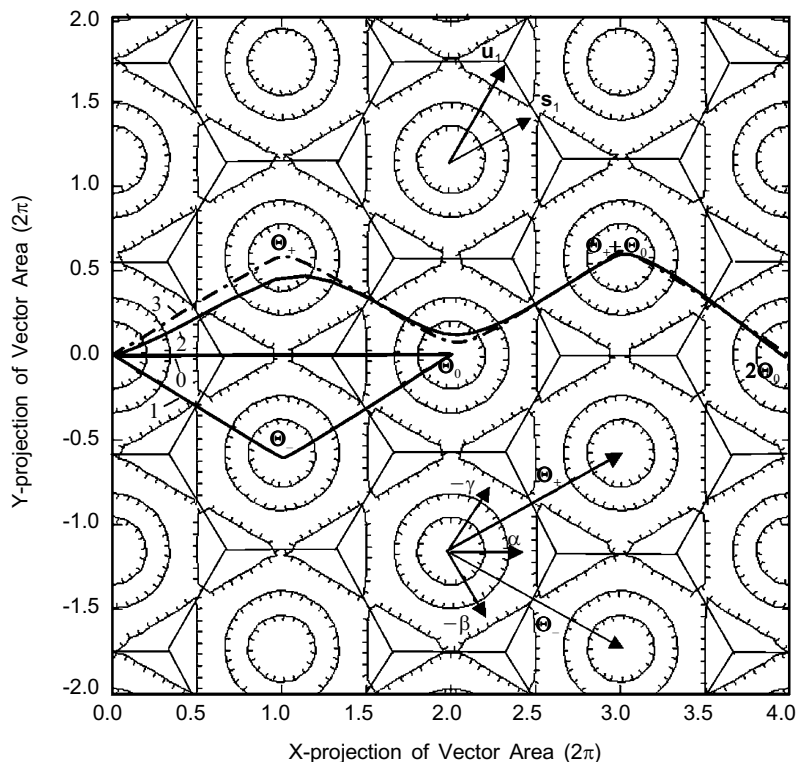


Рис. 2. Карта особых точек векторной площади для $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ [5]. Карта образована теми значениями векторной площади, при которых площадь сохраняется во время распространения лазерного импульса через образец. Центры шестиугольников суть устойчивые узлы, вершины – неустойчивые узлы, середины сторон – седловые точки. Эта карта представляет собой двумерную периодическую решетку. Элементарная ячейка решетки есть правильный шестиугольник. Базисные вектора решетки Θ_+ и Θ_- и единичные векторы вдоль осей локальной симметрии $(+\alpha, -\beta, -\gamma)$ изображены внизу. Векторы s_1 и u_1 , изображенные на верхней части рисунка, показывают одну из седловых и соответственно одну из неустойчивых точек. Показаны также векторные координаты центров некоторых элементарных ячеек. Оптическая ось C_3 перпендикулярна плоскости рисунка и совпадает с направлением распространения импульса. Жирные линии 0 и 1 отображают временную эволюцию лазерного импульса с начальной векторной площадью, равной по модулю $\text{mod}(\Theta_0) = 4\pi$ и направленной к оси α под углом 0 и соответственно -1 градус. В этом случае $\alpha L = 40$, где α – коэффициент поглощения, L – длина образца. Жирная линия 2 есть отображение временной эволюции лазерного импульса, векторная площадь которого на входе в образец по модулю равнялась $\text{mod}(2\Theta_0) = 8\pi$ и была направлена по углом $+1$ градус к оси α и $\alpha L = 40$. Линия 3 описывает тот же случай, что и 2, но $\alpha L = 80$.

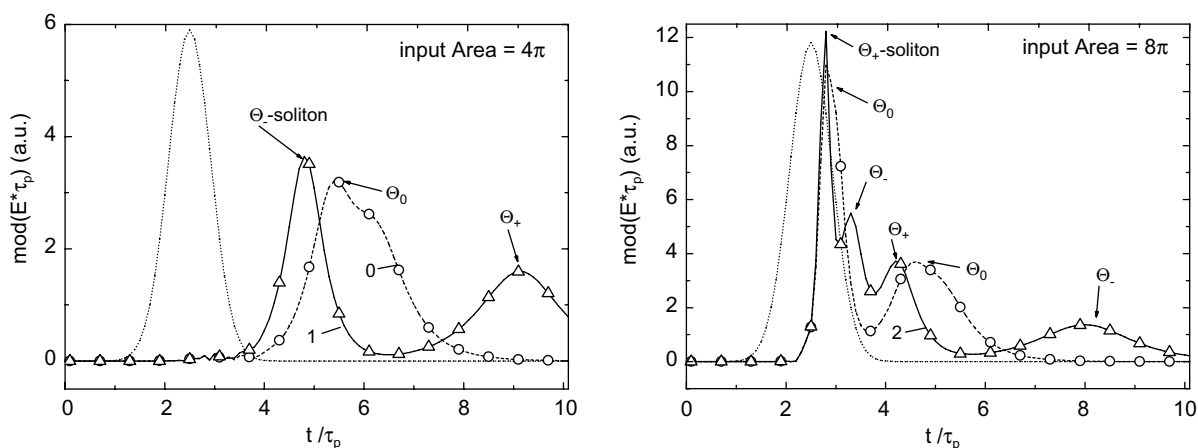


Рис. 3. Временная эволюция амплитуды лазерного импульса на выходе из образца $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ [5]. Результаты численного решения совместной системы приведенных уравнений Максвелла и Блоха, τ_p – длительность лазерного импульса. Значения площадей импульсов на входе в образец, их направления относительно кристаллографической оси α и значения параметра αL для кривых 0, 1 и 2 те же самые, как для кривых 0, 1 и 2 на рис. 2. Значение параметра αL для 0-градусной кривой в правой части рисунка то же самое, как для кривой 2. Точечными линиями изображены импульсы на входе в образец, $\circ$ – импульс на выходе при 0° , Δ – импульс на выходе при $\pm 1^\circ$. Отображение временной эволюции лазерного импульса при его распространении через образец на карту особых точек векторной площади (кривые 1 и 2 на рис. 2) позволяет легко увидеть поляризации и площади СИП-солитонов, изображенных кривыми 1 и 2 данного рисунка.

дый из Θ_0 -солитонов расщепляется на Θ_+ и Θ_- -солитоны. Физически это связано с тем, что к середине импульса результирующее поле, излучаемое $(\pm\gamma, \pm\beta)$ -ионами не полностью компенсируют уменьшения поля за счет $\pm\alpha$ -ионов. Кроме того при этом происходит усиление компоненты поля, перпендикулярной α -оси. Следовательно, число СИП-солитонов и их поляризации сильно зависят от направления вектора Θ_{in} относительно кристаллографической оси.

Этот вывод справедлив и в общем случае, когда начальная векторная площадь лежит внутри элементарной ячейки с центром в точке $\Theta_c = m\Theta_+ + n\Theta_-$, где $m \neq n$. Пусть для определенности $m > n$. Тогда координаты центра ячейки можно записать, как $\Theta_c = (m - n)\Theta_+ + n\Theta_0$. Сначала сформируются $(m - n)$ солитонов Θ_+ . Число, поляризация, порядок следования остальных солитонов и время задержки между ними сильно зависят от направления вектора $\Theta_{in} - (m - n)\Theta_+$ относительно кристаллографической оси.

Заключение

Сформулируем полученные за отчетный период важнейшие результаты.

1. Численное решение совместной системы приведенных уравнений Максвелла и Блоха показало, что свойства СИП-солитонов (число СИП-солитонов, их площади, поляризации, порядок следования и времени задержки между ними) сильно зависят как от мощности, так и поляризации падающего светового импульса.

2. Для объяснения свойств СИП-солитонов было введено понятие векторной площади светового импульса.

3. Выведена теорема для векторной площади.

4. Получена некоторая карта особых точек векторной площади. Эта карта является двумерной периодической решеткой и образована теми значениями векторной площади, при которых площадь сохраняется во время распространения лазерного импульса через образец. Элементарная ячейка решетки определяется симметрией кристалла. Она является правильным шестиугольником в случае $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$, по-

скольку в данном кристалле присутствуют шесть различных типов ионных мест, оси локальной симметрии которых расположены в плоскости, нормальной к оптической оси, и направлены под углом $2\pi/6$ друг к другу.

5. Показано, что отображение временной эволюции лазерного импульса на карту особых точек векторной площади делает прозрачной физику прохождения лазерного импульса через кристалл в режиме СИП. Это дало нам возможность предсказать для кристаллов новый тип солитона (2π - 4π импульс), который не существует в изотропной среде, исследовать СИП в общем случае, когда падающий на образец импульс имеет произвольную мощность и поляризацию. Стабильность числа СИП-солитонов, их площадей, поляризаций, порядка следования и времени формирования СИП-солитонов сильно зависят от координаты векторной площади падающего светового импульса на карте особых точек векторной площади.

Результаты опубликованы в работах [5–7].

Автор выражает благодарность Ильдару Ахмадулину за помощь при освоении Фортрана 90 и Асхату Башарову за полезные замечания. Кроме того, автор благодарит Ляйлю Мосину и Татьяну Митрофанову за редактирование статьи, направленной в редакцию журнала на английском языке.

Исследования были поддержаны грантом МНТЦ 737 и грантом РФФИ 00-02-16510.

Литература

1. McCall S.L., Hahn E.L.: Coherent Light Propagation through an Inhomogeneously Broadened 2-Level System. *Bull. Am. Phys. Soc.* **19**, 1189 (1965)
2. McCall S.L., Hahn E.L.: Self-Induced Transparency by Pulsed Coherent Light. *Phys. Rev. Lett.* **18**, 908 (1967)
3. McCall S.L., Hahn E.L.: Self-Induced Transparency. *Phys. Rev.* **183**, 457 (1969)
4. Лисин В.Н.: Поляризация фотонного эха в $\text{Pr}^{3+}:\text{LaF}_3$. *Письма в ЖЭТФ* **57**, 402 (1993)
5. Lisin V.N.: Vector Area Theorem mapping in crystals and polarization stability of SIT-solitons. *Pis'ma v ZhETF* **74**, 314–317 (2001)
6. Lisin V.N.: Polarization stability of SIT-solitons. *Proceedings SPIE* **4605**, 286–290 (2001)
7. Lisin V.N.: Vector Area Theorem mapping in crystals and polarization stability of SIT-solitons. e-Print arXiv: physics/01110017 (2001)

Исследование динамики зарождения и роста локальной жидкой фазы на поверхности монокристаллического кремния при облучении световыми импульсами с различными длительностями

Я. В. Фаттахов, Т. Н. Львова

Лаборатория методов медицинской физики

Проведены исследования *in situ* особенностей зарождения и роста локальных областей плавления на поверхности монокристаллического кремния при воздействии мощных импульсов некогерентного света. Основное внимание было уделено стадии зарождения локальной жидкой фазы как наиболее важному и интересному моменту изучения механизма эффекта локального анизотропного плавления. Исследования были проведены в широком диапазоне длительностей световых импульсов от 0.26 до 2.10 с. Полученные результаты подтверждают модель эффекта, предложенную ранее авторами.

Взаимодействие мощного оптического излучения с веществом вызывает большой научный и практический интерес. Одним из эффектов, наблюдающихся при облучении полупроводников импульсами когерентного и некогерентного света, является эффект локального анизотропного плавления поверхности. Изучение этого эффекта позволяет, с одной стороны, оптимизировать режимы импульсного светового отжига имплантированных полупроводников, с другой – получить новые данные о физике зародышеобразования, об особенностях структурных и фазовых переходов на поверхности полупроводников в нестационарных условиях.

Эффект локального анизотропного плавления заключается в следующем. При однородном облучении полупроводников мощными импульсами когерентного или некогерентного света с длительностями порядка $2 \cdot 10^{-4} \div 10$ с на поверхности образца образуются локальные области плавления (ЛОП), разделенные участками нерасплавившегося материала. Форма ЛОП на поверхности монокристаллического кремния однозначно связана с кристаллографической ориентацией образца (рис. 1).

Основные закономерности эффекта не зависят от типа источника излучения: лазеры или некогерентные источники света.

В настоящее время предложено несколько физических моделей эффекта. Вопрос о природе центров зарождения жидкой фазы остается также дискуссионным: гомогенное или гетерогенное зародышеобразование.

Поэтому целью данной работы было получение зависимости *in situ* плотности и размеров ЛОП от времени непосредственно в процессе действия светового импульса. По нашему мнению, именно эксперименты *in situ* в сочетании с теоретическими расчетами позволят ответить на дискуссионные вопросы. Нам известна только одна работа [5], где этот

эффект исследовался в динамике. Но в ней теоретически и экспериментально изучалась лишь динамика образования специфического профиля видимой части ЛОП.

В данной работе для более детального изучения механизма эффекта локального анизотропного плавления проведена скоростная микросъемка зарождения и роста ЛОП непосредственно в процессе облучения световыми импульсами с различными длительностями: 0.26, 0.52, 0.92, 1.36 и 2.10 с, при соответствующих значениях плотности мощности излучения (рис. 2).

Обнаружено, что для всех использованных длительностей импульса зависимости плотности (количества на единицу площади) и средних размеров ЛОП имеют одинаковый характер. На рис. 3 в качестве иллюстрации приведены зависимости *in situ* плотности локальных областей плавления и их средних размеров от времени в течение светового импульса длительностью 0.26 и 0.52 с.

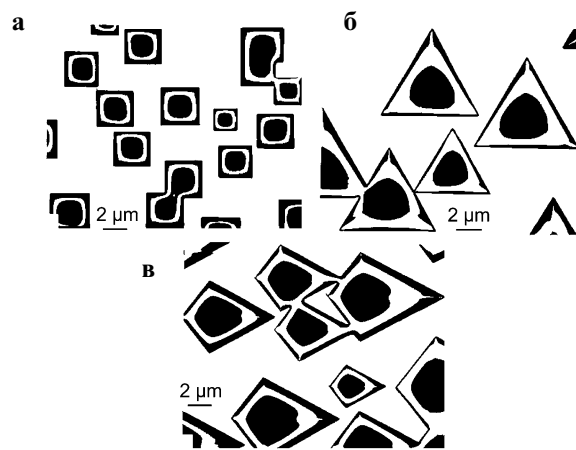


Рис. 1. Микрофотографии поверхности монокристаллического кремния ориентации: а (100), б (111), в (130), подвергнутого импульсному световому облучению в режиме локального плавления.

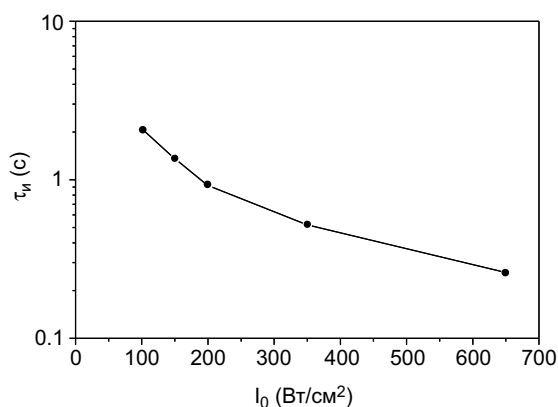


Рис. 2. Зависимость длительности импульса τ_n от плотности мощности I_0 при импульсном световом облучении.

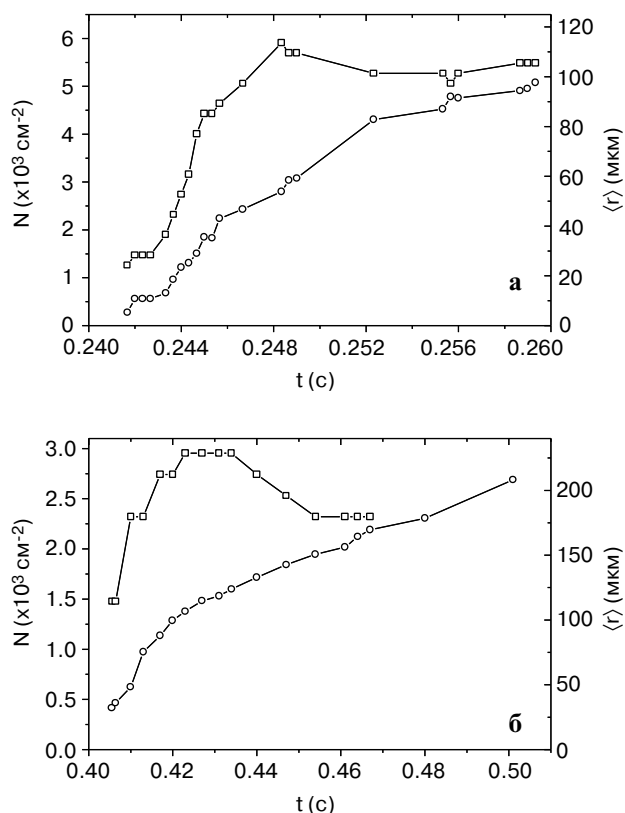


Рис. 3. Зависимость in-situ плотности N (□) и средних размеров $\langle r \rangle$ (○) локальных областей плавления от времени в течение светового импульса с длительностью **а** 0.26 с и **б** 0.52 с.

Установлено, что для каждой длительности светового импульса увеличение плотности ЛОП от нуля (в момент зарождения) до максимальной величины происходит в течение очень узкого интервала времени, например, для $\tau_n = 0.26$ с это 0.004 с, а для $\tau_n = 2.10$ с это 0.084 с (см. таблицу 1).

В пределах этого же интервала времени происходит и заметный рост средних размеров ЛОП (рис. 3). Для всех длительностей импульса наблюдаются три

стадии динамики плотности ЛОП: быстрый рост от 0 (в момент зарождения), выход на плато с характерной максимальной величиной N , уменьшение N вследствие коалесценции соседних ЛОП.

Эти результаты хорошо согласуются с предложенной нами ранее моделью эффекта локального анизотропного плавления, основанной на предположении о формировании перегрева полупроводника в твердой фазе относительно равновесной температуры плавления в процессе облучения световым импульсом [2–4].

Как было установлено нами ранее, плотность ЛОП зависит от величины перегрева [3]. Причем, чем больше величина перегрева, тем большее число дефектов проявляют себя центрами зарождения локальной жидкой фазы. Величина перегрева зависит от длительности светового импульса и может достигать величины порядка 10^3 К в пико- и наносекундном диапазоне длительностей [8]. Чем большая плотность мощности излучения используется для быстрого нагрева полупроводника, тем большей оказывается величина перегрева и тем раньше появляются первые зародыши ЛОП [3].

В пользу модели перегрева говорит и тот факт, что присутствие рядом расположенной ЛОП приводит к замедлению роста соседней ЛОП, как только начинают перекрываться их тепловые “радиусы влияния”.

Энергия перегрева расходуется на преодоление барьера зародышеобразования, т.е. на создание зародыша с размером выше критического. Существование барьера может быть обусловлено следующими причинами. Во-первых, это могут быть напряжения на границе раздела монокристаллический кремний-природный окисел [2]. Во-вторых, этот барьер может быть обусловлен неполным смачиванием кремния собственным расплавом [7, 8]. Вторая причина, по-видимому, является основной.

С учетом результатов этих исследований модель можно представить следующим образом [8]. При импульсном световом облучении поверхности полупроводника передается большое количество тепла. Из-за нестационарности процесса тепло не успевает перераспределиться. В результате этого в начальный момент создается кратковременное метастабильное состояние, в котором вся поверхность полупроводника оказывается перегретой в твердой фазе относительно своей равновесной температуры плавления. В дальнейшем процессе плавления можно выделить два этапа: время образования зародыша и период его роста в размерах за счет поглощения тепла из окружающих перегретых областей.

По данным [8] зародыши образуются в результате флуктуационных процессов в однородном бездефектном полупроводнике, т.е. являются гомогенными. Но результаты настоящей работы, наши более ранние результаты [3] и данные ряда авторов [2, 6] свидетельствуют, что преимущественными центрами образова-

Таблица 1. Значения параметров образования ЛОП для различных длительностей светового импульса τ_n .

Параметр	τ_n (с)				
	0.26	0.52	0.92	1.36	2.10
Время появления первых ЛОП (с)	0.242	0.415	0.796	1.0018	1.328
Длительность стадии быстрого роста ЛОП (с)	0.004	0.012	—	—	0.084
Максимальное значение плотности ЛОП N (см ⁻²)	5500	3200	633	830	1300
Средняя скорость роста размеров ЛОП в течение импульса (мкм/с)	3080	2170	1650	1140	490

ния зародышей жидкой фазы являются дефекты, присутствующие на поверхности и в приповерхностном слое полупроводника еще до момента воздействия светового импульса. Вероятность гомогенного зародышеобразования будет возрастать по мере повышения качества обработки поверхности промышленных полупроводниковых пластин.

На втором этапе образовавшиеся зародыши растут в размерах, в основном, за счет поглощения тепла окружающих областей. Они развиваются независимо, пока их поверхностная плотность $N \leq 1/L_T^2$, где L_T — длина диффузии тепла. При достижении плотности $N \cong 1/L_T^2$ тепловые поля отдельных центров перекрываются и новые ЛОП не образуются. Температура всей поверхности полупроводника снижается до равновесной температуры плавления. Количество продолжающего поступать в течение светового импульса тепла становится равным количеству тепла, излучаемому пластиной, а также поглощаемому локальными областями плавления из окружающих перегретых областей. Поверхность полупроводника не может больше достичь перегрева. Новые ЛОП не образуются. Некоторый рост размеров ЛОП обусловлен теперь поступлением тепла светового импульса.

Таким образом, результаты наших исследований *in situ* подтверждают модель перегрева, предложенную ранее [2–4].

Вместе с тем, необходимо отметить, что сам световой импульс также создает в дополнение к имеющимся новые центры образования жидкой фазы. Такими дефектами являются дислокации, образующиеся в результате возникновения механических напряжений в образце, обусловленных импульсным характером облучения. Такой характер формирования ЛОП является, возможно, доминирующим при использовании образцов небольшого размера или лазеров с размером пятна излучения, сравнимым с диффузионной длиной тепла для данной длительности импульса.

В настоящее время мы планируем провести теоретические расчеты по различным моделям зародышеобразования.

Необходимо отметить и возможные практические применения данной работы. Разработанные нами методики позволяют оценивать дефектность исходных пластин монокристаллического кремния, а так-

же образцов после различных технологических обработок. Методика исследования *in situ* динамики рекристаллизации ионно-легированных слоев позволяет реализовать систему с “обратной связью”, т.е. выключать световой импульс по достижении исследуемым параметром необходимой величины. Это является очень важным достоинством импульсного отжига при его применении в технологии микроэлектроники.

Выводы

1. Проведена скоростная микросъемка зарождения и роста ЛОП непосредственно в процессе облучения световыми импульсами с различными длительностями: 0.26, 0.52, 0.92, 1.36 и 2.10 с.

2. На основе анализа экспериментальных данных получены *in situ* зависимости плотности (количества на единицу площади) и средних размеров ЛОП от времени в течение светового импульса. Обнаружено, что для всех использованных длительностей импульса зависимости плотности и средних размеров ЛОП имеют одинаковый характер, т.е. наблюдаются три стадии динамики плотности ЛОП: быстрый рост от 0 (в момент зарождения), выход на плато с характерной максимальной величиной N , уменьшение N вследствие коалесценции ЛОП.

3. Полученные результаты подтверждают предложенную ранее модель эффекта локального анизотропного плавления, основанную на предположении о формировании перегрева полупроводника в твердой фазе относительно равновесной температуры плавления в процессе облучения световым импульсом.

Работа выполнена совместно с Хайбуллиным И.Б., Галяутдиновым М.Ф., Захаровым М.В.

Литература

1. Celler G.K., Robinson Mc.D., Trimble L.E., Lishner D.J.: Spatial melt instabilities in radiatively melted crystalline silicon. *Appl. Phys. Lett.* **43**, 868 (1983)
2. Heinig K.-H.: Effects of local melting on semiconductor surfaces. *Energy Pulse Modification of Semiconductors and Related Materials*. Dresden: Zentralinstitut für Kernforschung 1985.
3. Фаттахов Я.В., Баязитов Р.М., Хайбуллин И.Б., Львова Т.Н., Еремин Е.А.: Плавление полупроводников при быстром одно-

- родном нагреве оптическим излучением. Изв. АН, сер. физ. **59**, 136 (1995)
4. Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Хайбуллин И.Б.: О механизме формирования локального расплава на поверхности монокристаллических полупроводников при мощном световом облучении. Квантовая электроника **30**, 597 (2000)
 5. Moeglin J.P., Gautier B., Lacroix F., Joeckle R.: Proceedings of International Conference "Lasers'97" (Corcoran V.J., Goldman T.A., eds.), p. 435. New Orleans: STS Press 1998.
 6. Usenko A.Y.: Localized melting induced by rapid annealing correlated with the space distribution of A type microdefects in silicon Czochralski-grown wafers. J. Materials Science: Materials in Electronics **4**, 89 (1993)
 7. Найдич Ю.В., Перевертайло В.М., Григоренко Н.Ф.: Капиллярные явления в процессах роста и плавления кристаллов. Киев: Наукова Думка 1983.
 8. Карпов С.Ю., Ковальчук Ю.В., Погорельский Ю.В.: Плавление полупроводников под действием импульсного лазерного излучения. ФТП **20**, 1945 (1986)

Квантовохимическое изучение электронной структуры молекул и молекулярных кластеров в основном и возбужденном состоянии

Р. М. Аминова

Лаборатория методов медицинской физики

Дана краткая характеристика вычислительных возможностей современной квантовой химии. Изложены основные результаты научных исследований, проводимых в 2001 году по нескольким направлениям – расчеты параметров ЯМР, изучение поверхностей потенциальной энергии в реакции нитронов, вычисления потенциалов в двухатомных молекулах основного и возбужденного состояний, изучение возможности образования различных кластеров из двухатомных молекул разного состава. Делается акцент на некоторые особенности проводимых расчетов.

Квантовохимическое изучение электронной и пространственной структуры различных молекулярных систем (изолированных молекул, молекулярных комплексов и различных кластеров) одна из актуальных проблем таких наук как химическая физика, физическая химия, квантовая биохимия. Интерес к деталям электронного строения молекул обусловлен не только с чисто научной точки зрения, но и практически важными задачами, связанными с изучением механизмов химических реакций, биологической активности молекулярных систем, спектроскопическими свойствами молекул и т.д.

При наличии быстродействующих электронно-вычислительных машин с большой памятью современные методы квантовой химии позволяют описать свойства, электронное и пространственное строение молекулярных систем в основном состоянии с точностью, сравнимой с данными экспериментальных методов. Использование возможностей квантовохимических вычислительных методов позволяет получать уникальную информацию о многих характеристиках молекулярных систем, например, таких как энергия и геометрические параметры молекул, распределение зарядов и спиновых плотностей в молекуле, силовые постоянные, частоты колебаний, электронное и пространственное строение разного рода ассоциатов, при этом, неэмпирические расчеты высокого уровня могут давать информацию, по точности сравнимую с экспериментальными методами. Вместе с тем, квантовохимические вычисления позволяют получать такие данные, которые порой недоступны или труднодоступны для экспериментального изучения, например, структуру переходных состояний и интермедиатов в процессе химической реакции, геометрию и свойства возбужденных состояний молекул. В результате резко возросших возможностей современной компьютерной техники и значительного усовершенствования вычислительных квантовохимических методов и алгоритмов современная квантовая химия обладает пред-

сказательной силой, способной прогнозировать возможность существования новых химических структур, их строение и свойства, предсказывать новые эффекты. Примером предсказательных возможностей квантовой химии может служить открытие новых форм молекул (фуллерены, стабильные молекулы с максимальной валентностью атома углерода, большей четырех – CLi_5 , CLi_6 , OLi_5 , OLi_4 , ONa_3 , ONa_4) и других гиперлитиевых и гипернатриевых соединений, существование многих из которых было затем подтверждено экспериментально.

В основе традиционных методов квантовой химии лежит решение уравнения Шредингера для стационарных состояний молекулы с N ядрами и n электронами

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi,$$

где Ψ – волновая функция молекулы, а $\mathcal{H}$ – гамильтониан молекулы, который в приближении Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение) имеет вид

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^n \nabla_i^2 + \sum_{i>j}^n \sum_{ij}^n \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{\alpha}^N \sum_i^n \frac{Z_{\alpha} e^2}{R_{i\alpha}} + \sum_{\alpha>\beta}^N \sum_{\alpha\beta}^N \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{R_{\alpha\beta}}.$$

Здесь m и e – масса и заряд электрона, Z_{α} – заряд ядра атома (положение атома в периодической таблице Менделеева), r_{ij} – расстояние между электронами i и j , $R_{i\alpha}$ – расстояние между электроном i и ядром α .

Основным методом квантовой химии является метод Хартри-Фока-Рутана, в котором полная волновая функция Ψ молекулярной системы записывается в виде детерминанта Слейтера, где учитываются все возможные перестановки электронов по различным спин-орбиталям. Волновую функцию i -

ой спин-орбитали для k -го можно представить в виде

$$\phi_i(k) = \Psi_i(k)\alpha \quad \text{или} \quad \phi_i(k) = \Psi_i(k)\beta.$$

В основе наиболее употребительных в настоящее время квантовохимических расчетных методов лежит метод молекулярных орбиталей (МО). МО – это волновая функция ψ от координат одного (i -го) электрона, который движется в некотором усредненном потенциальном поле, создаваемом всеми остальными электронами и всеми ядрами молекулы. МО удобно представить в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) φ_μ

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^n c_{\mu i} \varphi_\mu.$$

Применение вариационного принципа к одноэлектронному уравнению Шредингера приводит к системе нелинейных относительно неизвестных коэффициентов $c_{\mu i}$ однородных уравнений вида

$$\sum_{\nu=1}^n c_{\nu i} (F_{\mu\nu} - ES_{\mu\nu}) = 0,$$

где $\mu = 1, 2, \dots, n$.

Расчет МО представляет в этом случае поиск линейных комбинаций атомных орбиталей, соответствующих симметрии молекулы и минимальному значению электронной энергии E . Систему нелинейных уравнений можно свести к системе линейных однородных уравнений с помощью процедуры самосогласования, в результате чего этот метод называется методом самосогласованного поля Хартри-Фока-Рунта.

Совокупность функций, из которых строится МО, называется базисом. Разработкой оптимальных базисов занимаются целые научные коллективы. От выбора оптимального, сбалансированного для каждой конкретной задачи базисного набора существенно зависят получаемые результаты.

В этом году интересы наших научных исследований были сосредоточены в нескольких направлениях:

1. Теоретическая интерпретация экспериментальных данных спектроскопии ЯМР, расчеты магнитно-резонансных параметров. Нами был разработан подход и программа для расчетов компонент тензора экранирования в рамках вариационной теории возмущений, которая была отлажена в сочетании с использованием неэмпирических волновых функций и применена для расчетов констант ядерного магнитного экранирования ряда двухатомных и малых молекул. Волновые функции молекул рассчитывались неэмпирическим методом с использованием базисных наборов 6-31G, 6-311G. Результаты опубликованы [1].

2. Расчеты поверхности потенциальной энергии в реакции нитрона через оксазиридин к амиду с пере-

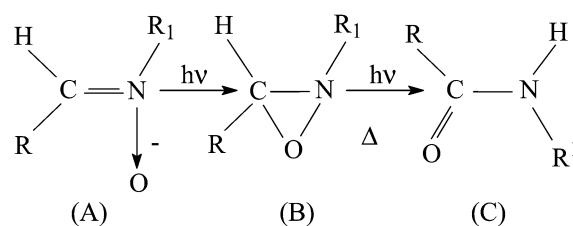
носом протона. Данная задача была предложена Моисеевым С.А. в связи с предполагающимися экспериментальными исследованиями с применением фемтосекундной спектроскопии.

3. С этой же целью проводились расчеты неэмпирическими методами энергии, электронного строения и потенциалов взаимодействия двухатомных молекул Na_2 , NaK и K_2 .

4. Проводились вычисления энергии, электронного строения и геометрии кластеров, построенных из двухатомных молекул O_2 и N_2 .

При применении фемтосекундной спектроскопии для изучения фотоиндуцированных процессов, протекающих в двухатомных молекулах, а также процессов перегруппировки атомов в более сложных молекулах методы квантовой химии приобретают особую роль в связи с необходимостью дальнейшей интерпретации экспериментальных данных.

Известно, что производные N-фенилнитронов проявляют фотохимическую активность и могут служить перспективными объектами для оптических исследований в пико- и фемтосекундном диапазоне. Предметом нашего исследования были процессы внутримолекулярной перегруппировки окиси азометина (производные окисей азометина обычно принято называть “нитроны”) $\text{CH}_2\text{-NOH}$ в амид. Окись азометина можно рассматривать как модельную систему для более сложных фотохимически активных производных C-*n*-нитрофенил-N-фенилнитронов $n\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{-C(H)=N(O)-C}_6\text{H}_5$.



Как показали квантовохимические расчеты, на пути от реактанта (A) к оксазиридину (B) имеется одно переходное состояние TS1. Энергия активации из основного состояния реагента довольно высока и составляет 64.69 ккал/моль. Это указывает на то, что реакция изомеризации окиси азометина из основного состояния молекулы – эндотермическая, требующая высоких энергетических затрат. Расчеты внутренней координаты реакции (IRC) из геометрии TS1 при спуске в одну сторону привели к структуре реактанта (C), а в другую сторону – к структуре оксазиридина (B).

На пути от оксазиридина к продукту квантовохимические расчеты показали наличие двух интермедиатов Int2 и Int3 и, соответственно, трех переходных состояний TS2, TS3 и TS4. Int2 – это ациклическая структура с заслоненными связями C-O и N-H, а Int3 – структура HC(OH)=NH , в которой произошел перенос протона от атома C к атому кислорода.

Поиск структуры переходного состояния TS2 между (B) и Int2 оказался очень трудоемким и длительным (как оказалось, по-видимому, из-за малой величины активационного барьера). В ходе этих поисков пришлось провести тщательное сканирование поверхности потенциальной энергии в зависимости от удлинения связи N-O. Был обнаружен бирадикальный характер образующейся при этом структуры с разными значениями спиновых плотностей.

Помимо этого реакционного пути, был найден другой путь – от ациклической структуры с заслоненными связями C-O и N-H (Int2) через одно переходное состояние TS5 непосредственно к продукту, более выгодный энергетически. Следует отметить, что достоверность найденных переходных состояний подтверждалась чрезвычайно трудоемкими вычислениями как колебательных частот, так и в каждом отдельном случае вычислениями внутренней координаты реакции с целью подтверждения того факта, что полученные путем расчетов переходные состояния лежат на пути именно данной реакции.

Все эти вычисления проводились в рамках неограниченного варианта метода Хартри-Фока с использованием базисных наборов 6-311(3d), 6-31(d,p), 6-31++(d,p), а также с учетом эффектов электронной корреляции, используя формализм теории функционала плотности (UB3Lyp).

Следует подчеркнуть, что при использовании в расчетах однодетерминантной волновой функции не учитываются эффекты электронной корреляции – эффекты, обусловленные учетом состояния электронов в каждый данный момент времени. Как мы уже отмечали, в методе Хартри-Фока учитывается некоторый усредненный потенциал, в котором рассматривается движение каждого отдельного электрона. Между тем, при изучении процессов перегруппировки атомов с переносом протона учет эффектов электронной корреляции весьма желателен. В базисе 6-31++(d,p) учтены также диффузные функции, поскольку мы изучали реакционный путь, протекающий с разрывом связи N-O в процессе перехода трехчленного интермедиата оксазиридина (B) к продукту [2, 3].

При проведении расчетов энергии, электронного строения и потенциалов взаимодействия в двухатомных молекулах Na₂, NaK, K₂ в основном и возбуж-

денных состояниях важен выбор метода, с помощью которого рассчитываются возбужденные состояния молекул. С другой стороны, необходимо, по крайней мере, задуматься, по сравнению с какими состояниями изолированных молекул следует строить потенциальную кривую зависимости энергии двухатомной молекулы от расстояния между атомами. Для расчетов возбужденных термов мы использовали метод конфигурационного взаимодействия с учетом однократно-возбужденных конфигураций.

Построенные нами термы были применены Моисеевым С.А. и Носковым М.А. для изучения особенностей реализации эффекта автоэха в электрон-колебательной динамике двухатомных молекул [4].

Наконец, мы занимались изучением возможности образования кластеров из двухатомных молекул O₂ и N₂. Нами установлена электронная структура и геометрия димерных кластеров и вандерваальсовых комплексов из двух молекул кислорода, двух молекул азота и молекулы кислорода с молекулой азота. Расчеты проводили в рамках методов UB3Lyp/6-31(d) и UQCISD/6-31(d) (квадратичное конфигурационное взаимодействие, включающее однократные и двухкратные возбуждения). Результаты готовятся к печати.

В данной работе принимали участие Моисеев С.А., Носков М.И. и старший научный сотрудник Института биохимии и биофизики КНЦ РАН Ермакова Е.А.

Литература

1. Mushkin V.B., Aminova R.M.: Calculation of nuclear magnetic shielding constants using variation-perturbation method with moderate size basis sets. *J. Mol. Str. (Theochem)* **572**, 185–191 (2001)
2. Aminova R.M., Ermakova E.A.: Rearrangements and proton transfer in nitrones by quantum chemistry and molecular dynamics. *Chem. Phys. Lett.* (2001), in press.
3. Aminova R.M., Ermakova E.A.: Application of molecular dynamics and quantum chemistry methods for search of intermediates and transition states in photochemical reaction of nitrones. International Conference “Reaction Mechanisms and Organic Intermediates” (140 Years of Organic Structural Theory). June 11–14, 2001, Saint-Petersburg, Russia. *Book of Abstracts*, pp. 77–78.
4. Моисеев С.А., Носков М.И., Аминова Р.М.: Особенности реализации эффекта автоэха в электрон-колебательной динамике двухатомных молекул типа Na₂. VIII Всероссийская конференция “Структура и динамика молекулярных систем”, Яльчик-2001. Сборник статей, вып. VIII, ч. 2, стр. 77–81. Йошкар-Ола 2001.

Исследования биофизических характеристик элементов нейронных сетей у виноградной улитки при обучении

Х. Л. Гайнутдинов, В. В. Андрианов, Т. Х. Гайнутдинова

Лаборатория биофизики

В проведенных экспериментах найдено, что сниженные величины мембранного и порогового потенциалов командных нейронов остаются измененными в течение 40 дней после обучения (выработки условного оборонительного рефлекса). Полученные результаты по анализу длительности сохранения изменений электрических характеристик элементов нейронной сети после обучения показывают корреляцию поведенческих и электрофизиологических характеристик. Во второй серии экспериментов было проведено исследование роли серотонина в проявлении свойств мембраны идентифицированных нейронов при выработке условного оборонительного рефлекса. Для создания дефицита серотонина в экспериментах применялся нейротоксический аналог серотонина – медиатора, опосредующего данную форму оборонительного поведения, 5,6-дигидрокситриптамин (5,6-ДОТ). Найдено, что инъекция 5,6-ДОТ препятствует снижению мембранного и порогового потенциалов командных нейронов при выработке условного рефлекса по сравнению с улитками после введения 5,6-ДОТ без обучения. Показано восстановление способности виноградной улитки к выработке условного рефлекса спустя 2 недели после второй инъекции 5,6-ДОТ.

Введение

Нейрон играет ключевую роль в интегративной деятельности головного мозга [1–3]. В данном случае речь идет как о мембранных системах, включая ионные каналы, так и о процессах, определяемых системой внутриклеточной сигнализации. Однако воспринимаемая информация кодируется в нервной системе не столько в отдельной клетке, сколько в сети взаимосвязанных элементов. Принято считать, что каждому отдельному виду информации должна соответствовать специфическая нейронная сеть. И, таким образом, информация должна записываться и считываться в виде некоторого динамического процесса в ансамбле нейронов. Нейроны, объединяясь в сети, образуют системы обработки информации, обеспечивающие эффективную адаптацию организма к непрерывно меняющимся условиям жизни, и важнейшую роль в них играют интернейроны [4, 5]. Механизм генерации оборонительной реакции связан со специализированной системой командных нейронов. Их характерной особенностью является то, что каждый из них вызывает определенный фрагмент целостного поведения. Кроме прямой передачи импульсов от нейрона к нейрону, были выявлены специальные нейронные механизмы в виде разнообразных модулирующих нейронов, которые участвуют в пластических изменениях нейронной сети оборонительного рефлекса, и феномен так называемого “трансмиссер зависимого поведения” [6, 7].

Для изучения механизмов обучения и памяти, а также для построения нейрокомпьютерных моделей очень важно иметь функциональные характеристики реальных нейронных сетей, в частности, входных,

выходных и интегративных элементов [8, 9]. В подобных исследованиях широко используются некоторые виды беспозвоночных, в том числе брюхоногие моллюски, к которым относится и виноградная улитка. Преимущество их использования в том, что, во-первых, они обладают относительно простой нервной системой при достаточно разнообразном поведении. Во-вторых, крупные размеры нейронов позволяют идентифицировать одни и те же клетки у всех особей данного вида и определить их роль в поведении. Большие размеры нейронов также существенно облегчают эксперимент [10]. Кроме того, относительная простота нервной системы существенно сужает ансамбль нейронов, обеспечивающих ту или иную поведенческую реакцию. Исследование характеристик нейронной сети при различных ее состояниях дает возможность разнообразить модели и задавать большее количество исходных параметров [11]. Изменения состояния нервной системы можно достичь, например, при таком естественном процессе как обучение.

Под обучением понимают приспособительное изменение поведения, обусловленное индивидуальным опытом. Изменения в работе нейронной сети при обучении можно тестировать через активность командных нейронов оборонительного поведения. Поэтому нами была поставлена задача исследовать изменения их электрических характеристик при формировании долговременных пластических модификаций нейронной сети, а также при прямом воздействии на модуляторные нейроны, которые обеспечивают изменение эффективности синаптических взаимодействий в нейронной сети, с помощью нейротоксина, который влияет на уровень серотонина в нервной системе.

Исследования длительности сохранения изменений биофизических характеристик элементов нейронных сетей

Важным звеном в переходе кратковременных пластических изменений в долговременные являются биофизические и биохимические характеристики нервных клеток [12, 13]. Ранее было найдено, что при выработке условного оборонительного рефлекса (УОР) у виноградной улитки происходит снижение мембранного потенциала и уменьшается величина порогового потенциала командных нейронов оборонительного поведения [14]. Известно, что поведенческий результат обучения сохраняется в течение 40 дней [4]. В связи с этим представлялось необходимым проследить динамику изменений электрических параметров командных нейронов оборонительного поведения в течение времени сохранения изменений поведенческих реакций.

У виноградной улитки *Helix lucorum* вырабатывался классический условный оборонительный рефлекс на постукивание по раковине (59 улиток). В качестве условного стимула использовали постукивание по раковине, которое в норме практически не вызывало оборонительной реакции. Безусловным стимулом служила струя воздуха в отверстие легочной полости, что приводит к безусловной оборонительной реакции закрытия пневмостома. Активному контролю (17 улиток) было предъявлено такое же количество условных и безусловных стимулов, как и экспериментальным животным, но в случайном порядке. После выработки условного рефлекса проводили анализ электрических характеристик командных нейронов ЛПа3, ППа3, ЛПа2, ППа2 оборонительного поведения. Измерения проводились при комнатной температуре (20–22°C) с применением внутриклеточных стеклянных микроэлектродов, имеющих сопротивление 5–40 МОм и заполненных 2.5 М KCl. В ходе эксперимента регистрировали потенциал покоя, амплитуду потенциала действия, критический уровень деполяризации и пороговый потенциал. Регистрация по-

тенциалов производилась при помощи АЦП-преобразователей непосредственно на компьютер. Результаты статистически обрабатывались с применением *t*-критерия Стьюдента. В работе приведены средние значения измеряемых величин и стандартные ошибки среднего ($M \pm SEM$). Анализ электрических характеристик командных нейронов проводили через 1, 7, 14, 21, 28, 40 и 52 дня после выработки условного оборонительного рефлекса. Всего было исследовано 228 нейронов у трех групп животных: интактные улитки, обученные улитки и улитки активного контроля (получившие несочетанные стимулы).

Условный оборонительный рефлекс вырабатывался за 140–160 сочетаний условного и безусловного стимулов в течение 3 дней. Выработанный рефлекс сохранялся в течение 40 дней. При выработке УОР наблюдается достоверное ($p < 0.01$) снижение величин мембранного и порогового потенциалов командных нейронов (таблица 1). Измерения электрических характеристик командных нейронов через значительные промежутки времени после выработки УОР показывают, что сниженные величины измеряемых характеристик нейрональной мембраны сохраняются в течение 40 дней. Достоверных изменений критического уровня деполяризации найдено не было. Через 52 дня после обучения значения мембранного потенциала и порога генерации потенциалов действия командных нейронов не отличаются от таковых у интактных улиток и улиток активного контроля. Регистрация электрических характеристик нейронов у интактных животных и у улиток активного контроля на протяжении всего эксперимента не показала достоверных изменений, в таблице 1 приведены усредненные данные.

Таким образом, в этой серии экспериментов было показано длительное сохранение сниженного уровня мембранного и порогового потенциалов командных нейронов оборонительного рефлекса в течение 40 дней после обучения. То есть мы имеем дело с долговременной памятью, которая, как известно, включает в себя процессы, связанные с биосинтезом белка [3, 12,

Таблица 1. Длительность сохранения измененных значений электрических характеристик командных нейронов ЛПа3, ППа3, ЛПа2 и ППа2 оборонительного поведения виноградной улитки на разных сроках после выработки обучения, а также у интактных улиток и улиток активного контроля.

Параметры командных нейронов	Интактные улитки	Активный контроль	1 день	1 нед.	2 нед.	Срок 3 нед.	30 дн.	40 дн.	52 дн.
Потенциал покоя (мВ), значение <i>n</i>	–61.1±0.5 34	–61.3±0.9 46	–56.2±0.5 27*	–56.9±0.4 24*	–56.6±0.5 22*	–57.0±0.6 20*	–57.4±0.7 19*	–58.3±0.7 22*	–60.6±0.8 14
Пороговый потенциал (мВ), значение <i>n</i>	20.2±0.3 27	19.8±0.6 31	16.4±0.4 16*	16.5±0.3 22*	16.7±0.5 17*	16.4±0.4 15*	16.3±0.2 17*	17.2±0.5 13*	19.9±0.4 10

* Отличие от контроля ($p < 0.001$).

15]. Результаты, полученные в ходе проведенных экспериментов, позволяют сделать вывод, что длительное сохранение поведенческих феноменов при обучении коррелирует с изменениями электрических характеристик командных нейронов оборонительного рефлекса. Это означает, что в процесс обучения вовлекаются длительные изменения мембранных характеристик в определенных элементах нейронной сети, зависящие от метаболизма клетки.

Влияние нарушения межклеточных связей нейротоксином (5,6-дигидрокситриптамиином) на ассоциативное обучение

Нейронная сеть, которая состоит из определенных элементов, воспринимает внешние сигналы, генерирует выходные импульсы и управляет реакцией сети на внешнюю среду. Результаты показывают, что каждый элемент выполняет свои функции и основной упор в нашей работе был сделан на нейроны, несущие управляющую и модулирующую функции. Электрические характеристики нервных клеток служат теми параметрами, которые несут основную функциональную нагрузку и через изменение которых можно модифицировать нейронную сеть с тем, чтобы она выполняла свою функцию. Так как информация от нейрона к нейрону передается химическим путем при помощи посредников-медиаторов, то нами были проведены исследования, направленные на их изучение, с применением веществ, вызывающих обратимое разрушение участка контакта между клетками. Медиаторы – это биологически активные вещества, которые выделяются из возбужденного нервного окончания во внеклеточную среду и путем диффузии действуют на клетку-мишень, которая чувствительна к нему. Медиатор содержится в пресинаптическом окончании в синаптических пузырьках и когда в этой клетке возникает электрический импульс, мембрана пузырьков сливается с мембраной пресинаптической клетки, медиатор выбрасывается в синаптическую щель и диффундирует к постсинаптической клетке. При этом он влияет на ее мембрану таким образом, что вероятность возникновения в ней импульсов либо возрастает, либо уменьшается.

Исследования биофизических механизмов функционирования нейронной сети рассматривались после нарушения взаимодействия тех ее элементов, которые опосредуются серотонином. Серотонин является одним из широко распространенных и хорошо изученных медиаторов нервной системы [6, 16]. Важнейшим методическим приемом для исследования роли серотонинергической системы в деятельности нервной системы и в пластичности поведения является использование нейротоксических аналогов серотонина 5,6-дигидрокситриптамина (5,6-ДОТ) [4, 17, 18]. К настоящему времени накопился большой эксперименталь-

ный материал, свидетельствующий о влиянии нейротоксических аналогов серотонина 5,6-ДОТ на выработку ассоциативного обучения. Однако в литературе отсутствуют сведения о мембранных механизмах, т.е. об изменениях в идентифицированных клетках нейронной сети, сопутствующих данным процессам. Это побудило нас к постановке электрофизиологических исследований влияния 5,6-ДОТ на ассоциативное обучение. Основной задачей наших исследований явился анализ изменений электрических характеристик командных нейронов при обучении как интактных улиток, так и улиток после инъекции 5,6-ДОТ.

Для создания дефицита серотонина применяли 5,6-ДОТ фирмы “Sigma”, который вводили улиткам 2 уколами по 15 мг/кг массы с интервалом в 7 дней. Поведенческие эксперименты начинались спустя 1 день либо 1 неделю после второй инъекции. Было выявлено, что у улиток, которых начинали обучать на следующий день после второй инъекции 5,6-ДОТ, условный рефлекс не вырабатывался. В то же время животные, у которых этот рефлекс формировали через 1 неделю после второй инъекции нейротоксина, начинали обучаться через 12 дней после второй инъекции 5,6-ДОТ. Это свидетельствует о том, что восстановление функциональных свойств пресинаптических терминалей после дегенерации происходит быстрее, чем восстановление морфологических характеристик.

По окончании поведенческой части проводили регистрацию электрических характеристик командных нейронов оборонительного рефлекса ЛПа3, ППа3, ЛПа2 и ППа2. У улиток как на следующий день, так и через неделю после второй инъекции нейротоксина, наблюдался достоверный ($p < 0.001$) деполяризационный сдвиг мембранного потенциала (V_m) командных нейронов и снижение порога генерации потенциала действия (V_t) на одинаковые величины. V_m уменьшался с уровня -60.6 ± 0.4 мВ ($n = 37$) у улиток, которым был введен физиологический раствор, до -57.0 ± 0.5 мВ ($n = 41$) у опытной группы улиток, получивших инъекцию 5,6-ДОТ. V_t достоверно снижался с 19.8 ± 0.5 мВ ($n = 22$) до 17.3 ± 0.4 мВ ($n = 33$) соответственно. Электрические характеристики командных нейронов у улиток, которым предъявляли условные и безусловные стимулы в случайном порядке после инъекции физиологического раствора, достоверно не отличались от таковых у улиток после инъекции физиологического раствора. У улиток, инъектированных нейротоксином 5,6-ДОТ, после формирования УОР не наблюдалось дальнейшего снижения V_m и V_t по сравнению с улитками после введения 5,6-ДОТ. Величины электрических характеристик командных нейронов в этой экспериментальной серии оставались такими же, как после инъекции нейротоксина. Так, у улиток, которых начинали обучать на следующий день после второй инъекции 5,6-ДОТ, были получены следующие значения измеряемых парамет-

ров: $V_m = -56.7 \pm 0.4$ мВ ($n = 29$), $V_t = 17.7 \pm 0.3$ мВ ($n = 24$), $E_c = -40.0 \pm 0.3$ мВ ($n = 24$), а у улиток, которых начинали обучать через неделю после второй инъекции 5,6-ДОТ, $V_m = -56.8 \pm 0.5$ мВ ($n = 16$), $V_t = 17.6 \pm 0.3$ мВ ($n = 10$), $E_c = -40.0 \pm 0.2$ мВ ($n = 10$). В то же время у обученных улиток происходило снижение V_m и V_t , как было показано нами ранее ($V_m = -56.7 \pm 0.4$ мВ ($n = 17$), $V_t = 16.0 \pm 0.4$ мВ ($n = 14$), $E_c = -40.2 \pm 0.4$ мВ ($n = 14$)). Таким образом, полученные экспериментальные результаты показывают, что инъекция нейротоксина, истощающего серотонин, препятствует дальнейшему снижению мембранного и порогового потенциалов командных нейронов при обучении, по сравнению с улитками после введения 5,6-ДОТ без обучения. Кроме того, показано восстановление способности виноградной улитки к выработке условного рефлекса спустя 12 дней после второй инъекции 5,6-ДОТ.

Авторы благодарят Тагирову (Назырову) Р.Р. и Мухамедшину Д.И., также принимавших участие в выполнении части экспериментов.

Литература

1. Костюк П.Г.: Кальций и клеточная возбудимость. Москва: Наука 1986.
2. Соколов Е.Н., Вайткявичюс Г.Г.: Нейроинтеллект: от нейрона к нейрокомпьютеру. Москва: Наука 1989.
3. Bailey C.H., Bartsch D., Kandel E.R.: Toward a molecular definition of long-term memory storage. *Proceedings of National Academy of Sciences of USA* **93**, 13445–13452 (1996)
4. Балабан П.М., Захаров И.С.: Обучение и развитие – основа двух явлений. Москва: Наука 1992.
5. Matzel L.D., Talk A.C., Muzzio I.A., Rogers R.F.: Ubiquitous molecular substrates for associative learning and activity-dependent neuronal facilitation. *Annual Review of Neuroscience* **9**, 129–167 (1998)
6. Сахаров Д.А.: Интегративная функция серотонина у примитивных *Metazoa*. *Журнал общей биологии* **51** 437–449 (1990)
7. Zakharov I.S., Ierusalimsky V.N., Balaban P.M.: Pedal serotonergic neurons modulate the synaptic input of withdrawal interneurons of *Helix*. *Invertebrate Neuroscience* **1**, 41–52 (1995)
8. Лукашин А.В., Веденов А.А., Франк-Каменецкий М.Д.: Физические модели нейронных сетей. *Биофизика* **32**, 918–928 (1987)
9. Hopfield J.J., Tank D.L.: Computing with neural circuits: a model. *Science* **233**, 625–633 (1986)
10. Сахаров Д.А.: Долгий путь улитки. *Журнал высшей нервной деятельности* **42**, 1059–1063 (1992)
11. Perrins R., Weiss K.R.: Compartmentalization of information processing in an *Aplysia* feeding circuit interneuron through membrane properties and synaptic interactions. *Journal of Neuroscience* **18**, 3977–3989 (1998)
12. Goelet P., Castellucci V.F., Schacher S., Kandel E.R.: The long and the short of long-term memory – a molecular framework. *Nature* **322**, 419–422 (1986)
13. Hawkins R.D., Kandel E.R., Siegelbaum S.A.: Learning to modulate transmitter release: themes and variations in synaptic plasticity. *Annual Review of Neuroscience* **16**, 625–665 (1993)
14. Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х., Чекмарев Л.Ю.: Изменение электрических характеристик командных нейронов при выработке условного оборонительного рефлекса у виноградной улитки. *Журнал высшей нервной деятельности* **46**, 614–616 (1996)
15. Гринкевич Л.Н., Нагибнева И.Н., Лисачев П.Д.: Условный оборонительный рефлекс у виноградной улитки (молекулярно-генетические аспекты). *Физиологический журнал* **81**, 24–28 (1995)
16. Walters E.T., Ambron R.T.: Long-term alterations induced by injury and by 5-HT in *Aplysia* sensory neurons: convergent pathways and common signals? *Trends Neuroscience* **18**, 137–142 (1995)
17. Гайнутдинов Х.Л., Андрианов В.В., Гайнутдинова Т.Х.: Воздействие нейротоксинов 5,6-дигидрокситриптамина и р-хлорфенилаланина на параметры электрической активности командных нейронов при долговременной сенситизации и обучении у виноградной улитки. *Журнал высшей нервной деятельности* **49**, 48–58 (1999)
18. Glanzman D.L., Mackey S.L., Hawkins R.D., Dyke A.M., Lloyd P.E., Kandel E.R.: Depletion of serotonin in the nervous system of *Aplysia* reduces the behavioral enhancement of gill withdrawal as well as the heterosynaptic facilitation produced by tail shock. *Journal of Neuroscience* **9**, 4200–4213 (1989)

Анализ изменения формы усталостной поверхностной трещины в трубопроводе

В. Н. Шлянников, Б. В. Ильченко

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Разработана модель развития несквозных поверхностных дефектов в трубопроводе, нагруженном переменным внутренним давлением. Составной частью модели является предложенная схема учета изменения локальных разрушающих напряжений вдоль криволинейного фронта трещины. Обоснование теоретической модели дано в сравнении с литературными экспериментальными данными.

Существование трещиноподобных дефектов в сосудах давления и трубопроводах не может быть исключено за весь период эксплуатации. Поэтому технологии оценки характеристик трещиностойкости компонентов, подверженных давлению, имеют приложения в различных отраслях промышленности, таких как энергетика, нефтехимия, транспорт. В большинстве известных случаев эксплуатационных повреждений трубопроводов, нагруженных переменным внутренним давлением, дефекты представляли собой несквозные поверхностные трещины с криволинейным фронтом. Подобные дефекты инициировались на внутренней поверхности трубопровода и распространялись по толщине стенки трубы в плоскости, нормальной к направлению наибольшей компоненты двухосных номинальных напряжений от действия внутреннего давления (рис. 1). Оценка изменения формы и размеров несквозной трещины в процессе ее роста является существенным элементом прогнозирования несущей способности трубопровода при наличии исходных или накопленных эксплуатационных повреждений. Подобная задача уже обсуждалась в отечественной и зарубежной литературе, некоторые результаты содержат-

ся в работах авторов [1–3]. Однако эти результаты не имеют систематического и обобщенного характера, отражающего влияние геометрических параметров трубопровода, свойств материала, изменения локальных характеристик разрушения вдоль криволинейного фронта трещины.

Цель настоящей работы – исследование закономерностей изменения формы поверхностной трещины в трубопроводах при циклическом нагружении внутренним давлением. На основе анализа формы фронта развивающихся при циклическом нагружении реальных поверхностных дефектов в работах [4–7] доказана допустимость их аппроксимации трещинами полуэллиптического типа (рис. 1). Показанная на рис. 1 расчетная схема трубопровода с поверхностной полуэллиптической трещиной содержит следующие обозначения: a и b – размеры полуосей эллипса (полуось b направлена по толщине стенки трубопровода t); R и R_0 – внутренний и наружный радиусы трубопровода; ϕ_e – параметрический угол эллипса; A и B – точки, соответствующие вершинам полуосей a и b . Удобно ввести в рассмотрение безразмерные величины, определяющие положение фронта полуэллиптической тре-

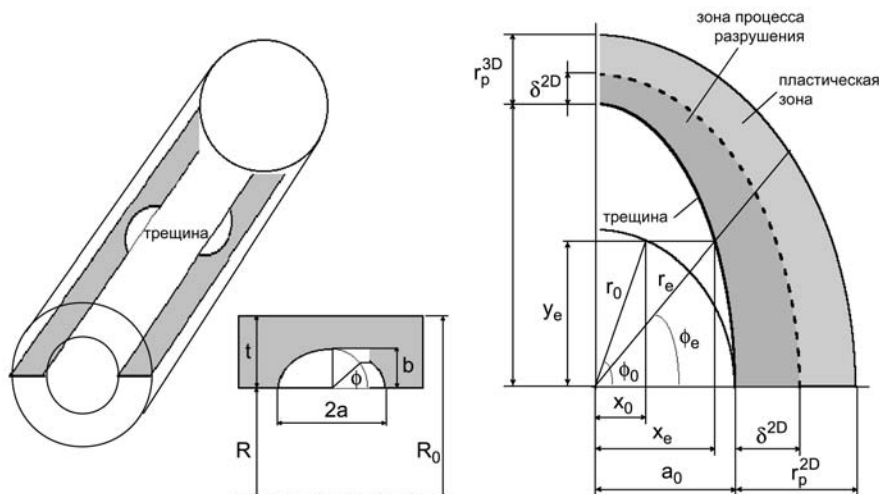


Рис. 1. Расчетная схема трубопровода с поверхностной полуэллиптической трещиной.

щины $\varepsilon = b/a$ – параметр формы и $\beta = b/t$ – параметр относительной глубины. Несущественное отклонение экспериментально наблюдаемых форм фронта поверхностных трещин от канонических полуэллиптических позволяет использовать известные численные решения для коэффициентов интенсивности напряжений для трубопровода, нагруженного внутренним давлением [8]. Следуя основным канонам механики разрушения, можно предположить, что положение фронта трещины в процессе ее развития будет соотноситься с величиной коэффициента интенсивности (КИН) в каждой точке криволинейного контура трещины. Следовательно, положение фронта трещины будет описываться бесконечным числом степеней свободы. Авторы работы [6] путем численных экспериментов доказали, тем не менее, возможность редуцирования числа степеней свободы для полуэллиптической формы трещины с 21 до 2 без потери точности прогнозирования роста трещины. Исходя из этого, на основе анализа кинетики формы несквозных дефектов сделан вывод [6], что закономерности роста поверхностных трещин при циклическом нагружении могут быть адекватно описаны моделью с двумя степенями свободы, каждая из которых определяет положение вершин соответствующих полуосей a и b эллипса в произвольный момент времени.

Особенность развития поверхностных дефектов состоит в том, что фронт трещины в вершине малой полуоси, как правило, находится в условиях близких к плоской деформации, а прилегающий к свободной поверхности (внутренней поверхности трубопровода) – в условиях плоского напряженного состояния. Очевидно, что возникает необходимость учета изменения вдоль контура (фронта) развивающегося несквозного дефекта таких факторов как асимптотика напряжений, степень стесненности деформаций, локальные разрушающие напряжения и физико-механические свойства материала, перераспределение напряжений из-за пластических деформаций. С целью подобного учета авторы [7] ввели эмпирический экспериментальный коэффициент, определяемый из условия совпадения диаграмм усталостного разрушения для стандартного образца с прямолинейной сквозной трещиной и образца с несквозным поверхностным дефектом. В работах [4, 5] отмечается значимость различий в условиях плоской деформации и плоского напряженного состояния для несквозных дефектов, но никак не учитывается данное обстоятельство в расчетных моделях.

Модель роста несквозной трещины в трубопроводе под действием внутреннего давления, развиваемая в настоящей работе, основывается на следующих предположениях:

- контур трещины аппроксимируется уравнением полуэллипса;
- развитие трещины определяется распределением упруго-пластических коэффициентов интенсивно-

сти напряжений вдоль фронта трещины, т.е. имеют место условия маломасштабной текучести;

- изменение локальных разрушающих напряжений вдоль фронта несквозной трещины пропорционально распределению местных пластических деформаций вблизи криволинейного контура трещины.

Для описания распределения упругих КИН в трубопроводе под действием внутреннего давления, ослабленном полуэллиптической трещиной (рис. 1), использовано численное решение Рао и Ньюмана [8]

$$K = \frac{PR}{t} \left(\frac{\pi b}{Q} \right)^{1/2} F_e \left(\frac{b}{a}, \frac{b}{t}, \frac{t}{R}, \phi \right) = \sigma_n \sqrt{\pi b} Y(Q^{-1/2}, F_e),$$

$$Q = \sqrt{1 + 1.464 (a/b)^{1.65}}, \quad (1)$$

где P – внутреннее давление, PR/t – среднее окружное напряжение. Развернутое выражение для функционала F_e приведено в [8]. Положение точек фронта полуэллиптической трещины предлагается задавать двумя координатами – радиусом r_e и параметрическим углом ϕ_e (рис. 1):

$$\phi_e = \arctg \left(\frac{b}{a} \tg \phi \right), \quad (2)$$

для $\varepsilon_0 \leq 1$, $r_0 = b_0$, $y_0 = r_0 \sin \phi$, $x_e = y_0 / \tg \phi_e$,

$$r_e = \sqrt{x_e^2 + y_0^2},$$

для $\varepsilon_0 > 1$, $r_0 = a_0$, $y_0 = r_0 \cos \phi$, $y_e = x_0 / \tg \phi_e$,

$$r_e = \sqrt{x_0^2 + y_e^2}. \quad (3)$$

Модель роста трещины

При циклическом нагружении во фронте трещины имеют место взаимосвязанные процессы накопления и развития повреждений. Результатом этих процессов является новое положение или приращение длины трещины. Величина приращения определяется реализацией ведущего микромеханизма роста трещины в элементарном акте разрушения, зависящего от напряженно-деформированного состояния во фронте трещины и упруго-пластических свойств материала. В работах автора [9–11] для условий статического и циклического нагружения предложена концепция зоны процесса разрушения, согласно которой реализация ведущего микромеханизма разрушения – эстафетного (хрупкого) или встречного (вязкого) – зависит от соотношения размеров зоны процесса разрушения и пластической области во фронте трещины. Размер зоны процесса разрушения или приращение длины трещины предложено [9–11] рассчитывать по уравнению

$$\bar{\delta}_c = \left\{ \frac{\bar{S}_2 \pm [\bar{S}_2^2 - 4(\bar{W}_c^* - \bar{S}_3)(\bar{S}_1 + \bar{S}_p)]}{2(\bar{W}_c^* - \bar{S}_3)} \right\}^2, \quad (4)$$

$$\bar{W}_c^* = \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{yn}} \right)^2 \left(\frac{1}{2} \bar{\sigma}_f^2 + \frac{\alpha n}{n+1} \bar{\sigma}_f^{n+1} \right),$$

где σ_n – номинальное напряжение, σ_0 – предел текучести материала, σ_f – локальное разрушающее напряжение, α и n – константы кривой упруго-пластического деформирования, $\bar{S}_i$ ($i = 1, 2, 3$) и $\bar{S}_p$ – упругие и пластический коэффициенты соответственно.

Для несквозного поверхностного дефекта полуэллиптической формы из условия распределения зоны пластической деформации по толщине элемента получено уравнение:

$$\bar{\sigma}_f = \frac{\sigma_f}{\sigma_0} = \frac{\bar{\sigma}_f^{3D}}{\sqrt{(\bar{r}_p^{3D} \cos \phi_c / \bar{r}_p^{2D})^2 + \sin^2 \phi_c}}, \quad (5)$$

где σ_f – локальное разрушающее напряжение, r_p – местные упруго-пластические деформации. Таким образом, найдена функция, определяющая распределение размеров зоны процесса разрушения δ или приращения длины трещины вдоль ее криволинейного фронта. Строго говоря, использование формулы (5) в составе уравнения (4) позволяет рассчитывать приращение длины трещины не только для двух степеней свободы (двух крайних точек фронта a и b), а для бесконечного числа степеней свободы, задаваемых значением параметрического угла ϕ_c .

Для прогнозирования скорости роста усталостной трещины воспользуемся предложенным ранее автором [10] выражением, модифицировав его для условий развития несквозного дефекта,

$$\frac{dl}{dN} = 2\bar{\delta}l \left(\frac{\sigma_n^2 \bar{K}_f^2 - \sigma_{th}^2 \Delta \bar{K}_{th}^2}{4\sigma_f^* \varepsilon_f^* E \bar{\delta}} \right)^{1/m}, \quad (6)$$

где $l = r_c(\phi_c)$, $\bar{\delta} = \delta/l$, $\bar{K}_f = \bar{S}_l + \bar{S}_p + \bar{S}_2 \sqrt{\bar{\delta}} + \bar{S}_3 \bar{\delta}$, ΔK_{th} , σ_f^* , ε_f^* , m – традиционные константы кривых циклического деформирования и разрушения. Шаговая процедура расчетов состояла в последовательном определении размера зоны процесса разрушения (приращении длины трещины) вдоль фронта в 90 точках по формуле (4), вычислении скорости роста трещины по формуле (6), интегрировании этого уравнения и определении долговечности ΔN соответствующей данному приращению длины, увеличению размера трещины на величину ее приращения и повторении всего цикла до момента разрушения трубопровода. Таким условием разрушения принято нарушение сплошности трубопровода или достижение размера b полуоси трещины толщины стенки трубопровода t , т.е. $b = t$.

Результаты и обсуждение

Объектом наших исследований являлся трубопровод, ослабленный поверхностной несквозной трещиной, нагруженный переменным внутренним давлением. Геометрия трубы варьировалась от тонкостенной $t/R = 0.1$ до толстостенной $t/R = 1.0$, форма начального дефекта от удлиненной полуэллиптической трещины $\varepsilon_0 = 0.1$ до правильной полукруговой $\varepsilon_0 = 1.0$, глубина исходной трещины от мелкой поверхностной $b_0/t = 0.01$ до глубокой несквозной $b_0/t = 0.3$. Для каждого варианта геометрии трубопровода просчитывали 12 сочетаний исходных размеров и формы поверхностной полуэллиптической трещины (таблица 1). Общее число вариантов расчета для каждого материала составляло 60.

Трубопроводы наделялись свойствами двух сталей 15Х2МФА и 15Х2НМФА. С целью получения обобщенных закономерностей роста трещин в трубопроводах из материалов различных свойств, из литературных источников [12, 13] были найдены основные механические характеристики стали 15Х2МФА, подвергнутой различным видам термообработки с

Таблица 1. Значения варьируемых геометрических параметров трубопровода и трещины.

t/R	R/R_0	R (mm)	R_0 (mm)	$\bar{\sigma} = \sigma_n/\sigma_0$	ε_0	b_0/t	b_0 (mm)	a_0 (mm)	
0.10	0.91	150	165	0.2	0.10	0.01	0.15	1.50	
						0.10	1.50	15.00	
						0.30	4.50	45.00	
	0.80	60	75		0.25	0.01	0.15	0.60	
						0.10	1.50	6.00	
						0.30	4.50	18.00	
	0.67	30	45		0.5	0.50	0.01	0.15	0.30
							0.10	1.50	3.00
							0.30	0.45	9.00
0.25	0.50	20	30	0.7	1.00	0.01	0.15	0.15	
						0.10	1.50	1.50	
						0.30	4.50	4.50	

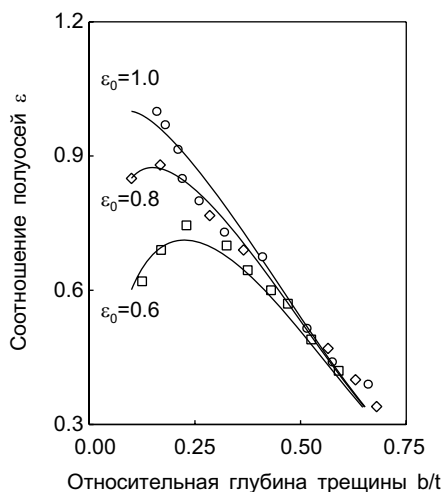


Рис. 2. Сравнение расчетных (сплошные линии) и экспериментальных (◇, □, ○) данных.

последующим проведением испытаний при низких и умеренно повышенных (до возникновения условий ползучести) температурах.

Таким образом было достигнуто состояние стали 15Х2МФА от хрупкого до пластичного при неизменном химическом составе. Кроме этого, такой подбор данных позволяет оценить влияние температуры испытаний на закономерности роста трещин в трубопроводе.

Обоснование предложенной численной модели развития несквозных дефектов в трубопроводе (уравнения (4)–(6)) дано в сравнении с литературными экспериментальными результатами [2] для цилиндрического сосуда из стали 15Х2МФА, нагруженного внутренним давлением. На рис. 2 представлено сопоставление экспериментальных и расчетных данных для значений коэффициента формы полуэллиптической трещины в момент разрушения. Наблюдается хорошее их взаимное соответствие.

Выводы

Представлены численные результаты моделирования изменения формы несквозного дефекта в трубопро-

воде под внутренним циклическим давлением. Получены общие закономерности роста трещин для вариации геометрии трубопровода от тонкостенного к толстостенному, формы начальной трещины от удлиненной полуэллиптической до правильной полукруговой, глубины исходной трещины от мелкой поверхностной до глубокой несквозной.

Литература

1. Нэир П.К.: Модель роста усталостных трещин применительно к несквозным дефектам в пластинах и трубах. Теорет. основы инж. расчетов **101**, №1, 54–60 (1979)
2. Бурак М.И., Кайдалов В.Б., Пичков С.Н. и др.: Экспериментальное исследование циклической трещиностойкости сосудов давления в опытах на крупномасштабных моделях. Прикладн. пробл. прочн. пластичн. Методы решения **1988**, 115–122.
3. Carpinteri A., Brighenti: Circumferential surface flows in pipes under cyclic axial loading. Engng. Fract. Mech. **60**, 383–396 (1998)
4. Летунов В.И., Шульгинов Б.С., Плундрова И. и др.: Закономерности развития поверхностных трещин в низколегированной стали при асимметричном циклическом изгибе. Сообщение 1. Пробл. прочности № 11, 41–46 (1985)
5. Лукьянов В.Ф., Напрасников В.В., Коробцов А.С.: Кинетика изменения фронта поверхностной трещины при осесимметричном изгибе. Пробл. прочности № 7, 8–13 (1986)
6. Варфоломеев И.В., Вайншток В.А., Красовский А.Я.: Критерии и устойчивые формы роста несквозных трещин при циклическом нагружении. Сообщение 1. Пробл. прочности № 8, 3–10 (1990)
7. Варфоломеев И.В., Вайншток В.А., Красовский А.Я.: Критерии и устойчивые формы роста несквозных трещин при циклическом нагружении. Сообщение 2. Пробл. прочности № 9, 11–16 (1990)
8. Мураками Ю. (ред.): Справочник по коэффициентам интенсивности напряжений. Москва: Мир 1990.
9. Шлянников В.Н.: Плотность энергии деформации и зона процесса разрушения. Сообщение 1. Теоретические предпосылки. Пробл. прочности № 10, 3–17 (1995)
10. Шлянников В.Н.: Плотность энергии деформации и зона процесса разрушения. Сообщение 2. Экспериментальное обоснование. Пробл. прочности № 11/12, 3–21 (1995)
11. Shlyannikov V.N.: Modelling of crack growth by fracture damage zone. Theoret. Appl. Fract. Mech. **25**, 187–201 (1996)
12. Махутов Н.А.: Деформационные критерии разрушения и расчет элементов конструкций на прочность, стр. 272. Москва: Машиностроение 1981.
13. Трошенко В.Т., Покровский В.В., Каплуненко В.Г.: Прогнозирование трещиностойкости теплоустойчивых сталей с учетом влияния размеров образцов. Сообщение 1. Результаты экспериментальных исследований. Пробл. прочности № 1, 5–25 (1997)

Метод подконструкций как аппарат распараллеливания вычислений в компьютерных сетях

С. К. Черников, А. Н. Ашихмин

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Изложены теоретические основы и технология разработанного комплекса программ для анализа напряженно-деформированного состояния и динамической реакции сложных структур методом конечных элементов в сети персональных компьютеров с возможностью распараллеливания вычислений.

Стремление получить более достоверную информацию при численном анализе механических процессов в сложных структурах приводит к необходимости использования все более и более громоздких моделей. Повышение производительности вычислительной техники (например, использование рабочих станций) не решает всех проблем, возникающих перед исследователем, так как при работе с большой моделью (насчитывающей до 1000 тыс. неизвестных) помимо вычислительных трудностей возникают и проблемы подготовки данных, и трудности анализа полученных результатов. Естественным решением всех проблем является распараллеливание процесса численного анализа конструкции с возможностью выполнения его несколькими исследователями на некотором числе компьютеров, работающих в режиме локальной сети. В контексте сказанного весьма эффективным инструментом может стать метод подконструкций, ориентированный в той или иной форме на параллельную обработку данных о сложных объектах.

Начнем с алгоритма решения линейной задачи статики – получения численных оценок напряженно-деформированного состояния (НДС) конструкций. Без распараллеливания этот алгоритм включает в себя ряд последовательно выполняемых для конструкции (структуры) этапов: подготовку данных; генерацию модели; формирование системы разрешающих уравнений; решение системы уравнений структуры (определение перемещений); вычисление вторичных результатов (определение напряжений); интерпретацию результатов.

При подготовке данных задаются параметры, определяющие геометрию конструкции, физические свойства, условия закрепления и нагружения. Отметим, что стадия подготовки данных является одним из самых трудоемких этапов, требующих высокой квалификации расчетчика. Одновременно с этим она является основным источником ошибок при расчетном анализе. Проблемы возрастают с усложнением моделируемого объекта.

На этапе генерации модели в автоматическом режиме вычисляются координаты расчетной сетки, определяется ее топология, физические свойства элементов. Для узлов и ячеек сетки вычисляются значения нагрузок, определяемых заданными на этапе подготовки данных параметрами.

На этапе формирования системы разрешающих уравнений (матрицы жесткости конструкции) для каждого элемента конструкции вычисляется вклад в коэффициенты системы разрешающих уравнений (формируется матрица жесткости элемента). Этот этап весьма трудоемок, так как приходится иметь дело с большим количеством элементов, а для большинства типов элементов вычисление коэффициентов связано с численным интегрированием. Задача усложняется еще и тем, что матрица жесткости конструкции, как правило, представлена в виде некоторого числа больших блоков, часто размещенных на внешнем носителе информации (жестком диске) и при формировании расходится время на обмены.

Система разрешающих уравнений решается либо прямыми, либо итерационными методами. Представленные ниже результаты получены вариантом метода Холесского – методом LDL^T -факторизации. При этом ленточная структура матрицы жесткости позволяет эффективно решать задачи достаточно большой размерности. В результате решения системы разрешающих уравнений определяются основные неизвестные в узлах расчетной сетки.

На этапе определения вторичных результатов для каждого элемента конструкции вычисляются напряжения, интенсивности и т.п. характеристики. Для определения этих характеристик, как правило, бывает достаточно значений основных неизвестных в узлах элемента.

В процессе численной оценки прочностных и жесткостных характеристик конструкции результаты получаются в виде сотен тысяч чисел даже для простой конструкции. Анализ такого большого числа данных невозможен без эффективной графической интерпретации.

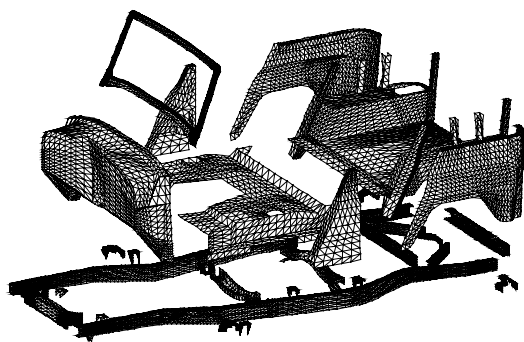


Рис. 1. Конструкция, представленная композицией подконструкций.

Далее будем полагать, что сложная конструкция может быть расчленена (рис. 1) на несколько связанных между собой подконструкций (подструктур), и рассмотрим одну из схем распараллеливания процесса получения расчетных оценок их прочностных и жесткостных характеристик – распараллеливания с конденсацией матрицы жесткости подконструкции (рис. 2).

Этот алгоритм основан на разделении основных неизвестных подконструкции на “внутренние” q_i и “внешние” q_s (внутренние неизвестные связаны с теми узлами сетки, которые не стыкуются с другими подконструкциями).

При использовании этой схемы данные для каждой из подконструкций готовятся изолировано. При этом может использоваться удобная для подконструкции локальная система координат, локальная система идентификаторов базовых элементов (узлов, линий подобластей, объемов), упрощается контроль данных, снижается вероятность ошибок. Кроме того, подготовка и отладка (генерация расчетной модели подконструкции с последующим графическим контролем) данных для сложных объектов может вестись несколькими расчетчиками на различных компьютерах.

После подготовки и отладки данных для подконструкции производится вычисление матриц жесткости и нагрузок и их конденсация, т.е. из системы разрешающих уравнений исключаются все внутренние неизвестные. Общепринятая процедура этого изложена в литературе [1]. При этом неизвестные группируются в компактные группы, а матрица жесткости K становится клеточной

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{is} \\ K_{si} & K_{ss} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_i \\ q_s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} P_i \\ P_s \end{Bmatrix}.$$

Уравнение равновесия конденсированной подконструкции будет иметь вид:

$$[K_{ss} - K_{si} K_{ii}^{-1} K_{is}] \{q_s\} = \{P_s - K_{si} K_{ii}^{-1} P_i\}.$$

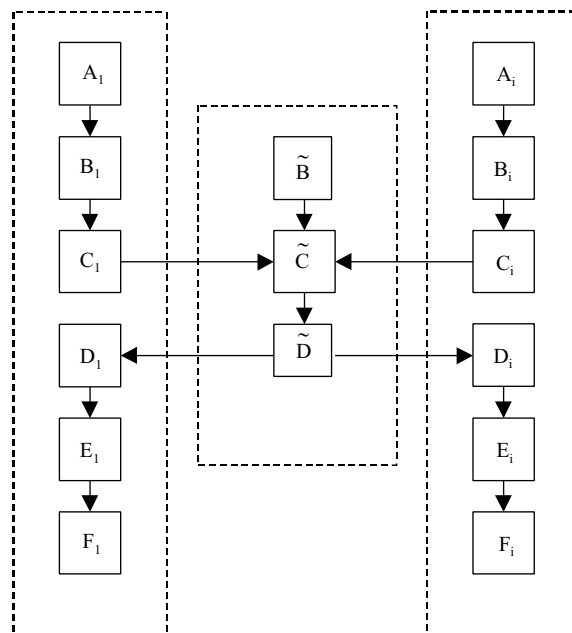


Рис. 2. Схема определения НДС с распараллеливанием: A_i – подготовка данных i -й подструктуры; B_i – генерация модели i -й подструктуры; C_i – формирование разрешающих уравнений i -й подструктуры и их конденсация; D_i – вычисление основных неизвестных в узлах i -й подструктуры; E_i – вычисление вторичных результатов i -й подструктуры; F_i – интерпретация результатов для i -й подструктуры; $\tilde{C}$ – формирование разрешающих уравнений структуры для внешних неизвестных; $\tilde{D}$ – определение внешних неизвестных структуры; $\tilde{B}$ – генерация и добавление элементов стыковки подструктур.

Выражение, стоящее в квадратных скобках слева, иллюстрирует технику построения конденсированной матрицы жесткости подконструкции. Из выражения в фигурных скобках справа ясен алгоритм построения конденсированного вектора нагрузок.

На наш взгляд, более алгоритмичным представляется следующий подход. Воспользуемся тем, что коэффициент k_{ij} матрицы жесткости представляет собой реакцию системы в направлении i -й степени свободы на единичное перемещение в направлении j -й степени свободы при условии нулевых перемещений в направлении остальных степеней свободы. Таким образом, последовательно задавая единичное смещение в направлении одной из “внешних” степеней свободы, и, закрепив остальные “внешние” степени свободы, можно вычислить коэффициенты конденсированной матрицы жесткости как реакции подконструкции в направлении “внешних” степеней свободы. Заметим, что коэффициенты конденсированной матрицы правых частей представляют собой реакции подконструкции в направлении “внешних” степеней свободы, когда все они закреплены, а на подконструкцию действует внешняя нагрузка.

При реализации описаной выше процедуры к диагональным членам матрицы жесткости, соответствующим “внешним” степеням свободы подконструкции,

добавляется достаточно большое число α – коэффициент штрафа ($\alpha \cong 10^{13}$). Матрица правых частей представляет собой $n + 1$ вектор размерностью, равной общему числу неизвестных подконструкции. Компонента первого из векторов, соответствующая первой из “внешних” степеней свободы, приравняется α , а остальные компоненты полагаются нулевыми. Аналогично, во втором векторе равной α принимается компонента, соответствующая второй из “внешних” степеней свободы, в третьем – третьей и т.д. Последний $n + 1$ вектор представляет собой обыкновенный вектор эквивалентных внешних нагрузок P .

Таким образом, для построения конденсированных матриц подконструкции, имеющей n “внешних” степеней свободы, требуется однократное решение уравнений метода конечных элементов (МКЭ) с $n + 1$ правой частью. При этом неизвестные не перегруппировываются, а матрица жесткости подконструкции K сохраняет компактную ленточную структуру. Отметим, что эта операция для каждой из подконструкций или группы подконструкций может проводиться на отдельном компьютере вычислительной сети и, таким образом, одновременно может осуществляться конденсация нескольких подконструкций.

После построения конденсированных матриц подконструкций они должны быть объединены. Объединение возможно провести различными способами, однако наиболее алгоритмичным нам представляется объединение подконструкций на основе метода штрафных функций на стадии формирования системы разрешающих уравнений для “внешних” неизвестных. Использование этого метода сводится к добавлению в матрицу жесткости конструкции жесткостей специальных конечных элементов

$$[k] = \alpha \begin{bmatrix} E & -E \\ -E & E \end{bmatrix},$$

связывающих степени свободы в стыкуемых узлах подконструкций.

После вычисления вкладов всех подконструкций в такую конденсированную систему, находятся “внешние” неизвестные, связанные с узлами стыковки подконструкций. Эта операция может быть проведена на любом из компьютеров сети и, при правильном расчленении структуры, не занимает много времени.

Далее процесс вычислений может быть опять распараллелен. Для каждой подконструкции вычисляются “внутренние” узловые неизвестные, затем находятся вторичные результаты и т.п. Заметим, что при описанной выше схеме конденсации для вычисления “внутренних” неизвестных не требуется заново проводить факторизацию матрицы жесткости подконструкции, а можно воспользоваться уже готовой факторизованной матрицей при условии её сохранения. Отмеченное обстоятельство существенно ускоряет процесс получения “внутренних” неизвестных. Серь-

езным недостатком этого алгоритма является то, что система разрешающих уравнений для конструкции теряет ленточную структуру. Однако для задач, в которых подструктуры связаны малым числом неизвестных, он может оказаться весьма эффективным.

Аналогично статической задаче распараллеливание с использованием метода подконструкций можно эффективно использовать для интегрирования уравнений движения $m\ddot{q} + Kq = R(t)$ в задачах определения динамической реакции. Рассмотрим этот подход на примере метода Ньюмарка [4].

Процедуру интегрирования уравнений движения методом Ньюмарка без распараллеливания представим схемой:

1. Задаются начальные условия $\ddot{q}_0$ и q_0 , выбирается шаг интегрирования по времени и вычисляются константы $a_0 \div a_7$.

2. Формируется эффективная матрица жесткости $\bar{K} = K + a_0 M$ и раскладывается на множители $\bar{K} = LDL^T$.

3. Для каждого шага по времени вычисляется $\bar{R}_{t+\Delta t} = R_{t+\Delta t} + M(a_0 + a_2 \dot{q}_t + a_3 \ddot{q}_t)$.

4. Находятся перемещения в момент $t + \Delta t$ из соотношения $\bar{K}q_{t+\Delta t} = \bar{R}_{t+\Delta t}$.

5. Вычисляются ускорения и скорости для момента $t + \Delta t$

$$\ddot{q}_{t+\Delta t} = a_0(q_{t+\Delta t} - q_t) - a_2 \dot{q}_t + a_3 \ddot{q}_t,$$

$$\dot{q}_{t+\Delta t} = \dot{q}_t + a_6 \ddot{q}_t + a_7 \ddot{q}_{t+\Delta t}.$$

6. Процесс повторяется, начиная с пункта 3.

При распараллеливании представим себе, что исследуемая конструкция может быть расчленена на несколько связанных между собой подструктур. Пусть K^i – матрица жесткости, а $\bar{R}_{t+\Delta t}^i$ вектор $\bar{R}_{t+\Delta t}$ для i -й подструктуры. Для каждой подструктуры в векторе неизвестных q^i будем различать “внутренние” q^{ii} и “внешние” q^{si} неизвестные. Очевидно, что матрицу жесткости K^i и вектор $\bar{R}_{t+\Delta t}^i$ при этом следует рассматривать как блочные

$$\begin{bmatrix} \bar{K}_{ii} & \bar{K}_{is} \\ \bar{K}_{si} & \bar{K}_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q^{ii}_{t+\Delta t} \\ q^{si}_{t+\Delta t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{R}^{ii}_{t+\Delta t} \\ \bar{R}^{si}_{t+\Delta t} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Исключим $q^{ii}_{t+\Delta t}$ из системы (1), тогда

$$[\bar{K}_{ss} - \bar{K}_{si} \bar{K}_{ii}^{-1} \bar{K}_{is}] q^{si}_{t+\Delta t} = \bar{R}^{si}_{t+\Delta t} - \bar{K}_{si} \bar{K}_{ii}^{-1} \bar{R}^{ii}_{t+\Delta t}.$$

Иначе

$$\tilde{K}_{ss}^i q^{si}_{t+\Delta t} = \tilde{R}_{t+\Delta t}^{si}, \quad (2)$$

$\tilde{K}_{ss}^i$ и $\tilde{R}_{t+\Delta t}^{si}$ суть конденсированная матрица жесткости и вектор нагрузок для i -й подконструкции соответственно. Отметим, что для получения конденсированных матриц более эффективным оказывается

подход, описанный при изложении алгоритма решения статической задачи.

Объединяя соотношения (2) с аналогичными соотношениями для других подконструкций, получим систему разрешающих уравнений для внешних неизвестных для времени $t = t + \Delta t$

$$\left[\sum \tilde{K}_{ss}^i \right] q_{t+\Delta t}^s = \sum \tilde{R}_{t+\Delta t}^{si}.$$

Из последнего выражения легко находятся $q_{t+\Delta t}^s$ и соответственно $q_{t+\Delta t}^{si}$ для каждой подконструкции.

Далее, для каждой подконструкции из соотношения

$$\bar{K}_{ii} q_{t+\Delta t}^{ii} = \bar{R}_{t+\Delta t}^{ii} - \bar{K}_{is} q_{t+\Delta t}^{si} \quad (3)$$

находится вектор $q_{t+\Delta t}^{ii}$. Более удобным, однако, представляется определение неразделенного вектора $q_{t+\Delta t}^i$ из соотношения $\bar{K}^i q_{t+\Delta t}^i = R^i$, в котором в качестве граничных условий использованы найденные значения $q_{t+\Delta t}^s$. Описанный алгоритм может быть представлен схемой, приведенной на рис. 3. При реализации этого алгоритма каждая подконструкция или группа подконструкций обрабатывается на отдельном компьютере. Действия, связанные с определением “внешних” неизвестных (этапы $\tilde{C}$, $\tilde{D}$, $\tilde{E}$ на рис. 3), могут проводиться как на отдельном компьютере, так и на одном из компьютеров обрабатывающих данные о подконструкциях. Таким образом, процесс интегрирования уравнений движения может быть распараллелен для выполнения на нескольких компьютерах вычислительной сети.

Описанные алгоритмы реализованы в рамках расчетного комплекса “АРКО” [2], ориентированного на использование в сетях ПЭВМ, работающих под управлением операционной системы Windows. Взаимодействие между компьютерами вычислительной сети обеспечивается на основе СОМ-технологии [3]. При этом на каждом компьютере сети имеется и программа-сервер, осуществляющая все операции МКЭ, и программа-клиент, осуществляющая управление вычислительным процессом. Интерфейс между клиентом и серверами обеспечивает удаленный вызов основных операций сервера, таких как пересылка и архивация данных, генерация модели, вычисление конденсированных матриц подконструкций, определение перемещений, усилий и напряжений. Заметим, что клиентская программа может задействовать любое (в рамках доступного) необходимое количество серверов, обеспечивая, например, одновременную конденсацию или вычисление перемещений и напряжений в нескольких подконструкциях.

Как пример статической задачи, рассмотрим определение НДС несущей системы автомобиля УАЗ-31512, расчетная схема которого показана на рис. 1. Эта расчетная схема включает в себя 33742 элемента

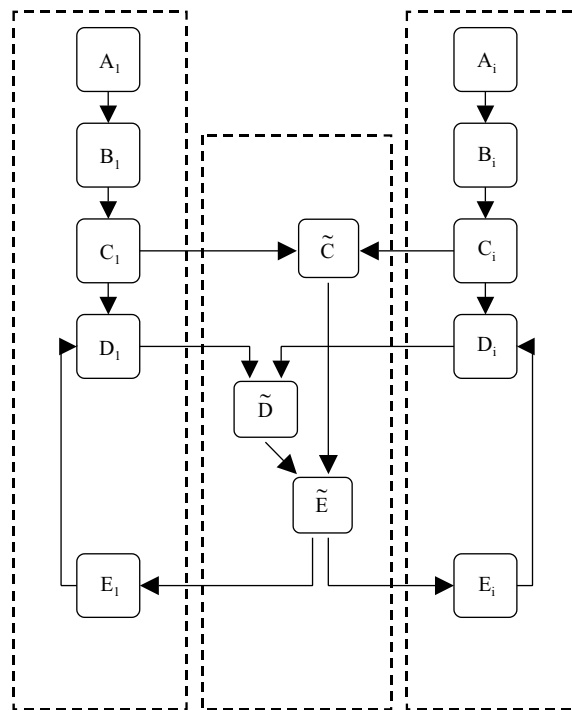


Рис. 3. Интегрирование уравнений движения методом Ньюмарка с распараллеливанием: A_i – подготовка данных для i -й подконструкции; B_i – генерация модели и задание начальных условий для i -й подконструкции; C_i – формирование матрицы K^i , её разложение на множители и вычисление конденсированной матрицы $\tilde{K}_{ss}^i$; D_i – формирование векторов $\bar{R}_{t+\Delta t}^i$ и $\bar{R}_{t+\Delta t}^{is}$ для i -й подконструкции; E_i – определение неизвестных q^i для i -й подконструкции; $\tilde{C}$ – вычисление конденсированной матрицы жесткости для конструкции $\tilde{K}_{ss}$; $\tilde{D}$ – вычисление конденсированного вектора $\tilde{R}_{t+\Delta t}^s$ для конструкции; $\tilde{E}$ – определение внешних неизвестных $q_{t+\Delta t}^s$ для конструкции.

балки и оболочки и насчитывает 103776 неизвестных при ширине ленты разрешающих уравнений 2748. Будем рассматривать эту конструкцию как две группы подконструкций: кузов и раму, связанные между собой в 8 точках.

Определение перемещений и напряжений в узлах сетки этой конструкции на одном компьютере К7 с частотой процессора 700 МГц без расчленения на подконструкции занимает 6 ч 49 мин 23 с. Предварительная конденсация подконструкций рамы (16927

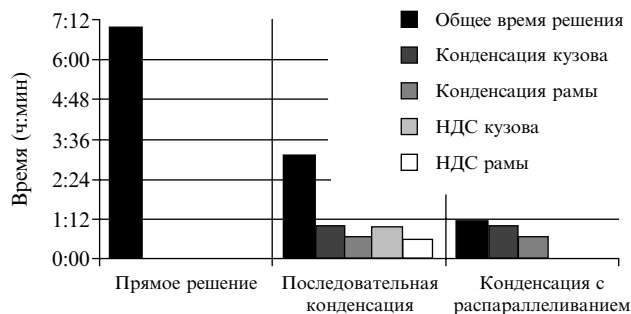


Рис. 4. Сравнение временных затрат на расчет с использованием различных процедур.

элементов, 53352 неизвестных, при ширине ленты 1062) и кузова (16834 элементов, 50478 неизвестных, при ширине ленты 1422) занимает соответственно 37 мин 9 с и 1 час 2 мин 49 с. Учитывая то, что “внешних” неизвестных в системе всего 48, их определение не требует заметных затрат времени. При проведении вычислений на двух компьютерах общее время решения задачи практически определяется временем конденсации кузова, так как для определения внутренних перемещений и напряжений в подконструкциях на соответствующих компьютерах уже имеется факторизованные матрицы. Затраты времени на решение той же задачи на одном компьютере с необходимостью факторизации матриц жесткости подконструкций при определении их НДС оказываются почти в 3 раза больше (3 ч 3 мин 59 с). Сказанное выше

проиллюстрировано на диаграмме, приведенной на рис. 4.

Литература

1. Постнов В.А.: Численные методы расчета судовых конструкций. Ленинград: Судостроение 1977.
2. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ашихмин А.Н.: Комплекс “АРКО” – современное состояние и опыт использования в автомобильной промышленности. Математическое моделирование в механике сплошных сред на основе методов граничных и конечных элементов, Труды XVIII международной конференции, том 3, стр. 254–259. СПб.: НИИХ СПбГУ 2000.
3. Дарахвелидзе П., Марков Е.: Программирование в DELPHI 4. Санкт-Петербург.: БХВ 1999.
4. Бате К., Вилсон Е.: Численные методы анализа и метод конечных элементов. Москва: Стройиздат 1982.

Математическая модель для анализа НДС рамы автомобиля “КамАЗ” и ее верификация

С. К. Черников, А. Н. Ашихмин

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Разработана математическая модель рамы автомобиля “КамАЗ” для оценки напряженно-деформированного состояния конструкции при её модернизации. Проведена верификация разработанной модели и выявлены области её не полного соответствия физической модели.

Введение

Современные методы математического моделирования позволяют решить большинство проблем, связанных с исследованием и модернизацией конструкции автомобиля, не прибегая к дорогостоящему физическому эксперименту. Их использование повышает количество получаемой полезной информации, сокращает сроки выполнения работ и существенно снижает их стоимость.

В настоящее время при проектировании, доводке и модернизации конструкции автомобилей практически все ведущие автомобильные фирмы мира широко используют математические методы. К сожалению, в отечественной практике проектирования и доводки автомобилей математические методы используются недостаточно.

Целью настоящего исследования была разработка уточненной геометрической и упруго-массовой модели рамы большегрузного автомобиля семейства “КамАЗ” для использования при совершенствовании существующей модели автомобиля и разработке новых модификаций на его базе. Методика построения математической модели рамы большегрузного автомобиля отрабатывалась на примере рамы одного из прототипов автомобиля “КамАЗ”. Работа выполнялась при финансовой поддержке ОАО “КамАЗ”.

Описание конструкции и модели

Рама автомобиля “КамАЗ” штампованная, клепанная, лестничного типа, состоит из двух лонжеронов переменного сечения, соединённых семью поперечинами. Лонжероны и большинство поперечин имеют открытое сечение швеллерного типа. Вторая и пятая поперечины имеют сечение типа двутавр, кроме того, пятая поперечина усилена косынками. Все элементы рамы выполнены из стального листа толщиной 6–8 мм.

Рама автомобиля “КамАЗ” и отдельные элементы крепления балансирной тележки при расчетах моделировались конечными элементами тонкой оболоч-

ки. Ось балансирной тележки и передние рессоры моделировались конечными элементами балки. Общий вид расчетной модели представлен на рис. 1.

Геометрия оболочечных элементов модели определялась срединными поверхностями соответствующих элементов конструкции. Геометрия балочных элементов задавалась линиями центров тяжести соответствующих элементов конструкции. Геометрия поперечин и лонжеронов рамы точно соответствовала чертежной документации. Геометрические модели опор и оси балансирной тележки, передних рессор и их опор были выполнены более упрощённо. Например, модель передних рессор описывала геометрию реальной конструкции только приблизительно – при ее разработке основное внимание уделялось соответствию жесткостных характеристик модели жесткостным характеристикам конструкции. Материал и характеристики сечения балки рессоры выбирались из соображений того, чтобы отношение прогиба в центре рессоры к величине приложенной в этой точке нагрузки было равно экспериментально определенному значению 40 кг/мм. Отметим, что при моделировании конструкции не учитывалась жесткость надрамника и грузовой платформы. Влияние грузовой платформы сводилось к заданию распределённых

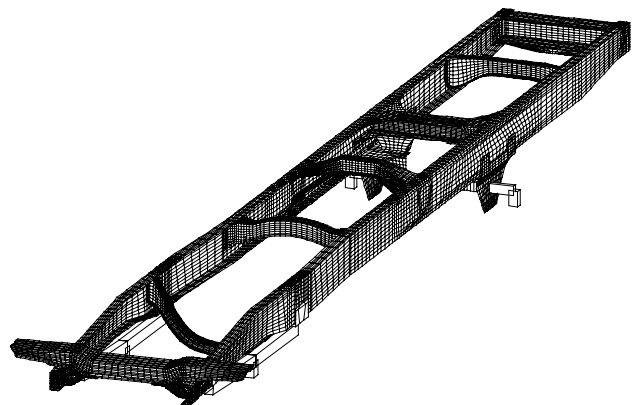


Рис. 1. Общий вид расчетной модели в виде сетки конечных элементов.

нагрузок, которые создавались грузовой платформой с грузом, на участках полок лонжеронов, взаимодействующих с грузовой платформой.

Модель рамы автомобиля представлялась как совокупность 35 подконструкций, соответствующих основным сборочным единицам рамы автомобиля “КамАЗ”. Подконструкции считались соединенными в точках, совпадающих с осями соответствующих болтовых либо заклепочных соединений. Так как геометрия подконструкций определялась положением их срединных поверхностей, в точках соединения подконструкции отстояли друг от друга на расстояния, равные половине суммы толщин соединяемых деталей. В соединяемых точках предполагалось отсутствие относительных перемещений подконструкций.

Модель рамы включала в себя 21484 конечных элемента, система разрешающих уравнений насчитывала 134093 степени свободы.

Верификация модели

Для оценки корректности разработанной модели рамы был выполнен ряд расчетов, воспроизводящих условия натурных экспериментов, проведенных в НТЦ “КамАЗ”, и сделано сравнение экспериментальных и расчетных оценок характеристик напряженно-деформированного состояния (НДС) рамы. Было рассмотрено два варианта закрепления и нагружения рамы – кручение и изгиб.

Расчетно-экспериментальные исследования НДС рамы автомобиля “КамАЗ” при кручении

При кручении рама закреплялась в четырех точках, соответствующих точкам крепления передних рессор к переднему мосту и точкам навески балансира тележки на ось балансира тележки. В точках крепления передних рессор задавались вертикальные перемещения ± 4.143 см, обеспечивающие поворот балки переднего моста вокруг продольной оси автомобиля на угол 5° . Предполагалось, что на конструкцию действует вертикальное ускорение величиной 1000 см/сек^2 , а масса полезной нагрузки и грузовой платформы (10995 кг) создаёт равномерное нормальное давление величиной 24.82 кг/см^2 на верхние полки лонжеронов на $1/8$ их ширины со стороны стенок лонжеронов. Массы остальных элементов конструкции рамы и агрегатов при этом не учитывались.

На рис. 2 приведены изополя интенсивностей напряжений в конструкции рамы при кручении, полученные расчетным путем. Анализ этих изополей позволяет заключить, что при кручении рамы автомобиля “КамАЗ” в регулярных областях конструкции расчетные оценки напряжений превышают величины

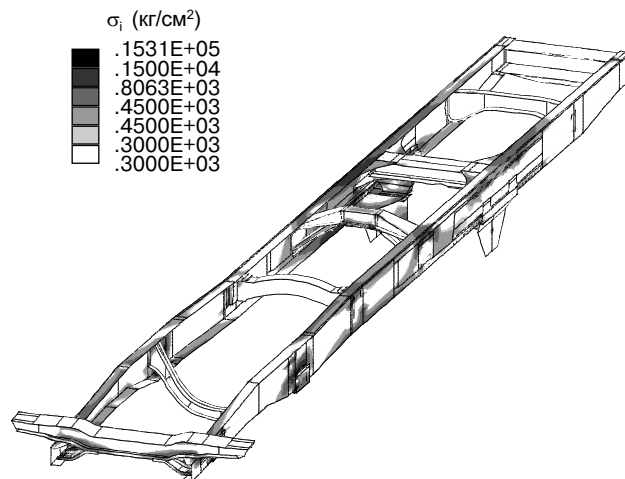


Рис. 2. Изополя интенсивностей напряжений в конструкции рамы при кручении.

$600\text{--}700 \text{ кг/см}^2$ только в районе опор передних рессор и в области пятой поперечины.

Сравнивая результаты расчетных и экспериментальных оценок напряжений в раме при кручении (рис. 3), отметим следующее. В передней части рамы (до четвертой поперечины) эти результаты хорошо согласуются, различаясь на $20\text{--}40\%$. В задней части рамы расчетные и экспериментальные оценки уровней напряжений существенно различаются, не совпадая даже по знаку. Столь большое расхождение результатов расчета и эксперимента в задней части рамы объясняется, главным образом, тем, что при моделировании конструкции не учитывалась жесткость грузовой платформы и недостаточно точно моделировалась система навески балансира тележки. При кручении эти элементы конструкции оказывают значительное влияние на НДС именно в задней части рамы.

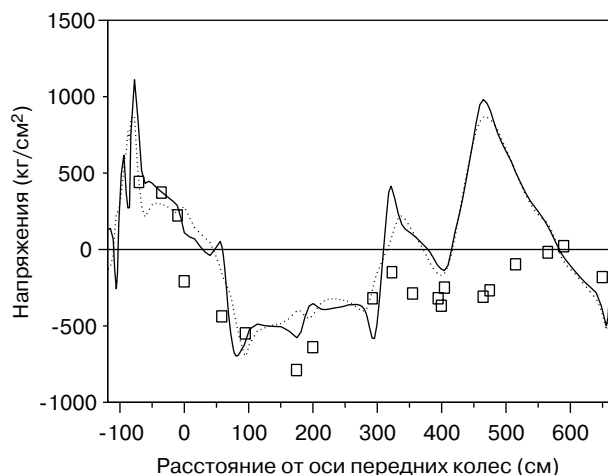


Рис. 3. Распределение нормальных напряжений по кромке нижней полки лонжерона при кручении. □ Эксперимент, сплошная линия – внешняя поверхность полки, пунктирная линия – внутренняя поверхность полки.

Сказанное выше относилось к регулярным областям конструкции рамы. Однако подавляющая часть разрушений рамы происходит в областях, близких к узлам соединения лонжеронов рамы с поперечинами или кронштейнами, где определение уровней напряжений экспериментальными методами весьма затруднено, а порой и вовсе невозможно. Использование расчетных методов позволяет избежать этих трудностей.

Рассмотрим напряженное состояние лонжерона в области крепления опор передней рессоры. Отметим, что максимальные значения интенсивности напряжений в конструкции в соответствии с расчетными оценками возникают именно в этой области (положение точек крепления опор C_i показано на рис. 4, значения интенсивности напряжений в них – в таблице 1).

Отметим, что чрезмерно высокая максимальная интенсивность напряжений в точках C_i в значительной степени обусловлена упрощенным моделированием взаимодействия лонжерона и кронштейнов передней рессоры в соединительных узлах. Во-первых, при моделировании предполагалось, что в узлах соединения взаимодействие подконструкций происходит в точках, соответствующих пересечению оси заклёпки со срединными поверхностями соединяемых подконструкций (лонжерон и кронштейн рессоры). На самом же деле, взаимодействие происходит по площади, соизмеримой с диаметром головки заклёпочного соединения. Во-вторых, не учитывалось контактное взаимодействие кронштейна рессоры и полки лонжерона, что особенно существенно для кронштейнов, которые прижимаются к полке. Попытка учесть все особенности взаимодействия подконструкций привела бы к чрезмерному усложнению задачи, затруднив определение общей картины НДС конструкции. В то же время, пики напряжений носят сугубо локальный

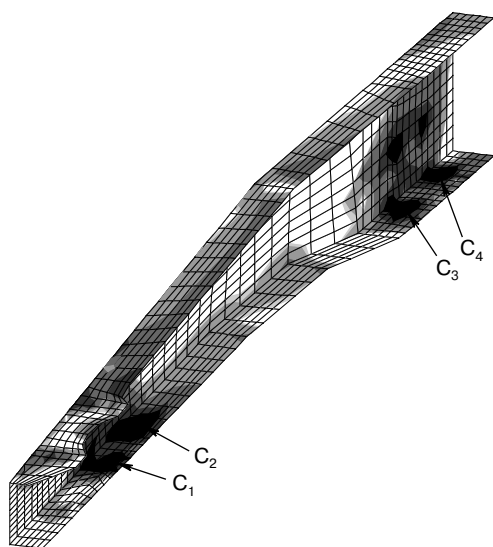


Рис. 4. Изополю интенсивности напряжений в лонжероне в области крепления передней рессоры.

Таблица 1. Уровень интенсивности напряжений в области крепления передней рессоры σ_i – в узле соединения, σ_i^* – на расстоянии 20 мм от оси узла.

Точка	σ_i (кг/см ²)	σ_i^* (кг/см ²)
C_1	15309	3000
C_2	10239	3000
C_3	12527	2000
C_4	10369	1500

характер и на некотором удалении от точек соединения (не превышающем 20 мм и соизмеримом с диаметром головки соединительного элемента) интенсивность напряжений не превышает 1500–3000 кг/см². Есть основание полагать, что этот уровень напряжений и соответствует действительности.

Несмотря на то, что эти напряжения не превышают предела текучести для материала лонжерона (4500 кг/см²), их уровень достаточно высок и может вызвать разрушение конструкции при многократном нагружении. Последнее подтверждается результатами экспериментальных исследований рамы при циклическом нагружении, приведенными в таблице 2.

Отметим, что в точках соединения лонжеронов с поперечинами расчетные оценки уровней напряжений в стенках лонжеронов повышается незначительно. Исключением являются узлы крепления пятой поперечины, вблизи которых эти оценки превышают 1500 кг/см². Примечательно, что при экспериментальных исследованиях рамы при многократном нагружении в области пятой поперечины наблюдалось усталостное разрушение лонжеронов при наработке $130 \cdot 10^3$ циклов.

В области крепления третьей поперечины расчетные оценки напряжений в лонжероне не превышают 600–1000 кг/см². В то же время, при проведении экспериментальных исследований имело место усталостное разрушение лонжерона в этой области. Скорее всего, это противоречие объясняется тем, что в расчетной модели отсутствовал кронштейн крепления запасного колеса, установленный в этом месте, и не учитывались массовые нагрузки, обусловленные массой запасного колеса.

На рис. 5 приведено распределение расчетных оценок интенсивностей напряжений в конструкции поперечины № 1. Точкам А на этих рисунках соответствуют локальные экстремумы напряжений вблизи узлов соединения элементов поперечины между собой и с лонжероном. Точки В соответствуют экстремумам напряжений, обусловленных другими причинами. Отметим, что расчетные оценки уровня напряжений в элементах первой поперечины при кручении, достаточно высоки и превышают 2500 кг/см². К сожалению, при проведении экспериментальных исследований в элементах первой поперечины напряжения не контролировались и, в этой связи, отсутствует воз-

Таблица 2. Зоны разрушения конструкции рамы при циклическом нагружении.

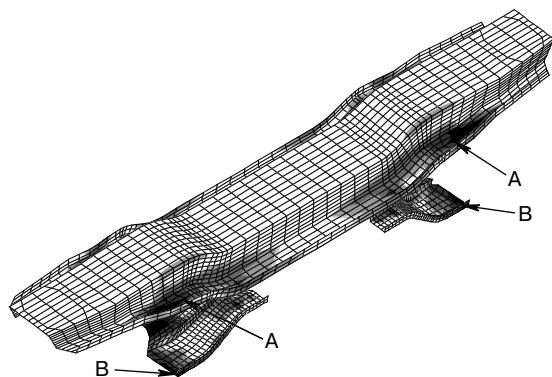
№	Дефект элемента рамы	Количество циклов нагружений до появления дефекта у рамы (тыс.)		Расчетная оценка интенсивности напряжений (кг/см ²)
		Незакаленные лонжероны	Закаленные лонжероны	
1	Трещины второй поперечины в зонах крепления к лонжеронам	35	30	1900
2	Трещины кронштейнов третьей поперечины	35	30	2000
3	Разрушение заклепок крепления верхних косынок к пятой поперечине	35	35	750
4	Разрушение второй поперечины и кронштейнов третьей поперечины	80	100	1900–2000
5	Разрушение заклепок крепления задней поперечины к лонжеронам	85	120	300
6	Трещина лонжерона в зоне третьей поперечины	90	130	750
7	Трещина лонжерона в зоне передней рессоры подвески:			
	в районе переднего кронштейна	90	—	3000
	в районе заднего кронштейна	—	180	2000
8	Трещина лонжерона за кронштейном оси балансирной подвески	—	120	850–900
9	Трещина средней косынки пятой поперечины	105	60	900–1000
10	Трещина верхней косынки пятой поперечины	—	105	850–900
11	Трещины шестой поперечины	—	105	1000
12	Разрушение шестой поперечины	—	120	1000
13	Разрушение лонжерона:			
	в зоне третьей поперечины	115	216	750
	за кронштейном оси балансирной тележки	—	130	900

возможность непосредственной проверки достоверности численных оценок. В то же время, так как при циклическом нагружении разрушений первой поперечины не наблюдалось, можно предположить, что расчетные оценки НДС элементов первой поперечины несколько завышены. Причиной этого, возможно, является влияние жесткости двигателя и его элементов крепления, которые при моделировании кручения рамы не учитывались. Косвенным аргументом существенности этого влияния может служить факт разрушения кронштейна крепления двигателя при циклическом закручивании конструкции, свидетельствующий

о наличии значительных реакций в узлах крепления двигателя.

На рис. 6 приведены изополя интенсивности напряжений во второй поперечине. Точкам А на этом рисунке соответствуют точки соединения поперечины с лонжероном. Отметим, что максимальные значения напряжений в этих точках достигают 5559 кг/см². Однако уровень этих напряжений быстро падает по мере удаления от точек соединения, и на расстоянии 20 мм он не превышает 1000–1200 кг/см². Примерно такого же уровня напряжения (1900–1200 кг/см²) возникают и в точке В, в которой геометрия поперечины резко изменяется. Отметим, что при циклическом нагружении в зонах крепления второй поперечины к лонжеронам возникали трещины, приводящие к её разрушению.

На рис. 7 показаны изополя интенсивности напряжений в поперечине № 3 и кронштейнах её крепления к лонжерону. Максимальные значения интенсивности напряжений, возникающих в точках крепления кронштейнов к лонжеронам (точки А), достигают 4427 кг/см². Эти напряжения быстро падают и на расстоянии 20 мм от точки соединения не превышают 1000–1500 кг/см². При этом в точках с резким изменением геометрии конструкции (точки В) эти напряжения лежат в пределах 1200–3847 кг/см². Верхние оценки этих напряжений могут оказаться несколько завышенными, так как при моделировании не прини-

**Рис. 5.** Изополя интенсивности напряжений в элементах первой поперечины.

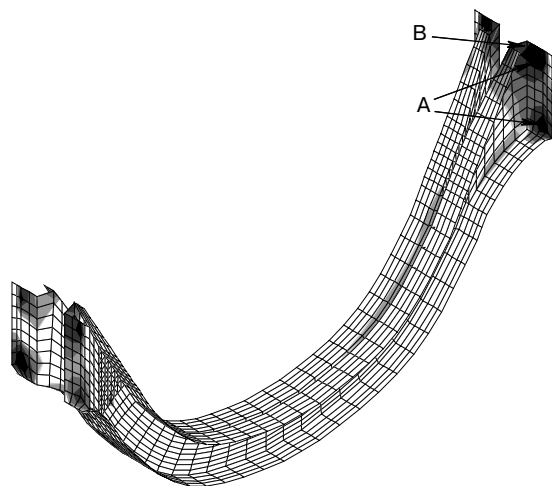


Рис. 6. Изополя интенсивности напряжений в элементах второй поперечины.

мались во внимание скругления с малыми радиусами. Но и при этих оговорках уровень напряжений в кронштейнах следует считать достаточно высоким, так как при их изготовлении используется менее прочный материал с пределом текучести 2500 кг/см^2 . Подтверждением сказанного является появление трещин в этих кронштейнах при наработке в процессе испытаний $35 \cdot 10^3$ циклов нагружения.

Как показывает анализ, в окрестности точек крепления поперечины № 4 к лонжерону расчетные оценки интенсивности напряжений оказываются того же порядка, что и в поперечине № 2. В то же время, при испытаниях её разрушения не фиксировались. Возможно, это свидетельствует о том, что в районе поперечины № 4 сказывается влияние дополнительной жесткости грузовой платформы, которая в нашей расчетной модели не учитывалась, но возможны и иные причины.

На рис. 8 показано распределение интенсивностей напряжений в поперечине № 5 при кручении. Точкам А соответствуют экстремальные значения напряжений, возникающих в узлах соединения поперечины с лонжеронами. Величины напряжений в точках А и на расстоянии 20 мм от них приведены в таблице 3.

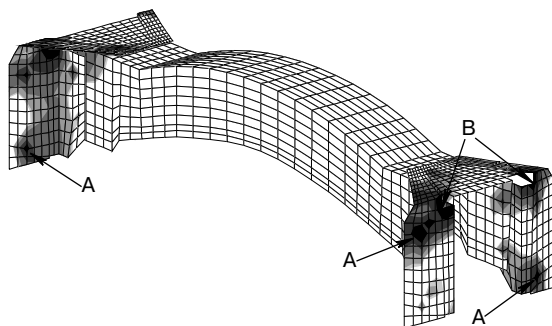


Рис. 7. Изополя интенсивности напряжений в элементах третьей поперечины.

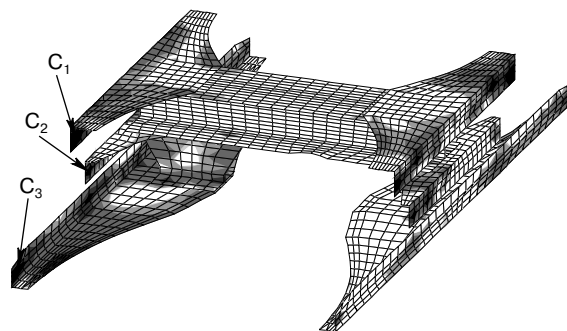


Рис. 8. Изополя интенсивности напряжений в элементах пятой поперечины.

Таблица 3. Уровень интенсивности напряжений в элементах пятой поперечины σ_1 – в узле соединения, σ_1^* – на расстоянии 20 мм от оси узла.

Точка	σ_1 (кг/см ²)	σ_1^* (кг/см ²)
A ₁	5983	2500
A ₂	4712	1200–1300
A ₃	7171	2000

Отметим, что вблизи узлов крепления пятой поперечины расчетные оценки интенсивности напряжений достаточно высоки. Достоверность этих оценок качественно подтверждается наличием усталостных разрушений в районе поперечины № 5, зафиксированных при экспериментальных исследованиях рамы.

Расчетные оценки напряжений в поперечинах № 6 и № 7 показали их существенно меньшую нагруженность по сравнению с остальными. В то же время, в процессе физического эксперимента при циклическом нагружении в поперечине № 6 возникли трещины, приведшие к её разрушению. Последнее косвенно свидетельствует о наличии в конструкции этой поперечины напряжений, соизмеримых с напряжениями в остальных поперечинах. Несоответствие расчетных и экспериментальных оценок может быть объяснено, с одной стороны, завышенной жесткостью модели узла навески балансирной тележки, а с другой – тем, что при моделировании эксперимента не учитывалась жесткость грузовой платформы. Кроме того, возможно на результаты физического эксперимента существенно сказались напряжения, возникающие вследствие колебаний рамы в своей плоскости под действием динамических нагрузок.

Таким образом, при кручении расчетные оценки максимальных уровней напряжений (до 7100 кг/см^2) имеют место исключительно в узлах крепления поперечин к лонжеронам. Эти оценки отчасти обусловлены упрощенным моделированием взаимодействия подконструкций в соединительных узлах. Во-первых, при моделировании мы считали, что подконструкции соединены в точках пересечения оси заклёпки или

болта с серединной поверхностью оболочек подконструкций. Во-вторых, не учитывали контактный характер взаимодействия подконструкций в области их стыковки. На самом же деле, взаимодействие подконструкций осуществляется по некоторой площади не меньшей, чем площадь поперечного сечения болта или заклёпки (а с учетом контактного взаимодействия существенно большей). Учет всех тонкостей такого взаимодействия в модели привел бы к ее значительному усложнению, затруднив определение общей картины НДС. В то же время, на некотором удалении от точек соединения (не превышающем 20 мм и соизмеримом с диаметром головки соединительного элемента) уровень интенсивности напряжений не превышает величины 1200–2500 кг/см². Экспериментальные результаты дают основание полагать, что этот уровень напряжений и соответствует действительности.

Расчетно-экспериментальные исследования НДС рамы автомобиля “КамАЗ” при изгибе

При изгибе рама закреплялась в четырех точках, соответствующих точкам крепления передних рессор к переднему мосту и точкам навески балансирной тележки на ось балансирной тележки.

В предположении, что на конструкцию действует вертикальное ускорение величиной 1000 см/с², масса полезной нагрузки и грузовой платформы (10995 кг) создавала нормальное равномерное давление на верхние полки лонжеронов на 1/8 их ширины со стороны стенок лонжеронов равное 24.82 кг/см². Масса остальных элементов конструкции рамы и агрегатов не учитывалась.

На рис. 9 приведены изополя интенсивностей напряжений в конструкции рамы при изгибе. Из анализа изополей следует, что при изгибе рамы автомобиля “КамАЗ” уровень напряжений в регулярных обла-

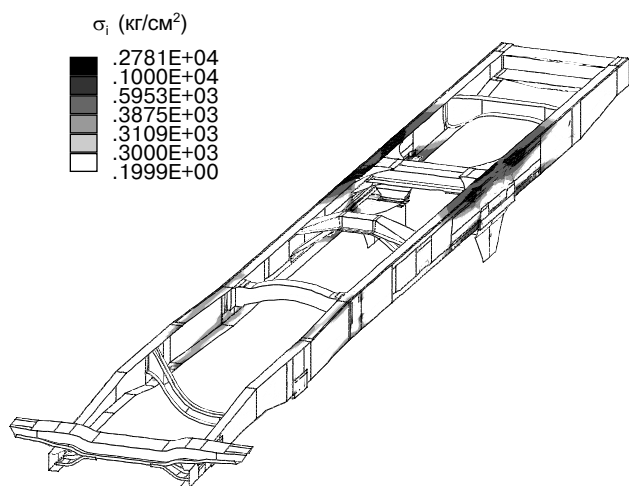


Рис. 9. Изополя интенсивностей напряжений в конструкции рамы при изгибе.

стях конструкции не превышает величины 600–700 кг/см². При этом наиболее высокие уровни интенсивности напряжений имеют место в верхних полках лонжеронов в районе пятой поперечины.

Сравнивая расчетные и экспериментальные оценки напряжений (рис. 10), отметим следующее. В задней части рамы результаты расчета с достаточной точностью соответствуют результатам эксперимента. В зоне максимальных напряжений, в районе пятой поперечины, расхождение результатов расчета с результатами эксперимента по напряжениям не превышает 15–30%. В то же время, в передней части рамы, в районе второй и третьей поперечин, напряжения отличаются даже по знаку.

За второй поперечиной, в районе излома лонжерона в плоскости рамы, полученный расчетом уровень напряжений достигает величины 500 кг/см², что сопоставимо с максимальными уровнями нагруженности полки лонжерона в районе пятой поперечины. В то же время, в этой области экспериментальные замеры не фиксируют сколь либо значительных уровней напряжений.

Одной из основных причин плохого соответствия результатов расчетных и экспериментальных оценок в передней части рамы является недостаточно полная информация об условиях физического эксперимента, например, условия закрепления балки переднего моста. В связи с этим, некоторые экспериментальные оценки НДС рамы оказываются трудно объяснимыми, например, сжатая нижняя полка лонжерона между первой и третьей поперечиной.

Основной причиной неполного соответствия результатов расчетных и экспериментальных оценок в задней части рамы является то, что в модели не учитывался контактный характер взаимодействия грузовой платформы с лонжеронами и жесткость грузовой

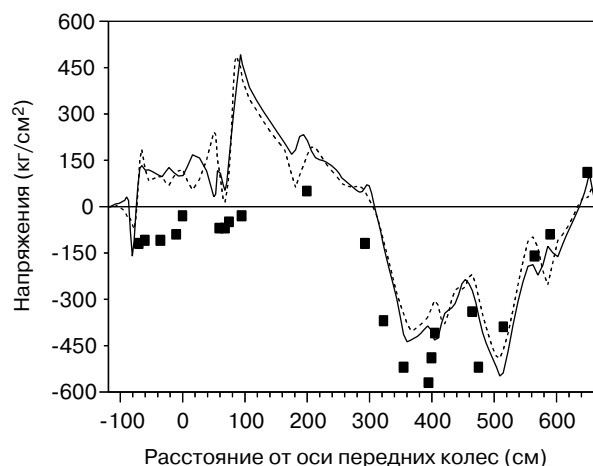


Рис. 10. Распределение интенсивности напряжений по кромке нижней полки лонжерона при изгибе. ■ Эксперимент, сплошная линия – внешняя поверхность полки, пунктирная линия – внутренняя поверхность полки.

платформы. Приблизительно моделировались кронштейны крепления балансирной тележки к раме. Кроме того, отсутствовала информация о реальном распределении нагрузки по длине грузовой платформы.

Как и при кручении, при изгибе в поперечинах рамы напряжения возникают практически только вблизи точек соединения поперечин с лонжеронами. Исключением является поперечина № 5, в которой заметные уровни напряжений наблюдаются в значительной части конструкции. Напряжения эти невелики ($200\text{--}700\text{ кг/см}^2$) и превышают уровень 700 кг/см^2 только вблизи крепежных элементов. Отметим, что в узлах крепления поперечины № 5 расчетные оценки интенсивности напряжений максимальны и достигают 2780 кг/см^2 . Однако, эти напряжения носят сугубо локальный характер и интенсивно падают по мере удаления от центра узла крепления. Уже на расстоянии 20 мм от центра узла крепления значения интенсивности напряжений не превышают 700 кг/см^2 .

Помимо пятой поперечины, заметные напряжения вблизи узлов крепления возникают во второй и третьей поперечинах. Максимальное значение интенсивности напряжений в третьей поперечине достигает 1700 кг/см^2 , а во второй 1220 кг/см^2 . Как и в поперечине № 5, эти напряжения носят локальный характер и быстро уменьшаются по мере удаления от центра узла крепления.

Таким образом, при изгибе расчетные оценки максимальных уровней напряжений в $1200\text{--}2700\text{ кг/см}^2$ имеют место исключительно в узлах крепления поперечин к лонжеронам. Как и при кручении, эти оценки отчасти обусловлены упрощенным моделированием взаимодействия подконструкций в соединительных

узлах. На некотором удалении от точек соединения, не превышающим 20 мм и соизмеримым с диаметром головки соединительного элемента, уровень интенсивности напряжений не превышает величины 700 кг/см^2 . Есть основание полагать, что этот уровень напряжений и соответствует действительности.

Заключение

Средствами расчетного комплекса “Арко” [1] разработана математическая модель рамы автомобиля “КамАЗ”, позволяющая проводить качественную оценку НДС конструкции при совершенствовании существующей модели автомобиля и разработке новых модификаций на его базе. Проведена верификация разработанной модели и выявлены области её неполного соответствия физической модели. Высказаны предположения об основных причинах неадекватного описания НДС рамы и сформулированы пути дальнейшего совершенствования модели.

Авторы выражают глубокую благодарность Павленко П.Д. за предоставленные материалы экспериментальных исследований рамы.

Литература

1. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ашихмин А.Н.: Комплекс “АРКО” – современное состояние и опыт использования в автомобильной промышленности. Математическое моделирование в механике сплошных сред на основе методов граничных и конечных элементов: Труды XVIII международной конференции, том 3, стр. 254–259. СПб.: НИИХ СПбГУ 2000.

Математическая модель несущей системы автомобиля “Ока” и ее использование при выборе направлений модернизации конструкции

С. К. Черников, Ю. В. Садчиков, Б. В. Ильченко

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

На основе метода конечных элементов разработана математическая модель несущей системы автомобиля «Ока», использование которой предполагается при проектировании модификаций базовой конструкции. Проведена экспериментальная верификация разработанной модели.

Введение

Создание модификаций на базе существующей модели автомобиля предполагает конструктивные изменения, которые могут оказать значительное влияние на напряженно-деформированное состояние (НДС) несущей системы автомобиля. Эффективным средством для анализа этого влияния и оценки его последствий является математическое моделирование конструкции, которое позволяет избежать неоправданных затрат финансовых и временных ресурсов при проектировании модификации автомобиля на основе уже существующей базовой модели. Для проведения такой работы необходимо иметь надежную и достоверную расчетную схему базовой модели автомобиля. Надежность должна быть обеспечена применением современных, фундаментально обоснованных вычислительных технологий. Достоверность – проведением соответствующих экспериментальных исследований и сопоставлением их результатов с расчетными. Данная работа посвящена созданию математической модели несущего кузова автомобиля “Ока” для последующего анализа НДС возможных модификаций конструкции (рис. 1).



Рис. 1. Автомобиль “Ока” с кузовом “кабриолет”.

Краткое описание конструкции и расчетная модель

Кузов серийного варианта автомобиля “Ока” представляет собой трехдверный цельнометаллический кузов типа универсал, изготовленный из штампованных листовых панелей толщиной преимущественно 0.8 мм, соединенных точечной сваркой. В местах крепления агрегатов кузов имеет местные усиления. Конструкция кузова показана на рис. 2.

Для получения достоверных оценок НДС такой сложной конструкции, как современный автомобиль, единственной альтернативой экспериментальным исследованиям является её расчет методом конечных элементов (МКЭ). Конечноэлементная модель конструкции включает в себя описание геометрии, определение физико-механических свойств структурных элементов, задание граничных условий и нагрузок, действующих на конструкцию. При разработке модели кузова автомобиля “Ока” все перечисленные действия, а также все вычисления, анализ и документирование результатов проводились средствами вычислительного комплекса “Арко” [6].

При разработке расчетной модели несущая система автомобиля рассматривалась как композиция из

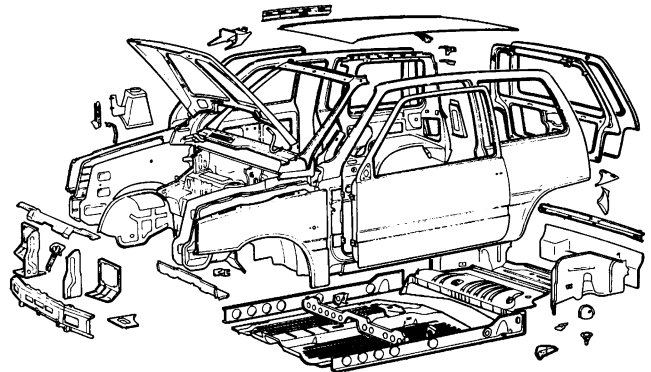


Рис. 2. Конструкция кузова автомобиля “Ока”.

44 подконструкций. При этом навесные элементы (задняя и боковые двери, капот) в общую расчетную схему кузова не включались, а рассматривались отдельно.

При использовании препроцессора системы “Ар-ко” основным элементом описания геометрии каждой подконструкции автомобиля служит базовая линия, проходящая через необходимое число базовых узлов и аппроксимируемая кубическим сплайном. Радиус-вектор $\mathbf{R}$, определяющий линию, описывается соотношением:

$$\mathbf{R}(p) = \frac{\mathbf{S}_i(p_{i+1} - p)^3}{6h_i} + \frac{\mathbf{S}_{i+1}(p - p_i)^3}{6h_i} + \left(\frac{\mathbf{R}_i}{h_i} - \frac{\mathbf{S}_i h_i}{6} \right) (p_{i+1} - p) + \left(\frac{\mathbf{R}_{i+1}}{h_i} - \frac{\mathbf{S}_{i+1} h_i}{6} \right) (p - p_i), \quad (1)$$

в котором p – некоторый параметр, а неизвестные кривизны $\mathbf{S}_i$ определяются из условий гладкости кривой. Поверхность конструкции представляется совокупностью заданных по Кунсу произвольных пространственных трех- и четырехугольных поверхностей Ω с криволинейными границами, определяемыми базовыми линиями. В случае треугольной подобласти радиус вектор её точек определяется соотношением

$$\mathbf{R}(q, p) = \mathbf{R}_{12}(1 - p) + \mathbf{R}_{13}(1 - q) + \mathbf{R}_{23}(p + q) + (p + q - 1)\mathbf{R}_1 - q\mathbf{R}_2 - q\mathbf{R}_3, \quad (2)$$

а в случае четырехугольной подобласти – соотношением

$$\mathbf{R}(q, p) = (1 - p)\mathbf{R}(q, p = 0) + p\mathbf{R}(q, p = 1) + (1 - q)\mathbf{R}(q = 0, p). \quad (3)$$

Эти уравнения ставят в соответствие точкам областей Ω точки единичного квадрата Ω_0 в пространстве параметров p и q . Выбрав в Ω_0 параметрические координаты узлов и построив в нем сетку, с помощью (2) и (3) получим её отображение в физическое пространство поверхности подконструкции.

Ячейкам сетки на линиях и поверхностях созданной таким образом геометрической модели приписываются необходимые физико-механические свойства, т.е. назначается тип конечного элемента. Все подконструкции кузова моделировались конечными элементами оболочки. Плоские панели моделировались четырехугольными элементами, остальные – треугольными. В качестве треугольных элементов использовалась композиция изгибаемой треугольной пластины Зенкевича [1] и треугольного элемента мембраны с постоянными напряжениями [1]. Четырехугольный элемент был составлен из произвольной четырехугольной изгибаемой пластины [2] и билинейного четырех-

угольного элемента мембраны [3]. Для использования этих композиций в компланарных системах в оба элемента вводилась жесткость фиктивного поворота в плоскости $[K^\theta]$. Для треугольного элемента при этом использовались соотношения, заимствованные из [4]. В четырехугольных элементах предполагалось, что

$$[K^\theta] = \alpha E h S \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix}.$$

В этом соотношении E – модуль упругости материала, S и h – площадь и толщина элемента соответственно, коэффициент α принимался равным 0.01.

Масса материала конструкции считалась распределенной по поверхностям подконструкций. Массы агрегатов (двигатель, топливный бак, запасное колесо и пр.) и полезная нагрузка (массы водителя, пассажиров и багажа) считались сосредоточенными в узлах. На рис. 3 показаны подконструкции модели кузова автомобиля “Ока”. Для наглядности некоторые подконструкции объединены в группы.

Для построения системы разрешающих уравнений элементы в пределах подконструкции и подконструкции в точках их стыковки с другими подконструкциями должны быть объединены. Объединение элементов в пределах подконструкции проводится обычным суммированием матриц жесткости элементов. При объединении подконструкций перемещения q объединяемых узлов M и M' подконструкций связывались соотношениями типа

$$q' = Tq, \quad (4)$$

где T – линейный оператор, определяемый видом условий объединения.

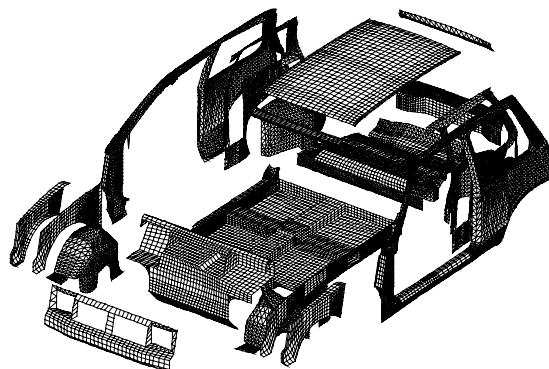


Рис. 3. Подконструкции модели кузова автомобиля “Ока”.

Прямая подстановка этих соотношений в систему разрешающих уравнений нарушила бы симметрию матрицы жесткости конструкции. Для сохранения симметрии воспользуемся методом штрафных функций [5], который очень эффективен и удобен применительно к МКЭ.

Определим модифицированный функционал Лагранжа $\pi_1(q)$ по правилу

$$\pi_1(q) = \pi(q) + \alpha \int_S (q' - Tq)^T (q' - Tq) dS, \quad (5)$$

где $p(q)$ – исходный функционал Лагранжа, α – большое число, называемое параметром штрафа (в нашем случае параметр штрафа принимался равным 10^{13}). Очевидно, что стационарное значение функционала $p_1(q)$ соответствует приближенному удовлетворению как уравнений равновесия конструкции, так и дополнительным условиям (4). При этом, чем больше величина параметра штрафа, тем точнее удовлетворяются дополнительные условия. Отметим, что в дополнительный член в (5) входят только перемещения по связываемым степеням свободы.

Дополнительный член функционала (5) можно рассматривать как энергию некоторых специальных двухузловых конечных элементов. Для получения матрицы жесткости такого “элемента связи” перепишем выражение (4) в виде

$$[E - T] \begin{Bmatrix} q' \\ q \end{Bmatrix} = 0, \quad (6)$$

где E – единичная матрица, совпадающая по размерности с q . Обозначим $[D] = [E - T]$. Вектор перемещений “элемента связи”

$$\{\tilde{q}\} = \begin{Bmatrix} q' \\ q \end{Bmatrix}$$

включает в себя перемещения двух узлов, на которые накладывается условие (4), включая в общем случае как поступательные, так и вращательные компоненты. Тогда (6) примет вид $[D]\{\tilde{q}\} = 0$. Матрицу жесткости “элемента связи” при этом можно записать в виде $[\tilde{K}] = \alpha[D]^T[D]$, а объединение подконструкций сведется к добавлению в ансамбль элементов такой матрицы для каждой пары стыкуемых узлов.

В расчетном комплексе “Арко” при формировании вектора правых частей системы разрешающих уравнений внешние нагрузки могут задаваться либо для всей конструкции (ускорения), либо приписываться узлам сетки (сосредоточенные силы и моменты), либо распределяться по поверхностям, образующим конструкцию (давление).

Однородные граничные условия реализуются исключением соответствующих степеней свободы конструкции из общего числа неизвестных системы, а

для задания неоднородных граничных условий используются специальные одноузловые граничные элементы.

Расчетная модель включала в себя 35061 элемент. Система разрешающих уравнений содержала 130954 неизвестных при ширине ленты 2226. Время, необходимое для определения НДС конструкции на ПЭВМ Pentium-II/350, равно 4 ч.

Верификация модели кузова

Для проведения верификации расчетной модели кузова проводилось расчетное и экспериментальное исследование НДС кузова автомобиля “Ока” для двух вариантов нагружения – кручения относительно продольной оси и изгиба в вертикальной плоскости. Экспериментальные исследования проводились на специальном стенде, схема которого приведена на рис. 4.

В качестве контролируемых параметров выступали:

- изменения длин диагоналей проемов лобового стекла (a), проемов правой (b) и левой (c) двери, проема двери задка (d) (рис. 5);
- распределение угла закручивания (при кручении) или вертикального прогиба (при изгибе) по длине автомобиля;
- интенсивности напряжений в различных точках конструкции (рис. 5).

Измерение перемещений точек конструкции производилось с помощью индикаторов часового типа, а напряжений – с помощью проволоочных тензорезисторов. В каждой контрольной точке кузова под углом 0° , 45° и 90° наклеивалось по три тензорезистора, образующих розетку. В качестве регистрирующей аппаратуры использовалась тензометрическая станция СИИТ-3.

Результаты расчетов представлены на рис. 6–9 и в таблицах 1 и 2. Там же для сравнения приведены экспериментальные результаты.

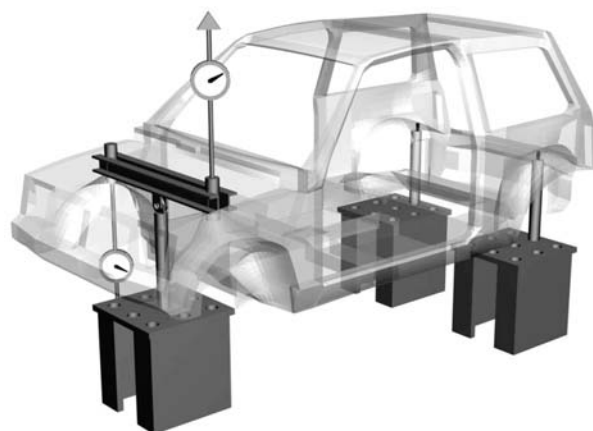


Рис. 4. Схема экспериментального стенда.

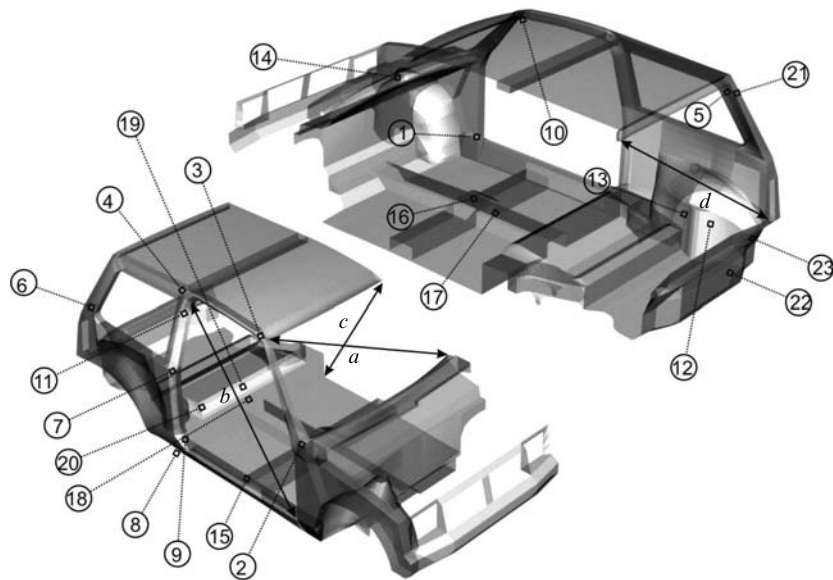


Рис. 5. Схема расположения тензодатчиков и контролируемых параметров a , b , c и d .

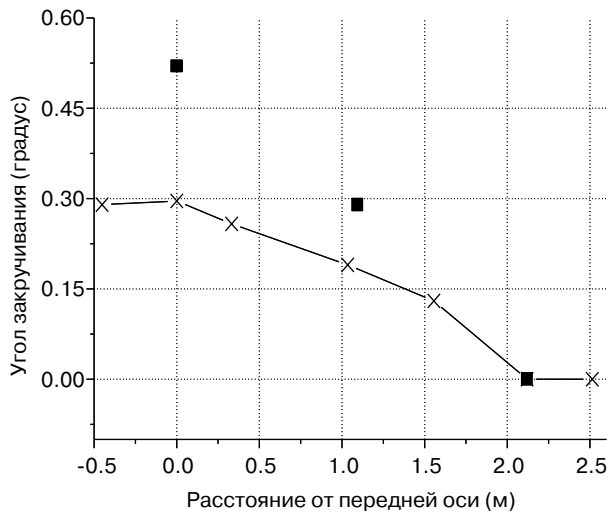


Рис. 6. Экспериментальное (■) и расчетное (X) распределение углов закручивания по длине кузова.

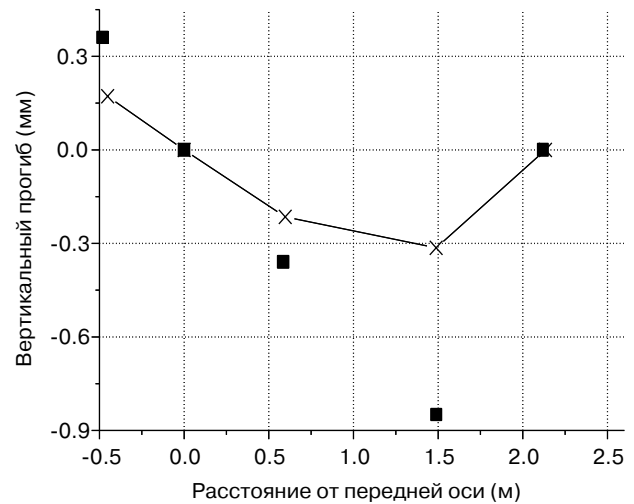


Рис. 7. Экспериментальное (■) и расчетное (X) распределение упругого прогиба по длине кузова.

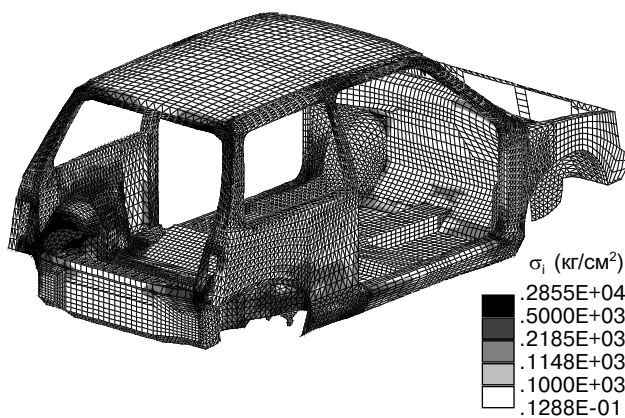


Рис. 8. Распределение полей интенсивности напряжений в кузове автомобиля "Ока" при кручении.

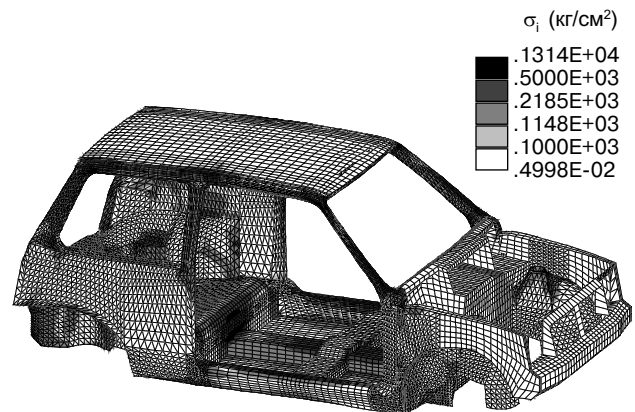


Рис. 9. Распределение полей интенсивности напряжений в кузове автомобиля "Ока" при изгибе.

Таблица 1. Результаты расчетного и экспериментального ($M_{кр} = 4000$ Нм) определения изменения длин проемов кузова при кручении.

Параметр	Расчет (мм)	Эксперимент (мм)
a	-0.843	-1.81
b	0.748	1.45
c	1.09	3.41
d	-4.1	-6.97

Таблица 2. Результаты расчетных и экспериментальных напряжений σ_i (МПа) при кручении и изгибе кузова.

Номер розетки	Кручение		Изгиб	
	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент
1	21-34	37	3-5	10.09
2	21-33	146	14-20	33.77
3	53-82	127	12-17	17.55
4	17-26	27	1320	21.19
5	26-33	91	7-17	17.92
6	10	53	7-12	40.65
7	10	33	17-35	25.86
8	17-26	3	10-15	42.99
9	53-66	65	10-20	9.99
10	53-82	72	22-30	8.95
11	12-17	11	7-15	14.54
12	17-33	11	10-15	21.03
13	17-33	86	6-10	35.83
14	17-26	19	6-10	3.46
15	17-21	29	10-19	29.56
16	10	26	4-5	88.42
17	10	17	25-38	41.36
18	13	1	35-70	53.05
19	35	5	35-70	66.85
20	13-27	26	20-35	51.74
21	53-82	81	14-20	20.04
22	38	9	6-10	12.36
23	10-17	13	5-12	2.63

Из приведенных результатов следует, что разработанная математическая модель адекватно отражает напряженно-деформированное состояние кузова при изгибе и кручении. Однако, жесткость кузова, полученная при расчете, превышает жесткость, определенную экспериментально. По результатам верификации в настоящее время проводится уточнение расчетной модели кузова автомобиля.

Использование расчетных технологий при модернизации боковой двери

Как было сказано ранее, навесные агрегаты не включались в общую модель кузова, а рассматривались изолированно. Ниже будет продемонстрировано использование математического моделирования при модернизации боковой двери кузова автомобиля "Ока".

Поводом для проведения работы явилось то, что в процессе эксплуатации на отдельных экземплярах конструкции отмечается возникновение необратимых деформаций в навеске двери. Причиной этого могут быть как недостатки конструкции, так и отклонения в технологии при изготовлении двери. Для выявления причин возникновения необратимых деформаций решалась задача расчетно-экспериментального определения податливости двери. Задача решалась в 2 этапа. На первом этапе проводилось экспериментальное исследование податливости двери в приоткрытом состоянии под воздействием вертикальной нагрузки, приложенной в месте установки замка двери и направленной вниз. На втором этапе, после построения и проверки математической модели двери, проводились численные исследования влияния конструктивных и технологических параметров на величину податливости двери.

Расчетная модель включала в себя 4 подконструкции: внешняя панель, внутренняя панель с усилителем под петли, верхняя и нижняя распорки усилителя под петли двери. Сетка конечных элементов и схема соединения подконструкций показана на рис. 10. Все подконструкции моделировались конечными элементами тонкой оболочки.

При расчете дверь считалась закрепленной по линиям приварки петель к усилителю внутренней панели. В зоне расположения замка двери прикладывалась вертикальная нагрузка величиной 200 Н. Предполагалось также, что на конструкцию действуют массовые нагрузки от вертикального ускорения 1000 см/с^2 .

Расчетное вертикальное перемещение в зоне замка двери составило 2.6 мм. Экспериментально определенное провисание двери в этом месте конструкции равно 3.6 мм. Таким образом, расхождение экспериментальных и расчетных результатов составляет 1 мм, или 28%.

На рис. 11 показаны изополя интенсивности напряжений в конструкции двери, полученные расчетным путем. Поля черного цвета обозначают зоны, в

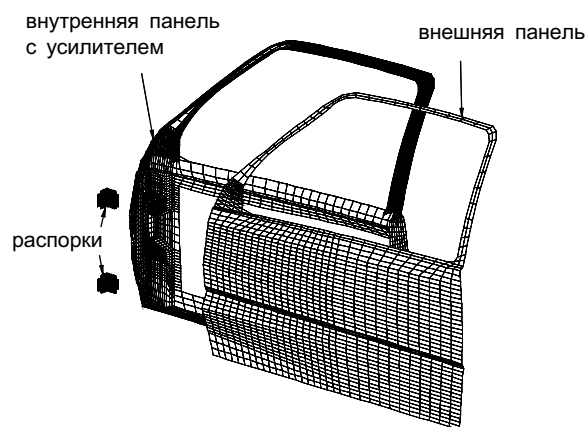


Рис. 10. Подконструкции модели двери.

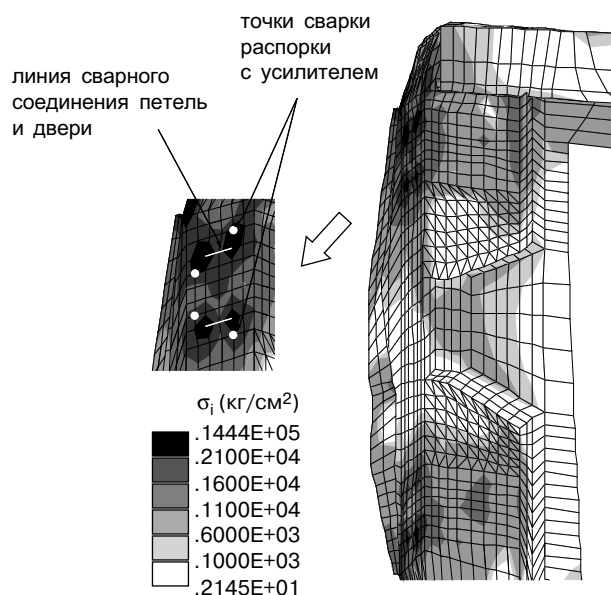


Рис. 11. Распределение полей интенсивности напряжений в двери.

которых интенсивность напряжений превышает предел текучести конструкционного материала – 2100 кг/см² (210 МПа). Как следует из рисунка, при действии на замок двери вертикального усилия в 200 Н в месте сварного шва крепления двери и петли и в зонах точечной сварки распорки с усилителем возникают зоны пластических деформаций. При этом максимальные значения интенсивности напряжений реализуются в зонах точечной сварки и достигают 11400 кг/см² (1140 МПа).

Таким образом, рассмотренный вид нагружения может вызывать остаточные деформации в конструкции, что подтверждается результатами эксперимента.

Для выявления факторов, влияющих на напряженно-деформированное состояние двери в зоне крепления петель, проводилось специальное параметрическое исследование. В качестве параметров фигурировали:

- длина и форма сварного шва, соединяющего дверь и петлю;
- толщина стального листа, из которого изготовлены усилитель внутренней панели двери и распорки.

В таблице 3 представлены результаты расчетов при вариации первого параметра. Анализ результатов показал, что уменьшение длины сварного шва приводит к увеличению интенсивности напряжений. Так, при уменьшении длины сварного шва с 20 мм (зона А – место точечной сварки усилителя и распорки, $\sigma_i = 1140.9$ МПа) до 10 мм (зона А, $\sigma_i = 1520.8$ МПа) интенсивность напряжений увеличивается на 379.3 МПа, или на 33%. Изгиб сварного шва позволяет уменьшить концентрацию напряжений и снизить максимальную интенсивность напряжений на 68.4 МПа, или на 6%.

Таблица 3. Результаты расчетов интенсивности напряжений σ_i при вариации формы и длины сварного шва l .

Схема	Зона	σ_i (МПа)		
		$l = 20$ мм	$l = 15$ мм	$l = 10$ мм
	A	1140.9	1478.8	1520.8
	B	616.3	652.1	560.6
	C	588.9	814.3	868.0
	D	776.5	1091.3	1198.8
	A	1072.5		
	B	543.2		
	C	440.5		
	D	922.2		

Таким образом, форма и длина сварного шва, соединяющего дверь и петлю, могут существенно влиять на НДС конструкции. Контроль размера и формы сварного шва является необходимым мероприятием.

В таблице 4 представлены результаты расчетов при вариации толщины стального листа, из которого изготовлены усилитель внутренней панели двери и распорки. Рассматриваются верхняя распорка усилителя. Были рассчитаны следующие варианты параметров: вариант 1 – толщина усилителя 1.2 мм, толщина распорок – 1.2 мм (серийный); вариант 2 – соответственно 1.5 и 1.2 мм; вариант 3 – 2.0 и 1.2 мм; вариант 4 – 1.5 и 1.5 мм; вариант 5 – 2.0 и 2.0 мм.

Расчетный анализ показал, что увеличение толщины распорки до 1.5 мм не приводит к существенным изменениям в НДС конструкции. Увеличение толщины распорки до 2 мм снижает максимальное значение интенсивности напряжений σ_i в зоне А – с 1140.9 МПа до 739.9 МПа (или на 35%). К еще большему эффекту приводит увеличение толщины и распорки, и усилителя. Так, одновременное увеличение толщины усилителя внутренней панели двери и распорки с 1.2 мм до 2 мм (вариант 5), позволяет достигнуть значительного снижения максимума значений интенсивности напряжений σ_i в зоне А – с 1140.9 МПа до 477.5 МПа, или на 58%, по сравнению с штатным вариантом.

Таблица 4. Результаты расчетов интенсивности напряжений σ_i при вариации толщины конструкционного стального листа. Номера столбцов соответствуют номеру варианта толщин (см. текст).

Схема	Зона	σ_i (МПа)				
		1	2	3	4	5
	A	1140.9	1101.0	739.9	876.5	477.5
	B	616.3	595.4	439.1	595.7	430.4
	C	588.9	612.0	516.7	584.0	466.5
	D	776.5	784.3	591.8	747.2	526.3

Таким образом, разработанная математическая модель конструкции позволила объяснить процессы, происходящие в конструкции двери, и обосновать причины, вызывающие в ней повышенные деформации. Кроме того, математическая модель обеспечила возможность проведения модификаций базовой конструкции на основе численного эксперимента, позволяя вырабатывать рекомендации технологического характера, а также оптимизировать конструкцию двери и добиться существенного (на 58%) снижения максимума действующих в ней напряжений.

Работа проводилась при финансовой поддержке Фонда НИОКР РТ и ОАО “Завод малолитражных автомобилей”. Авторы выражают искреннюю благодарность сотрудникам КГТУ им. А. Н. Туполева Денисову Ю.А. и Наумову В.П. за огромную помощь в проведении экспериментальных исследований.

Литература

1. Шапошников Н.Н., Тарабасов Н.Д., Петров В.Б., Мяченков В.И.: Расчеты машиностроительных конструкций на прочность и жесткость. Москва: Машиностроение 1981.
2. Hing P.G., Fa L.S.: A new element used in the non-orthogonal boundary plate bending theory – an arbitrarily quadrilateral element. *Int. J. Num. Meth. Engng.* **24**, 1031–1042 (1987)
3. Образцов И.Ф., Савельев Л.Н., Хазанов Х.С.: Метод конечных элементов в задачах строительной механики летательных аппаратов. Москва: Высшая школа 1985.
4. Зенкевич О.: Метод конечных элементов в технике. Москва: Мир 1975.
5. Зенкевич О., Морган К.: Конечные элементы и аппроксимация. Москва: Мир 1986.
6. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ашихмин А.Н.: Комплекс “АРКО” – современное состояние и опыт использования в автомобильной промышленности. “Математическое моделирование в механике сплошных сред на основе методов граничных и конечных элементов”: Труды XVIII международной конференции, т. 3, стр. 254–259. СПб.: НИИХ СПбГУ 2000.

Использование наноструктурных металлов для получения электронных автоэммиттеров на основе углеродных нанотрубок

Е. Ф. Куковицкий

Группа роста кристаллов

Методом химического парофазного осаждения синтезированы углеродные нанотрубные слои на поверхности массивных (неструктурированных) никелевых подложек. С использованием дифракции рентгеновских лучей изучено влияние структуры приповерхностных слоев металлического никеля на рост углеродных нанотрубок. Выполнены измерения автоэмиссионных характеристик нанотрубных слоев, полученных на поверхности механически полированных подложек.

Введение

Углеродные нанотрубы, активно исследуемые в последнее время, обладают уникальными автоэмиссионными свойствами. Структуры, представляющие собой множество нанотрубок, размещенных на проводящей подложке, могут служить основой низковольтных автоэлектронных эмиттеров для различных устройств вакуумной эмиссионной электроники. Высокие параметры таких эмиттеров были продемонстрированы в течение последних лет в ряде работ. Однако механизм полевой эмиссии из углеродных нанотрубок остается до сих пор неясным. Один из подходов к проблеме состоит в изучении зависимости эмиссионных характеристик от морфологических и топологических особенностей углеродных нанотрубок и структур на их основе. В частности, с целью повышения эмиссионных характеристик были приложены значительные усилия для получения нанотрубок, ориентированных перпендикулярно к плоскости поддерживающей подложки. Результаты проведенных в этом направлении исследований неоднозначны и в целом измерения показывают, что ориентированные и хаотически распределенные нанотрубы обнаруживают сопоставимые эмиссионные характеристики. Возможным объяснением этого факта может быть частичное выстраивание нанотрубок вдоль электрического поля. В то же время существуют экспериментальные свидетельства того, что эмиссия электронов происходит не только с концов углеродных нанотрубок, но и с боковых поверхностей. Детальное изучение природы автоэмиссии требует получения множества нанотрубок с достаточно однородными морфологическими характеристиками и схожей структурой стенок.

В большинстве случаев для получения углеродных нанотрубных слоев используются различные варианты каталитического выращивания углеродных нанотрубок на подложках с нанесенным катализатором. В качестве катализатора используются, как правило, наночастицы переходных металлов (Fe, Ni, Co), фор-

мируемые каким-либо способом на поддерживающей подложке. Существует, однако, альтернативная возможность получения нанотрубных слоев непосредственно на поверхности массивных каталитически активных металлов. В отношении к электронным эмиттерам это удовлетворяет требованию электропроводности подложки и автоматически решает проблему адгезии нанотрубного слоя. В основе метода лежит давно известное явление выделения свободного углерода при взаимодействии углеродсодержащих газов с нагретой (400–1000°C), каталитически активной поверхностью переходных металлов Fe, Ni или Co. При определенных условиях проведения каталитического пиролиза углеводородов можно добиться выделения каталитического углерода в виде углеродных нитей или нанотрубок. Отсутствие в данном случае заранее сформированных каталитических наночастиц вносит новые элементы в механизм формирования углеродных нанотрубок по сравнению с ростом на высокодисперсном катализаторе. Накопленные экспериментальные результаты позволяют представить следующую примерную схему образования нанотрубного углерода на поверхности массивного металла при каталитическом пиролизе углеводородов.

1. Адсорбция молекул углеводорода на поверхности металла-катализатора и их каталитический распад с образованием на поверхности свободного углерода.

2. Растворение элементарного углерода в металле и диффузия углеродных атомов внутрь металла.

3. Насыщение приповерхностных слоев металла углеродом, образование промежуточных неустойчивых фаз и дальнейший их распад, приводящий к фрагментации поверхностного слоя металла и образованию каталитически активных металлических наночастиц.

4. Запуск каталитическими частицами механизма роста и дальнейший рост нанотрубного углерода.

Многостадийный процесс роста углеродных нанотрубок на поверхности металла-катализатора тесно

связан с непростыми (и даже малоизученными) проблемами гетерогенного катализа, физического металловедения, фазовых превращений в наноразмерных системах и самоорганизации вещества. Многие существенные детали процесса, определяющие внешнюю морфологию и внутреннюю микроструктуру углеродных нанотрубок, остаются неизвестными. В группе роста кристаллов КФТИ исследовалось влияние структуры приповерхностных слоев никелевых подложек на рост углеродных нанотрубок с целью отработки приемов формирования нанотрубных слоев, пригодных для использования в качестве низковольтных автоэлектронных эмиттеров. Методами электронной микроскопии исследованы топология таких слоев, а также внешняя морфология и внутренняя микроструктура индивидуальных нанотрубок. Проведено сравнительное исследование автоэлектронной эмиссии нанотрубных слоев, синтезированных на механически полированных и неполированных поверхностях никелевых подложек.

Синтез углеродных нанотрубных слоев на поверхности никелевых подложек

Углеродные нанотрубные слои выращивались методом ХОП (химическое осаждение из пара) с использованием в качестве углеродсодержащего прекурсора продуктов пиролиза полиэтилена. Выращивание проводилось на никелевых подложках размером $10 \times 10 \times 0.3$ мм³, изготовленных из поликристаллической фольги со средним размером зерна ~ 40 нм. Влияние структуры приповерхностного слоя металлического никеля изучалось сравнением скорости осаждения каталитического углерода в процессе выращивания нанотрубок на подложках, поверхность которых была подвергнута химической или механической полировке. Для исследуемых подложек процесс проводился при одинаковых условиях – температура 800°C, давление реактивных газов 1.2 атм., длительность процесса 15 мин. Кинетика осаждения углерода представлена в таблице 1 для химически полированных подложек (образец 1) и механически полированных подложек (образец 2). Из таблицы видно, что при отмеченных условиях на образце 1 углерод практически не осаждается (с точностью измерения массы до 0.3 мг). Хотя

Таблица 1. Масса каталитического углерода на единицу площади (мг/см²) химически полированной (образец 1) и механически полированной (образец 2) никелевых подложек в зависимости от длительности процесса t .

Образец	t (мин)						
	5	7	8	9	10	11	15
1	0	—	—	—	—	—	~ 0
2	0	1.0	2.85	3.9	4.5	5.3	5.3

каталитическая активность химически полированной поверхности гораздо ниже механически обработанной, микроскопическими наблюдениями установлено, что процесс каталитического разложения углеводородов и осаждения углерода на ней происходит. При закалке образцов к комнатной температуре на начальных стадиях процесса наблюдается выделение графита в основном по границам зерен и на поверхности зерен с благоприятной кристаллографической ориентацией. Это согласуется с известным фактом зависимости каталитической активности металлического никеля от кристаллографической ориентации поверхности и с представлениями о том, что каталитически активными областями на поверхности металла являются места локальных упругих деформаций кристаллической решетки. На поликристаллической подложке такими областями являются, в частности, выходы на поверхность межзеренных границ. В течение процесса поведение углерода, образующегося в результате поверхностных реакций, качественно можно понять на основе диффузионной модели для поликристаллов, в соответствии с которой опережающая диффузия атомов углерода по границам зерен сопровождается боковым “отсосом” углерода с границ в объем зерен. В результате насыщение металла углеродом быстрее всего происходит вблизи границ зерен (и других дефектов решетки), а также на поверхности кристаллитов с соответствующей ориентацией. Действие этих факторов приводит к тому, что рост углеродных нанотрубок на поверхности крупнозернистого поликристаллического никеля происходит крайне неравномерно. В противоположность этому, поверхность механически полированных подложек, закаленных к комнатной температуре, уже на ранних стадиях процесса выглядит равномерно покрытой слоем углерода, выделяющимся при закалке. Дальнейшее развитие процесса приводит к одновременному росту нанотрубок по всей поверхности подложки.

Экспериментальное исследование микроструктуры приповерхностных слоев, влияние которой очевидно из проведенных опытов по выращиванию нанотрубок, было выполнено методом рентгеновской дифракции. Съемка полного дифракционного спектра ($2\theta = 55\text{--}148^\circ$ Fe_{K α} излучения) проводилась на дифрактометре ДРОН-3М в геометрии скользящего пучка под углом $\alpha = 2^\circ$ к поверхности подложки. Инструментальным эталоном служила никелевая фольга, отожженная при 700°C в атмосфере водорода с последующей химической полировкой. Толщина анализируемого слоя составляла ~ 300 нм и при обработке предполагалось, что структура неизменна по всей толщине. Полнопрофильный анализ полученных спектров выполнялся с помощью программы MAUD 1.66 [1]. Результаты анализа для химически и механически полированных образцов приведены в таблице 2. Для механически обработанной подложки эти результаты весьма примечательны. Наблюдается уменьшение периода решет-

Таблица 2. Структурные характеристики химически полированной (образец 1) и механически полированной (образец 2) никелевых подложек.*

<i>hkl</i>	<i>d</i> (Å)		Размер кристаллитов (нм)		Среднеквадратичная деформация $\langle \varepsilon^2 \rangle^{1/2}$ ($\times 10^{-6}$)	
	Образец 1	Образец 2	Образец 1	Образец 2	Образец 1	Образец 2
111	2.0338	2.0321	487	49	9	2100
200	1.7613	1.7598	465	32	0.8	3700
220	1.2454	1.2422	482	45	8	2600
311	1.0621	1.0612	476	40	6	3100
222	1.0169	1.0160	487	49	9	2100

* Значение параметра решетки *a*, полученное из приведенных в таблице значений *d*, для образца 1: 3.5228 ± 0.0001 ; для образца 2: 3.5197 ± 0.0001 .

ки на величину $\sim 0.15\%$. Размер зерна уменьшается до ~ 40 нм. Наблюдается анизотропия среднеквадратичной деформации. Размеры кристаллитов также анизотропны. Такие параметры характерны для наноструктурных металлов, полученных различными методами интенсивной пластической деформации: обработкой порошков в шаровых мельницах, кручением под высоким давлением, равноканальным угловым прессованием. Нанокристаллические металлы обладают рядом необычных свойств; некоторые из них имеют решающее значение для роста углеродных нанотрубок на поверхности металла-катализатора. Интенсивная пластическая деформация приводит к тому, что границы зерен в нанокристаллическом никеле имеют высокую плотность дислокаций, вызывающих большие искажения кристаллической решетки и образование областей сжатия и растяжения вблизи границ. Экспериментальные результаты и теоретические расчеты показывают, что места упругих локальных деформаций решетки могут служить центрами адсорбции газов и каталитически активными центрами для поверхностных реакций распада углеродсодержащих молекул. Механическая абразивная обработка поверхности создает, таким образом, многочисленные равномерно распределенные по поверхности каталитически активные центры, что приводит к увеличению скорости поверхностных реакций на начальных стадиях. Кроме того, развитая сетка межзеренных границ обуславливает резкое ускорение диффузионных процессов. Экспериментальные результаты демонстрируют увеличение коэффициента зернограницной диффузии в наноструктурном никеле по сравнению с крупнокристаллическим и по некоторым данным эта разница составляет 5–6 порядков. Совместное действие указанных факторов приводит к быстрому и равномерному насыщению углеродом слоя нанострук-

турного никеля и одновременному зарождению углеродных нанотрубок по всей поверхности механически полированных подложек. При соответствующих условиях проведения процесса на таких подложках удастся получить слои углеродных нанотрубок с постоянной толщиной (~ 20 – 30 нм) по всей площади подложки.

Результаты исследований по росту углеродных нанотрубок на поверхности каталитически активных металлов и измерения автоэмиссионных характеристик, выполненных совместно с Институтом радиоэлектроники РАН, опубликованы в работах [2–5].

Литература

1. <http://www.ing.unitn.it/~luttero/maud/index.html>
2. Гурьянова О.М., Куковицкий Е.Ф., Львов С.Г., Саинов Н.А., Шустов В.А., Киселев Н.А., Чернозатонский Л.А.: Микроструктура приповерхностных слоев металла-катализатора и каталитический рост углеродных нанотрубок. Тезисы докладов 3 Международной конференции “Химия высокоорганизованных веществ и научные основы нанотехнологии”, С.-Петербург, 25–30 июня 2001 г., стр. 328.
3. Куковицкий Е.Ф., Львов С.Г., Саинов Н.А., Шустов В.А., Киселев Н.А., Чернозатонский Л.А., Израэльянц К.Р., Мусатов А.Л.: Углеродные нанотрубки на поверхности массивного металла-катализатора: каталитический рост, структура и полевая эмиссия. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции “Микро- и нанoeлектроника 2001”, Звенигород, 1–5 октября 2001 г.
4. Musatov A.L., Kiselev N.A., Zakharov D.N., Kukovitsky E.F., Izrael’jants K.R., Chirkova E.G.: Field electron emission from nanotube carbon layers grown on Ni foil. Abstracts of 5th Biannual International Workshop in Russia IWFA’2001, St. Peterburg, July 2–6, 2001, p. 57.
5. Musatov A.L., Kiselev N.A., Zakharov D.N., Kukovitsky E.F., Zhibanov A.I., Izrael’jants K.R., Chirkova E.G.: Field electron emission from nanotube carbon layers grown by CVD process. Applied Surface Science **183**, 111 (2001)



АСПИРАНТЫ И МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ

Аспирантура

В 2001 году аспирантуру закончили 7 человек:

1. Баталов Рафаэль Ильясович
2. Бикчантаев Искандер Ильдарович
(с представлением кандидатской диссертации)
3. Дунаев Дмитрий Михайлович
4. Костычев Максим Юрьевич
5. Леонтьев Вячеслав Евгеньевич
(с представлением кандидатской диссертации)
6. Скирда Максим Владимирович
7. Тогулев Павел Николаевич

В 2001 году в аспирантуру поступило 9 человек:

1. Бизяев Дмитрий Анатольевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель А. А. Бухараев
2. Бородин Павел Александрович
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель А. А. Бухараев
3. Дулова Марина Индусовна
01.04.07 “Физика конденсированного
состояния”, руководитель Р. М. Баязитов
4. Житейцев Евгений Рафаэлевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель В. А. Уланов
5. Коновалов Алексей Анатольевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель В. Ф. Тарасов
6. Мамбетов Айдар Ермакалиевич
01.04.17 “Химическая физика, в т.ч. физика
горения и взрыва”, руководитель К. М. Салихов
7. Новиков Герман Анатольевич
01.04.07 “Физика конденсированного
состояния”, руководитель М. Ф. Галаятдинов
8. Сугоняко Антон Викторович
01.04.17 “Химическая физика, в т.ч. физика
горения и взрыва”, руководитель А. А. Бухараев
9. Тихонов Дмитрий Анатольевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель И. А. Гарифуллин

На 1.12.01 число аспирантов института с очной формой обучения составило 19 человек (аспирантов заочного обучения нет). Численность молодых ученых в возрасте до 35 лет, включая аспирантов, составила 40 человек.

Стипендии

1. Стипендия для талантливых молодых ученых РФ на 2000-2001 год присуждена аспиранту Н. И. Нургазизову.
2. Стипендия КФТИ им. Б. М. Козырева для молодых ученых присуждена в 2001 году Д. В. Овчинникову.
3. Стипендия КФТИ им. Н. С. Гарифьянова для аспирантов присуждена в 2001 году С. И. Петрушкину.
4. Именная стипендия Главы администрации г. Казани присуждена в 2001 году аспиранту Л. Р. Мурсалимову.
5. Стипендия фонда Александра фон Гумбольдта присуждена в 2001 году с.н.с. А. Л. Степанову.

Премии

Премия IBRO (Международная организация исследований мозга) для молодых ученых присуждена в 2001 году м.н.с. В. В. Андрианову.

19 января 2001 года проходила конференция молодых ученых института. На ней было представлено 13 докладов. По итогам конференции молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН за 2001 год были присуждены призовые места и премии следующим сотрудникам:

1-е место: Овчинников Д.В.: Моделирование процессов перемагничивания в планарных ферромагнитных микроструктурах.

2-е место: Герасимов К.И.: ЭПР и оптическая спектроскопия и анализ структуры кубических и тригональных центров иона Yb^{3+} в кристаллах SrF_2 и BaF_2 .

3-е место: Булатов А.Р., Капралов А.В.: Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$.

Гранты

Гранты для молодых ученых КФТИ

1. Бородин П.А.: Получение образцов ферромагнитных микро- и нанопроволок и изучение их доменной структуры методами сканирующей зондовой микроскопии.
2. Герасимов К.И.: Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных ионов в диэлектрических кристаллах.
3. Туранов А.И.: Исследование магнитных свойств и строения серии мезогенных соединений лантанидов с основаниями Шиффа.
4. Цейтлин М.П., Васина О.А.: Новейшие методы ЭПР томографии. Принципы построения пространственного распределения электромагнитного поля. ЭПР томография в экспериментах с временным разрешением.

Победители конкурса научных проектов молодых ученых РАН по фундаментальным и прикладным исследованиям

1. Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В., Назырова Р.Р., Мухаметшина Д.И., Муранова Л.Н., Мещанинова А.В., Исмаилова А.И., Архипова С.С.: Исследование длительности сохранения изменений электрических нейронов при долговременной сенситизации и ассоциативного обучения интактных улиток и при истощении серотонина (№ 289).
2. Еремина Р.М.: Медно-кислородные кластеры переменной валентности в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$.

Гранты РФФИ для молодых ученых, аспирантов и студентов

1. Фролова Е.Н. (№ 01-03-06165): Микроструктура, молекулярная подвижность и свойства многокомпонентных растворов парамагнитных комплексов. Проявление немарковских процессов в спиновой релаксации.

2. Герасимов К.И. (№ 01-02-0613): Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в диэлектрических кристаллах.
3. Туранов А.Н. (№ 01-03-06254): Магнитные жидкие кристаллы на основе координационных соединений.

Участие сотрудников института в гранте НОЦ КГУ CRDF BRHE REC-007

1. Баталов Р.И.: Импульсный синтез тонких пленок полупроводникового дисилицида железа на кремний, излучающих в области 1.5 мкм.
2. Бизяев Д.А.: Создание сканирующего микроскопа сдвиговых сил – прототипа магнитооптического микроскопа.
3. Вавилова Е.Л.: Исследование магнетизма высокотемпературных сверхпроводников и низкоразмерных квантовых магнетиков магниторезонансными методами.
4. Еремина Р.М.: Температурная зависимость спектров ЭПР и магнитной восприимчивости в CuGeO_3 .
5. Львова Т.Н.: Исследование динамики наноразмерных структурных дефектов на поверхности полупроводников при импульсном фотонном воздействии.
6. Мурсалимов Л.Р.: Исследование влияния ядерного спина и парамагнитной добавки (спинового катализатора) на квантовый выход фото распада молекул в растворе.
7. Носков М.И.: Неклассические аспекты фемтосекундной динамики двухатомных молекул.
8. Нургазизов Н.И.: Нанотомографическое исследование тонких пленок диоксида кремния после ионного облучения.
9. Овчинников Д.В.: Исследование методом магнитной силовой микроскопии процессов перемагничивания в поверхности магнитных планарных микроструктурах, сформированных с помощью вакуумного напыления.
10. Туранов А.Н.: Синтез и исследование жидких металлосодержащих кристаллов на основе аминокетенов.
11. Цейтлин М.П.: Магнитный резонанс в системах с проводимостью и диэлектрическими потерями. Расчет формы линии с учетом геометрии образца, томография магнитного поля.



Семён Александрович Альтшулер. К 90-летию со дня рождения

Имя С. А. Альтшулера неразрывно связано с открытием магнитного резонанса и развитием нового направления в современной физике – магнитной спектроскопии.

Окончив физико-математический факультет Казанского университета, он поступил в аспирантуру к академику И. Е. Тамму. Широкую известность приобрела их работа, в которой было предсказано существование магнитного момента нейтрона. Наличие магнитного момента у нейтрона, не обладающего электрическим зарядом, представлялось в то время парадоксальным. Однако их предсказание было блестяще подтверждено экспериментально.

Интерес к магнитным свойствам вещества определил всю научную деятельность С. А. Альтшулера в последующие годы.

В 1934–1941 гг. С. А. Альтшулер читает курсы теоретической физики в Казанском университете, работает совместно с Е. К. Завойским и Б. М. Козыревым. В 1941 году ими были поставлены эксперименты по обнаружению ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на протонах воды. Невоспроизводимость резонансного поглощения не позволила им придти к утверждению об открытии эффекта ЯМР. Позже было установлено, что причиной была неоднородность постоянного магнитного поля.

Война прервала научные изыскания С. А. Альтшулера. Он добровольцем пошёл на фронт, все годы служил в частях противотанковой артиллерии и в звании майора встретил День Победы. В 1946 году он вернулся в Казанский университет и продолжил педагогическую и научную работу.

С 1948 по 1953 год Семён Александрович работает по совместительству в Казанском физико-техническом институте Казанского филиала АН СССР. В КФТИ по его предложению были поставлены экспе-



Семён Александрович Альтшулер
(29.09.11–24.01.83)

рименты по выявлению возможности изучения методом ЭПР сверхтонкого взаимодействия. В результате этой работы в слабом магнитном поле на растворах солей Mn^{2+} был обнаружен резонанс с фактором спектроскопического расщепления равным единице (1948 г.). Это свидетельствовало о возможности определения методом ЭПР величин магнитных моментов ядер в конденсированных средах.

Широкую известность принесли С. А. Альтшулеру его теоретические исследования спин-фононных взаимодействий в твёрдых телах. Он впервые подошёл к акустическим колебаниям как к динамическому когерентному полю, которое могло резонансно поглощаться веществом, и разработал теорию акустического резонанса (1952 г.). Вскоре, подтверждённая экспериментально, эта теория легла в основу нового направления физики – квантовой акустики.

Для изучения неравновесных фононов, полученных спин-системой, С. А. Альтшулер в 1965 году предложил использовать метод мандельштам-бриллюэновского рассеяния света. Этим методом им с сотрудниками было обнаружено красивое явление лавинного излучения фононов. Оказалось, что эффективная

температура резонансных фононов в пике лавины достигала миллионов градусов при температуре образца в несколько градусов.

С. А. Альтшулером, при участии М. М. Зарипова и В. Н. Ястребова, был теоретически предсказан и экспериментально обнаружен магнитный резонанс в так называемых Ван-флековских парамагнетиках. Семён Александрович предложил использовать их в качестве рабочих веществ для получения сверхнизких температур методом адиабатического размагничивания. Это позволило экспериментально достичь температур $\sim 10^{-6}$ К.

Обстоятельное исследование ионов группы железа и редких земель проведены Тепловым М.А. и Тагировым М.С., учениками С. А. Альтшулера, в самых различных матрицах. Благодаря большой анизотропии, очень интересные результаты удалось получить в высокотемпературных сверхпроводниках.

С. А. Альтшулер и его ученики успешно развили теорию магнитного резонанса. Он обобщил теорию спин-решёточной релаксации Валлера, основанную на модуляции магнитного диполь-дипольного взаимодействия парамагнитных ионов. Выяснилось, что времена спин-решёточной релаксации ионов, находящихся в S-состоянии, хорошо описываются теорией Валлера.

Кочелаев Б.И. и Аминов Л.К. показали, что учёт секулярной части спин-фононного взаимодействия может привести к значительному вкладу в величину эффективного g -фактора (Co^{2+} в MgO).

Аминов Л.К., рассматривая резонансную флюоресценцию фононов, предложил новый механизм спин-решёточной релаксации, который сейчас называется механизмом Аминова-Орбаха.

Малкин Б.З. развил оригинальную теорию кристаллического поля, которая надёжно предсказывает величины параметров потенциала кристаллического поля.

В кратком сообщении нет возможности перечислить все результаты, полученные С. А. Альтшулером и его учениками. Большой жизненный опыт и талант

руководителя помогли ему создать в Казанском университете мощную физическую лабораторию; кафедры теоретической физики, квантовой электроники и радиоспектроскопии, сформировавшие центр радиоспектроскопических исследований и подготовки специалистов в этой области.

С. А. Альтшулер способствовал развитию теоретической физики в Казанском физико-техническом институте. Его ученики А. Р. Кессель, У. Х. Копвиллем и другие внесли большой вклад в развитие магнитной радиоспектроскопии в Казани.

Ученики С. А. Альтшулера – К. А. Валиев в Педагогическом институте, Ю. Е. Польский в Казанском авиационном институте – создали коллективы, успешно занимающиеся вопросами магнитного резонанса и квантовой электроники. Методы магнитного резонанса широко используются как в университете, так и в других научно-исследовательских учреждениях и вузах Казани.

Сообщество учёных г. Казани, использующее различные методы магнитного резонанса, образует казанскую школу магнитной радиоспектроскопии, которая воспитала десятки докторов и сотни кандидатов наук. Выдающийся вклад в создание этой школы внёс Семён Александрович Альтшулер.

С. А. Альтшулер был не только выдающимся физиком, но и яркой, обаятельной личностью; человеком требовательным, но великодушным, с тонким и мягким юмором, притягивающим к себе людей, нуждающихся в самых разнообразных научных, житейских советах и помощи. Он увлекал своей душевной молодостью и оптимизмом. Прекрасный учёный и педагог, Семён Александрович притягивал к себе молодых людей, увлечённых наукой. Общение с ним всегда было радостью. Он глубоко чувствовал и любил музыку, ценил литературу, историю, философию.

Я бесконечно благодарен судьбе, которая дала мне возможность учиться у Семёна Александровича и работать с ним.

М. М. Зарипов

Памяти Рината Зуфаровича Бариева

17 мая 2001 года в городе Сан Карлос (Бразилия) на пятьдесят втором году оборвалась жизнь главного научного сотрудника нашего института, доктора физико-математических наук, профессора Рината Зуфаровича Бариева.

Ринат Бариев появился в КФТИ около тридцати лет назад студентом-дипломником лаборатории теоретической физики. В 1972 г. он успешно закончил физический факультет Казанского государственного университета, кафедру теории относительности и гравитации и был принят в аспирантуру Казанского физико-технического института. Этот молодой ученый с исключительной серьезностью и самоотверженностью относился как к поставленной перед ним задаче, так и к появившейся у него уже в совсем молодые годы семье.

Специфика предложенной ему научной тематики – корреляционные функции модели Изинга – была такова, что работа над ней требовала высокой концентрации на различных математических проблемах, связанных с выработкой специфических матрично-комбинаторных образов. Эта задача, как и все последующие работы Рината Зуфаровича, относится к проблемам многих тел, в которых определяющими являются многочастичные взаимодействия. Известно, что такие проблемы, за редким исключением, не имеют решения. В подавляющем большинстве случаев физикам приходится решать подобные задачи либо по теории возмущений, где это возможно, либо с помощью плохо контролируемых приближений типа приближения молекулярного поля. Модель Изинга и другие решавшиеся Ринатом Зуфаровичем задачи относятся именно к исключениям, допускающим, ценой огромных усилий ума и изобретательности, точное решение. По-видимому, без высочайшей работоспособности Рината Зуфаровича невозможно было бы выполнить огромную вычислительную работу, связанную с этой областью физики. Исключительная пунктуальность и аккуратность в расчетах сочетались в нем с весьма оригинальными и нестандартными подходами в решении поставленных задач. В силу этих объективных и субъективных причин, чисто профессиональное взаимодействие с коллегами, использующими менее абстрактные подходы, было затруднено. Он с большим нежеланием участвовал в обсуждении научных работ, которые не опирались на математи-



Ринат Зуфарович Бариев
(19.04.50–17.05.01)

чески строгую аргументацию. Это, однако, не отражалось на открытости Рината при обсуждении различных житейских вопросов. Зачастую его точка зрения на те или иные события не совпадала с общепринятой, что свидетельствовало о его глубокой индивидуальности.

В короткий период времени ему удалось решить ряд сложных задач, связанных с моделью Изинга и привлечь к своим результатам внимание специалистов как в стране, так и за ее рубежами. Было написано большое количество ярких статей, в 1976 году была защищена кандидатская, а в 1985 году докторская диссертация. Свидетельством его признания как серьезного специалиста по математической физике стали приглашения Р. З. Бариева в качестве официального оппонента диссертаций, защищаемых в Институте теоретической физики им. Л. Д. Ландау (Черноголовка). Для любого ученого в те времена это являлось большой честью.

С годами происходило не только увеличение числа написанных статей, но и рос исследовательский класс Р. З. Бариева. От задач, связанных с моделью Изинга, он перешел к более широким обобщениям свойств фазовых переходов, например, таким как выяснение нетривиальных эффектов, обусловленных локальными дефектами. В частности, ему удалось установить, что дефекты способны нарушить такие общие свойства критического поведения как масштабная инвариантность и универсальность. Был найден и исследован небакстеровский класс точно решаемых моделей, предложена новая точно решаемая

задача статистической физики, получившая название “модель Бариева”.

Непросто складывалась “коллективная” составляющая работы Рината Зуфаровича – аспиранты не могли выдерживать предлагаемый им ритм исследований и “сходили с дистанции”. Ринат Зуфарович щедро авансировал начало работы с молодым ученым, включая его в уже практически законченные статьи, однако затем требовал адекватной отдачи, чего не получал. Думается, что успешно сотрудничать с ним мог только в равной степени одержимый исследователь. Подтверждение этому – активное и весьма эффективное сотрудничество Рината Зуфаровича с рядом ученых, его единомышленниками, из самых разных стран – Германии, Франции, Бразилии, которое началось на рубеже 80–90 годов. Наиболее яркие результаты этого периода были связаны с анализом точно решаемых моделей одномерных Ферми-

систем, исключительно важных для понимания проводимости низкоразмерных металлов.

К сожалению, последние годы Ринат Зуфарович испытывал тяжелые проблемы со здоровьем. Только исключительная сила воли и самоотверженность позволяли ему, не замыкаясь на собственной болезни, с прежним натиском проводить свою трудную научную работу. Немаловажным стимулом к этому было и то, что Ринат Зуфарович остро чувствовал ответственность за судьбу трех своих сыновей.

В памяти всех, кто его знал, Ринат Зуфарович останется ярким примером целенаправленной, самозабвенной и весьма эффективной жизни в науке, жизни человека, который оставался верным своим научным и жизненным принципам до последних дней...

*М. П. Желифонов, В. А. Жихарев,
А. Р. Кессель, Г. Б. Тейтельбаум*

Очерк развития исследований модели Изинга и других точно решаемых квантово-статистических моделей в КФТИ

М. П. Желифонов

Проблематика получения точных решений статистических моделей многочастичных систем связана со следующими обстоятельствами. Описание систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, является чрезвычайно сложной математической задачей и для ее решения, как правило, приходится использовать различные упрощающие предположения. Приближенные решения не способны корректно описать систему около точки фазового перехода и поэтому существует острая необходимость получения точных решений хотя бы для некоторых физических моделей. Такие решения позволяют уяснить многие общие, принципиально важные особенности коллективного поведения частиц. Кроме того, точные решения удобно использовать для проверки эффективности различных приближенных методов решения задач.

До 1944 г. большинство ученых полагали, что статистическая физика пригодна для описания вещества только в пределах одного фазового состояния и не способна описать сам фазовый переход вещества в

другое состояние. Точное решение Онзагера для статистической суммы планарной решетки Изинга в 1944 году опровергло это мнение и продемонстрировало универсальность методов статистической физики. Впервые было получено строгое математическое описание процесса фазового перехода.

Исследованию модели Изинга в ее самых различных вариантах посвящено чрезвычайно большое количество работ. Важнейшие особенности модели – простой энергетический спектр и, как следствие, совершенно нестандартная структура уравнений движения. Если в общем случае описание системы многих тел приводит к бесконечным цепочкам зацепляющихся уравнений движения, то в модели Изинга цепочка уравнений расцепляется на одном из первых этапов. Однако, полученная при этом система алгебраических уравнений оказывается недоопределенной. Возник вопрос – как использовать разомкнутые уравнения движения для получения точного решения? Авторы, первыми получившие разомкнутые уравнения, привлекали дополнительные физические соображения,

искусственно упрощали алгебраическую систему и получили точный результат лишь для простейших корреляторов линейной модели Изинга.

В начале 70-х годов в лаборатории теоретической физики института проводилось детальное исследование специфических особенностей уравнений движения в модели Изинга. М. П. Желифоновым была защищена кандидатская диссертация на тему “К вопросу о получении точных решений в задачах о магнитно-упорядоченных системах”. В работе было показано, что уравнения движения для функций Грина в модели Изинга допускают точное размыкание и в случае произвольного спина S и координационного числа решетки P и образуют замкнутые системы из $2SP + 1$ уравнения. Решения для функций Грина приводят к очень простым по форме соотношениям для корреляционных функций. Эти соотношения носят рекуррентный характер и служат для описания любого из корреляторов, характеризующих модель. В работе [1] была дана принципиально новая трактовка этих соотношений – корреляторы с одинаковым числом спинов рассматривались как различные значения одной и той же функции. В этом случае полученные соотношения превращаются в замкнутые системы разностных уравнений, определяющих функциональную зависимость корреляторов от пространственных координат спинов – “уравнения дальней связи”. Было показано, что такие уравнения для однотипных корреляторов могут быть сведены, в принципе, к однородному линейному разностному уравнению с постоянными коэффициентами. Порядок уравнения для линейных моделей зависит только от S и P , а для планарной решетки зависит также и от ее ширины n . Было установлено, что любая корреляционная функция модели может быть представлена, в принципе, как сумма степенных функций, где основаниями служат корни “характеристического уравнения”, а степенями являются координаты спинов.

В рамках развития нового подхода к проблеме в институте методом “уравнений дальней связи” был исследован целый ряд модификаций линейной модели Изинга. Так, в дипломной работе выпускника КГУ Бариева Р.З. рассматривалась линейная модель Изинга с дальнедействующим взаимодействием [2].

Дальнейшее совершенствование метода показало, что всякую систему рекуррентных соотношений для корреляционных функций можно так же представить в матричном виде, как разностное уравнение первого порядка $X_k = W X_{k-1}$. Компонентами вектора X_k являются корреляционные функции, составленные, например, для случая трехмерной решетки из спин-овых операторов двух соседних плоскостей. В результате, задача получения точного решения для корреляционных функций свелась к исследованию матрицы линейного преобразования W . Построение этой матрицы для двух и трехмерной решеток было вы-

полнено в работе [3] и означало, фактически, создание новой формулировки задачи Изинга. Матрица W позволила общее число неизвестных величин задачи понизить с 2^N до 2^{2n} и 2^{2mn} соответственно для двух- и трехмерных решеток. В случае планарных решеток естественным образом происходит дальнейшее упрощение описания системы. Матрица W таких решеток имеет клеточно-диагональный вид, легко диагонализуется, и независимыми переменными в этом случае оказываются только $2n$ корреляционных функций модели. Структура матрицы W принципиально отличается от структуры традиционной матрицы перехода V и процедура ее диагонализации оказывается значительно проще. Переход к матрице W дает более простой и естественный способ описания модели [4].

Метод уравнений дальней связи нашел свое дальнейшее приложение в работах Нигматуллина [5, 6]. Были получены нелинейные разностные уравнения и предложен метод их приближенной линеаризации, который получил название *статического флуктуационного приближения* (СФП). Суть приближения состоит в замене квадрата оператора локального поля средним значением, что позволяет принять в расчет квадратичные флуктуации локального поля, которые приводят к возникновению корреляций между спинами. По простоте и удобству, он соответствует классическому “методу эффективного поля”, но позволяет учитывать влияние флуктуаций в точке фазового перехода. Свою эффективность и высокие внутренние возможности метод СФП проявил и при исследовании более сложных систем. Так, в работах [7, 8] была детально исследована обобщенная модель Изинга с взаимодействиями ближайших и следующих за ближайшими соседями как в отсутствии, так и в присутствии внешнего магнитного поля. В работе [9] в рамках метода СФП была детально изучена протонная модель ферроэлектрика с учетом эффекта туннелирования с диполь-дипольными силами взаимодействия, где было показана высокая эффективность методики СФП и при анализе систем с дальнедействующими типами взаимодействия. Возможности СФП этим не ограничиваются, поскольку в работе [10] авторами была продемонстрирована эффективность этой методики и при исследовании термодинамических свойств классической модели Изинга.

Следующий этап работы по получению точных решений – вычисление конкретных корреляционных функций плоской решетки Изинга на основе “пространственного” решения. К 1975 г. были выполнены только две работы [11, 12] по изучению асимптотического поведения корреляционной функции планарной решетки с двумя произвольно расположенными спинами. Согласно замечанию самих авторов [11], их подход содержит ряд искусственных допущений, обусловленных “несовершенством вычислительной процеду-

ры”. Корреляционные функции плоской решетки выражаются через пфаффианы больших размерностей и главной проблемой был поиск эффективного метода вычисления таких пфаффианов. И такой метод был предложен в работе [13]. Была дана более строгая постановка задачи, оценка сделанных приближений, использовано непосредственно пфаффианово представление, введена эффективная диаграммная техника, которая отличается простотой и наглядностью. Метод привел к аналитическому выражению не только для первого, как в работе [11], но и для произвольного члена разложения двухспиновой функции. Затем в работе [14] Бариев Р.З. на основе нового метода вычислил асимптотики трехточечных корреляторов, образованных операторами спина и плотности энергии бесконечной планарной решетки Изинга.

По результатам этих исследований Р. З. Бариев в 1977 году в Институте физики АН УССР успешно защитил кандидатскую диссертацию на тему “Некоторые точные решения для корреляционных функций модели Изинга”. Последующая его научная работа была связана прежде всего с применением предложенного им метода вычисления пфаффианов к исследованию многоспиновых корреляционных функций. На этом пути Ринатом Зуфаровичем были получены следующие оригинальные результаты.

Найдены точные выражения для целого ряда многоточечных корреляционных функций двумерной модели Изинга [15]. Вблизи критической точки доказан ряд общих свойств полученного решения. Найдены точные выражения для многоспиновых корреляционных функций основного состояния одномерной ХУ модели в поперечном поле, которая является квантовым аналогом планарной решетки Изинга [16]. Изучено поведение корреляторов в двух скейлинговых областях: при малых значениях параметра анизотропии и вблизи критического значения поперечного поля. На основе полученных результатов проведена проверка некоторых общих предсказаний теории масштабной инвариантности, операторной алгебры и гипотезы универсальности. Полученные точные результаты подтверждают общие положения этих теорий. Кроме того, эти результаты находят неожиданное применение в теории суперструн, которая делает попытку объединить все взаимодействия природы. Амплитуды излучения фермионов в этой теории неожиданно выражаются через спиновые корреляторы модели Изинга.

Следующий этап исследований Рината Зуфаровича был связан с вычислением корреляционных функций моделей, в которых нарушена трансляционная инвариантность. Полученные результаты позволили детально рассмотреть влияние границы на критические свойства полубесконечных систем и влияние линейных дефектов на локальную намагниченность двумерной модели Изинга. Для полубесконечной двумер-

ной решетки Изинга найдены точные выражения для одно- и двухточечных корреляционных функций [17]. Точные вычисления локальной намагниченности двумерной решетки Изинга с линией дефектов привели к интересному для общей теории фазовых переходов физическому результату [18]. Впервые была обнаружена локальная неуниверсальность критических индексов многочастичной системы. На расстояниях, близких к линии дефектов, критический индекс намагниченности оказался непрерывной функцией констант обменного взаимодействия. Ринат Зуфарович сформулировал феноменологический критерий, объясняющий появление локальной неуниверсальности такого типа. Он назван специалистами “очень красивой теоремой”: если “аномальная” размерность возмущения равна его “пространственной” размерности, то обязательно возникает либо локальная неуниверсальность, либо локальное нарушение масштабной инвариантности.

Все рассмотренные модели входят в группу точно решаемых моделей, которые могут быть представлены в виде системы невзаимодействующих фермионов. Более сложным для исследования типом моделей являются те модели, которые сводятся к системе взаимодействующих фермионов. Первое точное решение для статистической суммы модели такого типа было получено Бакстером в 1971 г.

Бакстер определил свою модель на нерегулярной плоской решетке, образованной пересекающимися прямыми линиями. Спиновые переменные α в такой модели приписываются ребрам решетки и принимают дискретный ряд значений $\alpha = 1, 2, \dots, q$. Узлам решетки сопоставляются вершинные больцмановские веса, которые зависят от состояния четырех окружающих данный узел ребер $R_{\alpha\gamma}^{\beta\delta}$. При этом α и β характеризуют соответственно состояния левого и правого горизонтальных ребер, а γ и δ – нижнего и верхнего вертикальных ребер. Статистическая сумма вершинной модели определяется как произведение вершинных весов по всем узлам, просуммированное по всем спиновым конфигурациям решетки.

Ключевую роль в решении Бакстера играют соотношения на вершинные веса $R_{\alpha\gamma}^{\beta\delta}$ – уравнения Янга-Бакстера. В классической статистической механике всякое решение этого уравнения порождает интегрируемую решеточную модель. Фактически Бакстер получил решение этого уравнения при $q = 2$ и именно на основе этого решения им было получено точное выражение для свободной энергии обобщенной восьмивершинной модели. Он показал также, что практически все точно решаемые модели статистической механики являются “слабо эквивалентными” этой модели в том смысле, что они имеют ту же статистическую сумму, что и бакстеровская модель в том или ином частном случае. Впоследствии класс моделей, “слабо эквивалентных” обобщенной бакстеровской

модели, был значительно расширен путем получения новых решений уравнения Янга-Бакстера.

В качестве контрпримера бакстеровскому рассмотрению, Ринатом Зуфаровичем в 1980 году была предложена и точно решена двухмерная вершинная модель с двумя подрешетками [19]. Эта модель получила в современной литературе собственное имя – “модель Бариева”. Она представляет собой систему двух взаимодействующих восьмивершинных моделей. Точное решение для свободной энергии рассматриваемой системы найдено в некотором частном случае, который явно не сводится к бакстеровскому типу. На это указывает также тот факт, что её вершинные веса не удовлетворяют уравнениям Янга-Бакстера. В этом смысле модель Бариева является первым и пока единственным примером точно решаемой модели классической статистической механики подобного рода. Таким образом, было показано, что имеется некая более общая, чем существующая, схема интегрирования решеточных моделей статистической механики и в этом заключается принципиальное методическое значение предложенной Бариевым модели.

Данная модель определяется на плоской квадратной решетке с двумя типами узлов, которые чередуются в шахматном порядке и представляет собой систему из двух шестивершинных моделей, взаимодействующих между собой. На больцмановские веса накладывается дополнительное условие, которое является условием свободных фермионов для каждой из двух подрешеток. Квантовыми аналогами подрешеток являются изотропные XY цепочки.

Для решения этой задачи Бариев выполнил новую методическую разработку. Он развил метод вычисления термодинамических функций интегрируемых решеточных вершинных моделей статистической механики на основе “диагональной” трансфер-матрицы. Во всех предшествующих работах решение такого типа задач получалось на основе диагонализации “строчной” трансфер-матрицы, которая “строит” решетку построчно вдоль ее столбцов. “Диагональная” трансфер-матрица “строит” решетку подиагонально. Такой подход дал ряд существенных преимуществ – решения получаются более простым способом и непосредственно применимы к исследованию моделей квантовой теории поля. Кроме того, “строчная” трансфер-матрица для данной задачи не поддается диагонализации с помощью метода Бета-анзаца. Точное решение для собственных векторов и собственных значений трансфер-матрицы привело к точному выражению для свободной энергии системы. Было исследовано поведение поляризации модели во внешнем электрическом поле и обнаружены фазовые переходы по полю и параметру межподрешеточного взаимодействия. Изучение двух предельных случаев полученного решения привело к моделям квантовой теории поля: одномерной модели Хаббарда и модели с нарушенной SU_2 симметрией.

Все эти научные результаты вошли в докторскую диссертацию Бариева Р.З. “Корреляционные функции точно решаемых моделей статистической механики”, которая была успешно защищена в 1985 году в Казанском государственном университете. Оппонентами выступили ученые, одни из самых авторитетных в стране: Поляков А.М., Аминов Л.К., Файнберг В.Я., а качестве ведущей организации – Математический институт им. В. А. Стеклова. В своем отзыве на диссертацию Зубарев Д.Н. записал: “Создано новое научное направление в теории интегрируемых статистических систем, основанное на изучении многооточечных корреляционных функций. Одним из авторов этого направления является Бариев Р.З.”

Создание мощной методической базы позволило затем Ринату Зуфаровичу детально исследовать целую серию модификаций различных решеточных моделей, допускающих точное решение. Учитывалось влияние различного вида граничных условий, в том числе и угловых. Учитывалось влияние различных дефектов (крупномасштабных, радиально симметричных и т.д.) на критическое поведение моделей. Рассматривались модели, состоящие из разного числа связанных между собой XY цепочек или планарных подрешеток. Исследовалось влияние этих связей на свойства моделей.

Эпоха исключительного положения планарной решетки Изинга в теории фазовых переходов завершилась. Количество разнообразных точно решаемых статистических моделей непрерывно нарастает. Сложнейший раздел математической физики переживает бурный рост и осязаемый, конкретный вклад в этот процесс внесли ученые Казанского физико-технического института РАН.

Литература

1. Желифонов М.П.: Высшие корреляционные функции изинговского ферромагнетика. Случай линейной модели для спина $S = 1/2$. ТМФ **8**, 401 (1971)
2. Bariev R.Z., Zhelifonov M.P.: The long-range interactions in the linear Ising model. Phys. Lett. A **42**, 35 (1972)
3. Bariev R.Z., Zhelifonov M.P.: The new formulation of the Ising problem. Phys. Lett. A **50**, 105 (1974)
4. Бариев Р.З., Желифонов М.П.: Матрица линейного преобразования корреляционных функций модели Изинга. ТМФ **25**, 280 (1975)
5. Нигматуллин Р.Р., Тобоев В.А.: Корреляционные функции для анизотропной модели Гейзенберга в нулевом магнитном поле. ТМФ **68**, 88 (1986)
6. Nigmatullin R.R., Khamzin A.A., Ghassib H.B.: One-, two-, and three-dimensional Ising model in static fluctuation approximation. Int. J. Theor. Phys. **39**, 405 (2000)
7. Хамзин А.А., Нигматуллин Р.Р.: Исследование магнитного упорядочения многоподрешеточной модели Изинга в рамках статического флуктуационного приближения. ФММ **92**, 39 (2001)
8. Хамзин А.А., Нигматуллин Р.Р.: Термодинамика модели Изинга с конкурирующими аксиальными взаимодействиями в статическом флуктуационном приближении. ФММ (2002), принята в печать.

9. Nigmatullin R.R., Khamzin A.A., Ghassib H.B.: Proton model of ferroelectrics with tunneling in the static fluctuation approximation. *Phys. Rev. E* **61**, 3441 (2000)
10. Nigmatullin R.R., Khamzin A.A., Ghassib H.B.: The classical two-dimensional Ising model in the static fluctuation approximation. *Solid State Commun.* **113**, 257 (2000)
11. Wu T.T.: Theory of Toeplitz determinants and the spin correlations of the two-dimensional Ising model. *Phys. Rev.* **149**, 380 (1966)
12. Kadanoff L.P.: Spin-spin correlations in the two-dimensional Ising model. *Nuovo Cimento* **44**, 276 (1966)
13. Бариев Р.З., Желифонов М.П.: Двухспиновая корреляционная функция плоской решетки Изинга. *ТМФ* **25**, 108 (1975)
14. Bariev R.Z.: Many-point correlation functions of the two-dimensional Ising model. *Phys. Lett. A* **64**, 169 (1977)
15. Bariev R.Z.: High-order correlation functions of the planar Ising model. *Physica A* **93**, 354 (1978)
16. Bariev R.Z.: Many-spin correlation functions of the one-dimensional XY model. *Phys. Lett. A* **68**, 175 (1978)
17. Бариев Р.З.: Корреляционные функции полубесконечной двумерной модели Изинга I. Локальная намагниченность. *ТМФ* **40**, 95 (1979)
18. Бариев Р.З.: Влияние линейных дефектов на локальную намагниченность плоской решетки Изинга. *ЖЭТФ* **77**, 1217 (1979)
19. Бариев Р.З.: Точное решение двумерной вершинной модели небакстеровского типа. *Письма в ЖЭТФ* **32**, 10 (1980)



НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ

О работе ученого совета

В соответствии с установленным регламентом, Ученый совет института собирается регулярно каждую неделю. В 2001 году было проведено 41 заседание Ученого совета КФТИ. На заседаниях рассматривались и научно-организационные вопросы, и научные. К числу первых относятся: обсуждение и утверждение планов работы лабораторий и их отчетов, утверждение важнейших результатов исследований, ежеквартальные отчеты дирекции о финансовой деятельности института, вопросы обеспечения научных исследований, работа научно-вспомогательных подразделений и т.д.

В 2001 году в связи с истечением срока действия свидетельства о государственной аккредитации институт представил пакет документов в РАН и получил новое Свидетельство о государственной аккредитации № 3048 от 11 сентября 2001 года. В связи с оформлением документов на аккредитацию, Ученый совет обсудил и утвердил новую редакцию Устава института.

В 2001 году Ученый совет учредил четыре гранта для молодых ученых и аспирантов и разработал положение о присуждении этих грантов, избрал комиссию сроком на пять лет. В конце года состоялся первый конкурс, и с 1 января 2002 года первые победители получают ежемесячные надбавки к зарплатам. Ранее в 2000 году Ученый совет института учредил две именные стипендии: Стипендия имени Б. М. Козырева для молодых ученых и Стипендия имени Н. С. Гарифьянова для аспирантов. Стипендии также присуждаются на конкурсной основе и выплачиваются в течение 12 месяцев. В связи с учреждением грантов для молодых ученых и аспирантов, в 2001 году было принято решение о повышении размера именных стипендий.

В 2001 году Ученый совет выдвинул Овчинникова И.В., Галяметдинова Ю.Г., Бикчантаева И.Г., Иванова Г.И. за цикл работ “Создание магнитных жидких кристаллов” на соискание Государственной премии Республики Татарстан, профессора Зарипова М.М. на

присвоение звания “Заслуженный деятель науки Российской Федерации”, профессора Тейтельбаума Г.Б. на присвоение звания “Заслуженный деятель науки Республики Татарстан”.

Заметным событием в жизни института прошедшего года была реорганизация библиотеки КФТИ, и на заседаниях Ученого совета неоднократно обсуждались вопросы, связанные с рациональным размещением фонда библиотеки и разделением функций между вновь созданной Центральной библиотекой Президиума КазНЦ РАН и библиотекой КФТИ.

В 2001 году по решению Ученого совета была выпущена книга “Казанский физико-технический институт” – справочное издание об институте. В апреле на одном из заседаний Ученого совета состоялась презентация этой книги. На заседании Ученого совета обсуждалось сразу три события: издание книги, организация издательства ФизтехПресс и создание новой версии Web-страницы института в Интернете.

Заседания, посвященные научным вопросам, проводятся как научная сессия Ученого совета в виде Объединенного физического семинара института. На таких заседаниях было сделано 37 докладов сотрудников по статьям, подготовленным к публикации, 20 сообщений сотрудников о научных загранкомандировках, были также доклады сотрудников при выдвижении на должность старшего научного сотрудника. Ученый совет заслушал и рекомендовал к защите докторскую диссертацию В. Ф. Тарасова “Субмиллиметровая ЭПР спектроскопия примесных парамагнитных ионов в диэлектрических кристаллах” и кандидатские диссертации сотрудника Гумарова Г.Г. и аспирантов Леонтьева В.Е. и Бикчантаева И.И., выступление молодых ученых и аспирантов, участвующих в конкурсе на именные стипендии и гранты КФТИ, а также просто интересные научные сообщения. В 2001 году существенно повысился уровень презентации научных сообщений благодаря использованию компьютерного проектора.

В. К. Воронкова
ученый секретарь

О работе диссертационного совета

Диссертационный совет в КФТИ КазНЦ РАН по присуждению ученых степеней доктора и кандидата физико-математических наук по специальностям:

- 01.04.11 – “Физика магнитных явлений”;
- 01.04.17 – “Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва”

был образован в 1988 г. и в декабре 2000 г. ВАК РФ утвердил новый состав Совета.

Состав Диссертационного совета Д.002.191.01 (на 1 января 2001 г.)

1. Салихов К.М., д.ф.-м.н., член-корр. РАН
председатель (КФТИ)
2. Осокин Д.Я., д.ф.-м.н., с.н.с.
зам. председателя (КФТИ)
3. Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н., с.н.с.
ученый секретарь (КФТИ)
4. Аганов А.В., д.хим.н., проф. (КГУ)
5. Аминов Л.К., д.ф.-м.н., проф. (КГУ)
6. Бухараев А.А., д.ф.-м.н., с.н.с. (КФТИ)
7. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н., проф. (КФТИ)
8. Жихарев В.А., д.ф.-м.н., проф. (КГТУ)
9. Зарипов М.М., д.ф.-м.н., проф. (КФТИ)
10. Ильясов А.В., д.ф.-м.н., проф. (ИОФХ)
11. Катаев В.Е., д.ф.-м.н., с.н.с. (КФТИ)
12. Кессель А.Р., д.ф.-м.н., проф. (КФТИ)
13. Кочелаев Б.И., д.ф.-м.н., проф. (КГУ)
14. Моисеев С.А., д.ф.-м.н., с.н.с. (КФТИ)
15. Нуретдинов И.А., д.хим.н., проф. (ИОФХ)
16. Овчинников И.В., д.ф.-м.н., проф. (КФТИ)
17. Петухов В.Ю., д.ф.-м.н., с.н.с. (КФТИ)
18. Тагиров М.С., д.ф.-м.н., проф. (КГУ)
19. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н., проф. (КФТИ)
20. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н., член-корр. РАН
(АН РТ)
21. Халиуллин Г.Г., д.ф.-м.н., с.н.с. (КФТИ)

В 2001 г. в диссертационном совете Д.002.191.01 были защищены 2 докторские и 3 кандидатские диссертации. В том числе:

1. С.н.с. Института химической кинетики и горения СО РАН (г. Новосибирск) Пуртов П.А. защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора наук на тему: “Теория поляризации спинов в радикальных реакциях и ее приложение” по специальности 01.04.17 “Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва”.

2. Доцент Казанского государственного университета (г. Казань) Таюрский Д.А. защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора наук на тему: “Магнитная связь жидкого ^3He и диэлектричес-

ких ван-флековских парамагнетиков” по специальности 01.04.11 “Физика магнитных явлений”.

3. Н.с. КФТИ КазНЦ РАН (г. Казань) Жеглов Е.П. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата наук на тему: “Исследование методом ЭПР магнитных свойств комплексов, содержащих ионы Co^{2+} , в монокристаллах двойных сульфатов и селенатов” по специальности 01.04.11 “Физика магнитных явлений”.

4. М.н.с. КФТИ КазНЦ РАН (г. Казань) Ильясов Н.А. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата наук на тему: “Методы повышения временного разрешения в ЯМР-томографии быстропротекающих процессов в биологических системах” по специальности 01.04.17 “Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва”.

5. М.н.с. КФТИ КазНЦ РАН (г. Казань) Леонтьев В.Е. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата наук на тему: “Проявление доменной структуры и динамики монодоминизации FeVO_3 в слабых магнитных полях в сигналах ЯМР и магнитоупругих резонансов” по специальности 01.04.11 “Физика магнитных явлений”.

Помимо вопросов, связанных с защитой диссертаций, на заседаниях диссертационного совета подробно обсуждались вопросы, связанные с утверждением нового “Положения о диссертационном совете”.

М. М. Шакирзянов
ученый секретарь Диссертационного совета

Международная премия им. Е. К. Завойского

Международная премия им. Е. К. Завойского учреждена в 1991 г. по инициативе проф. К. М. Салихова после консультаций с международным сообществом ЭПР. Эта премия получила поддержку Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского, Казанского государственного университета, АН Республики Татарстан, и издательства Шпрингер (Вена Нью Йорк), которое сотрудничает с физико-техническим институтом в издании международного журнала “Applied Magnetic Resonance”. Премия получила признание Амперовского общества, международного общества ЭПР (ЭСР), Президиума РАН, и Президента, Госсовета и Правительства Республики Татарстан. Она получила высокую международную оценку как значительная премия за научные достижения.

Премия им. Е. К. Завойского присуждается за выдающийся вклад в применения или развитие элект-

ронного парамагнитного резонанса в любой области науки. Лауреат получает диплом, медаль и \$1000 (США). Лекция лауреата о своей работе публикуется в журнале “Applied Magnetic Resonance”. Церемония вручения премии проходит в Казани, где лауреат и его(ее) супруга(супруг) являются почетными гостями Правительства Республики Татарстан.

Как же проходили выборы лауреата и церемония вручения этой престижной премии в 2001 году?

Лауреат избирается международным комитетом, его составляют: К. М. Салихов (Казань), председатель, и члены: Б. Блини (Оксфорд, Великобритания), Дж. Фейер (Ла Хойа, США), К. Мебиус (Берлин, Германия), А. Швайгер (Цюрих, Швейцария) и Ю. Д. Цветков (Новосибирск, Россия). В начале 2001 года комитет обратился к примерно 50 самым авторитетным специалистам в области ЭПР с письменной просьбой назвать кандидата. Одновременно объявление о приеме выдвижений было опубликовано в журнале “Applied Magnetic Resonance”, Амперовском бюллетене и Бюллетене международного общества ЭПР (ЭСР). Были рассмотрены все кандидатуры, названные до 1 апреля 2001 года. В результате широкого обсуждения всех кандидатур решение комитета было единодушным – лауреатом премии 2001 был назван Кис А. МакЛохлан, профессор Оксфордского университета (Великобритания).

Профессор МакЛохлан был отмечен за выдающийся вклад в изучение методом ЭПР короткоживущих свободных радикалов после их образования в лазерной вспышке. Интересно, что девять лет назад лауреатом премии им. Е. К. Завойского был Б. Блини, также профессор Оксфордского университета. За одиннадцать лет существования этой премии, высокого звания лауреата были удостоены 13 выдающихся ученых из разных стран мира (в 1994 году, в ознаменование 50-летней годовщины открытия ЭПР, было названо три лауреата), среди них два представителя России – профессор Я. С. Лебедев и академик К. А. Валиев, наш земляк.

Вручение премии им. Е. К. Завойского является значительным событием в культурной жизни Республики Татарстан и сопровождается рядом мероприятий. К церемонии вручения приурочивается ежегодная международная конференция “Современные достижения магнитного резонанса”. В 2001 году в ее работе 1–3 октября приняли участие ученые из Великобритании, Германии, Италии, Польши, России и Швейцарии. 2 октября 2001 года Премьер-Министр Республики Татарстан Р. Минниханов принял проф. К. А. МакЛохлана. Церемония вручения премии проходила 3 октября в здании Культурного центра “Казань” под председательством проф. К. М. Салихова. В ней участвовали зарубежные гости, а также ученые и студенты университетов и научно-исследовательских институтов Казани. К. М. Салихов, председатель комитета по премии им. Е. К. Завойского, объявил

решение комитета. З. Р. Валеева, Вице-Премьер Республики Татарстан, вручила проф. К. А. МакЛохлану диплом лауреата, медаль и денежный чек. Лауреата тепло поздравили и.о. ректора КГУ проф. Н. К. Замов, председатель КазНЦ РАН проф. А. И. Коновалов и главный ученый секретарь АН РТ проф. И. Б. Хайбуллин. Лауреату были переданы поздравления от имени Отделения общей физики и астрономии РАН, Амперовского общества, международного общества ЭПР (ЭСР), международного общества магнитного резонанса, и дочери Е. К. Завойского.

К. А. МакЛохлан прочитал лекцию, в которой обсудил проблемы ЭПР при импульсном фотолизе. Торжественное собрание сопровождалось выступлением струнного квартета “Кантилена”. Церемония завершилась банкетом в честь лауреата.

Во время своего пребывания в Казани К. А. МакЛохлан посетил музей истории КГУ, где экспонируется экспериментальное оборудование Е. К. Завойского, достопримечательности Казани и агрофирму-совхоз “Майский”.

*Л. В. Мосина
ученый секретарь комитета
по присуждению премии им. Е. К. Завойского*

Журнал “Applied Magnetic Resonance”

Международный журнал “Applied Magnetic Resonance” – один из первых научных журналов в нашей стране, печатающийся на английском языке и посвященный приложениям магнитного резонанса в физике, химии, биологии, медицине, геохимии, экологии и т.д.

Журнал создан по инициативе член-корр. РАН К. М. Салихова при поддержке РАН. Издается с 1990 года.

Издателем журнала является издательство Шпрингер Вена Нью Йорк, расположенное в Вене, Австрия. Редакция журнала расположена в КФТИ КазНЦ РАН.

В 1990 году выпущен один том (три выпуска), в 1991 году выпущен один том (четыре выпуска), в 1992 году выпущен один том (шесть выпусков), а начиная с 1993 года, ежегодно, регулярно и с высоким качеством, удовлетворяющим требованиям международной научной общественности и издательства Шпрингер, выпускается два тома (четыре выпуска каждый).

Impact factor журнала: 1995 – 0.95; 1996 – 0.656; 1997 – 0.665; 1998 – 0.811; 1999 – 0.659; 2000 – 0.776.

Журнал индексируется в Current Contents, Sci, SciSearch, Research Alert, INSPEC, Elsevier BIOBASE/

Current Awareness in Biological Sciences, Chemistry Citation Index, Chemical Abstracts.

“Applied Magnetic Resonance” публикует оригинальные статьи, предпочтительно по новым приложениям техники магнитного резонанса и по новым экспериментальным методам. Рутинные приложения в структурной химии находятся вне тематики журнала. Журнал печатает приглашенные обзорные статьи по методам и приложениям ЯМР, ЯКР, ЭПР, Мессбауэровской спектроскопии и т.д. Публикуются специальные выпуски, посвященные актуальным проблемам магнитного резонанса, под редакцией известных ученых. Есть раздел информации о конференциях по магнитному резонансу и новому оборудованию, а также рецензий на новые книги.

“Applied Magnetic Resonance” опубликовал специальные выпуски оригинальных статей, подготовленных в рамках 27, 28 и 29 Амперовских конгрессов, а также ряда специализированных Амперовских симпозиумов и международных конференций.

В 2001 г. редакцией “Applied Magnetic Resonance” осуществлен выпуск 20 и 21 томов журнала, четыре выпуска каждый. Среди них – специальный выпуск, посвященный 10-летию юбилею журнала; специальный выпуск “Магнитный резонанс в России”, демонстрирующий современный уровень исследований по магнитному резонансу в нашей стране. Профессор К. Мебиус (Свободный университет Берлина, Берлин, Германия) подготовил выпуск по теме “Высокопольной и высокочастотный электронный парамагнитный резонанс”, представляющий мгновенный срез активности широко известных лабораторий во всем мире в области высокопольного и высокочастотного ЭПР.

Л. В. Мосина
заместитель главного редактора

Взаимодействие с ВУЗами

КФТИ активно сотрудничает с рядом высших учебных заведений г. Казани в области обучения студентов и в совместных научно-исследовательских работах. Среди них Казанский государственный университет (КГУ), Казанский государственный технический университет им. А. Н. Туполева, Казанский государственный технологический университет (КГТУ), Казанский государственный энергетический университет (КГЭУ) и др.

Наиболее тесным является сотрудничество с КГУ. В 1989 г. на базе физико-технического института открыта совместная с КГУ кафедра химической физи-

ки. Для организации учебного процесса со студентами кафедры используются площади и оборудование научных лабораторий КФТИ КазНЦ РАН. Заведующим кафедрой с момента ее организации является член-корреспондент РАН К. М. Салихов. Сотрудниками института читаются спецкурсы по тематике кафедры, в институте организовано более 10 лабораторных практикумов для студентов этой кафедры, которые выполняются на действующих экспериментальных установках института, часто уникальных. Это дает студентам возможность быстрее включиться в научные исследования, проводящиеся в лабораториях института, стать их полноправными участниками.

Успешно развивается сотрудничество с КГЭУ, оформленное договором о творческом сотрудничестве. В соответствии с договором выполняются совместные исследования магнитоупорядоченных материалов (руководители: проф. Голенищев-Кутузов В.А. (КГЭУ) и в.н.с., д.ф.-м.н. Богданова Х.Г. и с.н.с., к.ф.-м.н. Мигачев С.А. (КФТИ)). Студенты, магистранты и аспиранты КГЭУ работают в научных лабораториях и пользуются библиотекой КФТИ. Практикуется совместное руководство аспирантами. В 2001 г. при совместном руководстве была защищена кандидатская диссертация Леонтьевым В.Е. и представлена к защите диссертация Садыковым М.Ф. (руководители в.н.с., д.ф.-м.н. Богданова Х.Г., с.н.с., к.ф.-м.н. Мигачев С.А., в.н.с., д.ф.-м.н. Шакирзянов М.М. (КФТИ) и зав.каф., д.ф.-м.н. Голенищев-Кутузов А.В. (КГЭУ)). Научные сотрудники КФТИ читают лекционные курсы и ведут практические занятия со студентами КГЭУ. (в.н.с., д.ф.-м.н. Богданова Х.Г. и вед. инж. Булатов А.Р.).

Новый этап в развитии сотрудничества с ВУЗами начался в связи с реализацией Федеральной целевой программы государственной поддержки интеграции высшего образования и фундаментальной науки. В рамках программы было создано два учебно-научных центра (УНЦ):

1. Совместный с физфаком КГУ УНЦ по подготовке высококвалифицированных кадров по приоритетным направлениям Казанской физической школы.
2. Совместный с КГТУ УНЦ по подготовке специалистов по теоретическим основам химической технологии.

В 2001 г. в рамках интеграции с физфаком КГУ сотрудники КФТИ участвовали в учебном процессе на кафедрах химической физики, теоретической физики, оптики, радиоспектроскопии и квантовой электроники, молекулярной физики, физики твердого тела.

Были прочитаны 15 теоретических курсов по современным проблемам физики:

- зав.лаб., д.ф.-м.н. Бухараев А.А.: “Молекулы на поверхности”;

- проф. Вишневская Г.П.: “Изучение свойств жидкостей методом ЭПР”;
- зав.лаб., д.б.н. Гайнутдинов Х.Л.: “Избранные физические вопросы молекулярной биологии”;
- проф. Моисеев С.А.: “Оптическая спектроскопия молекул”, “Современные вопросы квантовой оптики”;
- проф. Петухов В.Ю.: “Радиационная физика твердого тела”, “Современные методы экспериментальной физики”;
- проф. Петухов В.Ю., зав.лаб. д.ф.м.н. Бухараев А.А.: “Радиационная физика и физика поверхностей”;
- член-корр. РАН, проф. Салихов К.М.: “Современные проблемы химической физики”;
- проф. Самарцев В.В.: “Новые физические методы оптической обработки информации”, “Квантовая оптика”;
- с.н.с., д.ф.м.н. Таланов Ю.И.: “Магнитные измерения”;
- зав.отд., к.ф.м.н. Мусин В.М.: “Информатика и вычислительная техника”;
- с.н.с., к.ф.м.н. Соловаров Н.К.: “Введение в проблемы квантовой оптики”;
- м.н.с. Овчинников Д.В.: “Химическая кинетика”, “Математическое моделирование химико-физических процессов с применением персональных компьютеров”.

Сотрудники КФТИ провели ряд семинарских занятий:

- н.с., к.ф.м.н. Вавилова Е.Л., с.н.с., д.ф.м.н. Таланов Ю.И.: “Физика сверхпроводимости”;
- проф. Моисеев С.А.: “Основы квантовой оптики”;
- зав.отд., к.ф.м.н. Мусин В.М.: “Информатика и вычислительная техника”;
- м.н.с. Овчинников Д.В.: “Математическое моделирование химико-физических процессов с применением персональных компьютеров”;
- м.н.с. Галеев Р.Т.: “Использование программы Mathematica для решения задач спиновой химии”.

По ряду специальностей выполнение лабораторных работ студентами КГУ организовано под руководством сотрудников КФТИ на научном оборудовании института:

- проф. Вишневская Г.П., доцент КГУ Пименов Г.Г.: “Метод ЭПР в ионнообменных смолах”;
- проф. Петухов В.Ю.: “Ионная имплантация”;
- проф. Петухов В.Ю., н.с. Осин Ю.Н.: “Электронная микроскопия ионноимплантированных поверхностей”;
- с.н.с., к.ф.м.н. Жеглов Е.П.: “ЭПР твердого тела”;
- с.н.с., к.ф.м.н. Шакуров Г.С.: “Субмиллиметровая ЭПР спектроскопия”;
- с.н.с., д.ф.м.н. Таланов Ю.И., с.н.с., к.ф.м.н. Гарифьянов Н.Н.: “Измерение магнитных полей”;

- с.н.с., к.ф.м.н. Яхин Р.Г.: “ЭПР в жидкостях”;
- н.с. Гнездилов О.И.: “ЯМР высокого разрешения”;
- н.с. Курбатова Н.В.: “Комбинационное рассеяние”;
- н.с. Саинов Н.А.: “Электронная микроскопия”;
- н.с. Шустов В.А.: “Рентгено-структурный анализ”;
- асп. Можанова А.А.: “Оптическая абсорбционная спектроскопия”.

Кроме участия в учебном процессе, КФТИ активно работает по другим направлениям программы интеграции. Совместно с преподавателями КГУ сотрудники КФТИ участвовали в подготовке и проведении двух ежегодных Всероссийских школ молодых ученых: “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” и “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”.

Совместно с КГУ, Казанским медицинским университетом и Казанским институтом биохимии и биофизики КазНЦ РАН была проведена школа “Современные проблемы нейробиологии”.

В 2001 году сотрудники КФТИ продолжали совместную с КГУ работу по проекту CRDF “Материалы и технологии XXI века”, в рамках которого организован Научно-образовательный центр (НОЦ) КГУ и КазНЦ РАН.

НОЦ придает большое значение участию в научно-исследовательской работе молодых ученых и студентов. С целью повышения творческой активности молодежи был организован конкурс молодежных научных проектов и проведена конференция молодых ученых.

*В. Ф. Тарасов
заместитель директора по науке*

Международные связи

Международное сотрудничество ведется в рамках выполнения совместных международных проектов и работ по программам научного сотрудничества.

Перечень тем двустороннего сотрудничества в рамках соглашений между Российской Академией наук и научными учреждениями, в которых участвует институт

1. Германия. “Перспективные материалы с коллективными электронными явлениями” (программа научного сотрудничества между Российской Ака-

- демией наук и Немецким исследовательским обществом).
2. Польша. “Изучение влияния водорода на электронные и магнитные свойства нормальных и сверхпроводящих металлических систем” (двухстороннее сотрудничество между Польской и Российской Академиями наук, Вроцлавский Институт низких температур).
 3. Польша. “Изучение эффекта Яна-Теллера парамагнитных ионов в монокристаллах и других соединениях” (соглашение о взаимной кооперации с Институтом молекулярной физики Польской Академии наук, г. Познань).

Перечень тем двухстороннего сотрудничества в рамках прямых связей между институтом и научными учреждениями зарубежных стран

1. Голландия. “Приготовление и изучение новых квазиодномерных материалов” (Российско-Голландский проект № 047.008.021), руководитель с Российской стороны Бухараев А.А.
2. Германия. “Спектры ЭПР состояний с разделенными зарядами в реакционном центре фотосинтеза” (Берлинский свободный университет), руководитель с Российской стороны Салихов К.М.
3. Германия. “Эффект близости в гетероструктуре сверхпроводник/ферромагнетик” (проект DFG ZA 161/16-1, кафедра экспериментальной физики и физики твердого тела Университета Бохума), руководитель с Российской стороны Гарифуллин И.А.
4. Швеция. “Теоретическое обоснование планирующихся экспериментов по однофотонному эху” (грант Шведской Королевской Академии, Лундский технологический институт, Лунд), руководитель с Российской стороны Моисеев С.А.
5. Италия. “Теоретические исследования по парамагнитному резонансу. Переходные процессы” (Институт физики университета г. Полермо), руководитель с Российской стороны Шахмуратов Р.Н.
6. Турция. “Магнитные свойства многослойных структур” (грант ТУБИТАК), руководитель с Российской стороны Рамеев Б.З.
7. Турция. “Магнитные исследования металлических гранулярных пленок и наноструктур, синтезированных путем ионной имплантации в диэлектрики” (грант ТУБИТАК-НАТО), руководитель с Российской стороны Хайбуллин Р.И.
8. Германия. “Жидкокристаллические координационные соединения” (грант DFG), руководитель с Российской стороны Галяметдинов Ю.Г.

Развивается научное сотрудничество на уровне личных контактов сотрудников института с зарубежными учеными. Продолжены экспериментальные и теоретические исследования пространственных и спектраль-

ных свойств фемто- и пикосекундного фотонного эха. совместно с лабораторией физической химии ЕТН-центра, г. Цюрих (Швейцария). Проводились совместные исследования примесных парамагнитных ионов в кристаллах совместно с университетами городов: Гиссена (Германия), Женевы (Швейцария), Харькова (Украина).

В 2001 году успешно завершена работа по программе Международного научно-технического центра по теме: “Оптическое сверхизлучение и оптические переходные процессы в протяженных резонансных и оптических волноводных средах” (грант № 737).

В 2001 году в зарубежные командировки выезжало 73 сотрудника института, среди них на международные научные конференции, симпозиумы 23 человека; 38 ученых работало по приглашениям за счет принимающей стороны и по контрактам продолжительностью 1–3 месяца, а 10 сотрудников работали и продолжают работать за рубежом по контрактам, продолжительность которых превышает 3 месяца.

Для проведения совместных научных исследований и участия в конференциях, проводимых КФТИ КазНЦ РАН, институт посетило в 2001 году 9 зарубежных ученых.

Н. А. Карташева

О реорганизации библиотеки

Казанский физико-технический институт уделял и уделяет большое внимание перспективам развития информационных ресурсов, и библиотеки в частности. Выделяются дополнительные средства на ремонт библиотеки и оснащение ее техникой, осуществление подписки на периодические и научно-информационные издания, приобретение книг в книготорговой сети. Однако, вопрос о целесообразности содержания на балансе КФТИ многопрофильной библиотеки, которая состояла из центральной библиотеки, расположенной по ул. Лобачевского 2/31 и отделения, расположенного в здании КФТИ по ул. Пионерской 10/7, и обслуживающей все институты КазНЦ РАН, а так же входящих в состав АНТ Института языка и литературы, Института Истории и Института энциклопедии, все чаще возникал в последние годы в связи с трудностями финансирования. В 2001 г. библиотеку посетила комиссия библиотечных и информационных работников из Библиотеки по естественным наукам РАН (Москва). Целью работы этой комиссии было определение путей дальнейшего развития библиотечной сети

КазНЦ и выработка методических рекомендаций по ее успешному функционированию. Комиссия отметила, что часть библиотеки КФТИ, расположенной в здании по ул. Лобачевского, по объему и тематике комплектования, по структуре читателей является потенциально центральной библиотекой КазНЦ. Специалистами БЕН РАН были даны рекомендации по созданию центральной библиотечной сети КазНЦ РАН с приданием статуса центральной библиотеки (ЦБ) части библиотеки КФТИ с подчинением ее Президиуму КазНЦ РАН. На основании оставленных комиссией рекомендаций Президиум КазНЦ РАН принял решение о создании централизованной библиотечной сети, состоящей из трех библиотек: КФТИ, ИОФХ и ЦБ Президиума КазНЦ РАН.

На заседаниях Ученого совета КФТИ неоднократно обсуждался вопрос о реорганизации библиотеки. Ученый совет счел решение Президиума КазНЦ РАН о разделении библиотеки КФТИ целесообразным и единогласно высказался в поддержку самостоятельного статуса библиотеки КФТИ с последующей

передачей профильной институту литературы из центральной библиотеки в библиотеку КФТИ. Отбором передаваемой литературы занимались специалисты – сотрудники института, представляющие научные интересы лабораторий и подразделений института.

Президиумом КазНЦ была создана разделительная комиссия, полномочная решать вопросы, возникающие в процессе отделения и состоящая из представителей КФТИ и Президиума КазНЦ. В ходе работы этой комиссии была достигнута договоренность о передаче в библиотеку КФТИ КазНЦ РАН десяти наименований профильных журналов (около 3 тыс. единиц) и 285 книг.

Библиотека КФТИ получила статус самостоятельной библиотеки, входящей в библиотечную сеть КазНЦ, с полномочиями отдельного комплектования своего фонда через Библиотеку по естественным наукам РАН.

Г. Э. Гумерова
заведующая библиотекой



ФИНАНСОВО-ХОЗЯЙСТВЕННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ

О некоторых результатах хозяйственной деятельности в 2001 и предшествующие годы

Необходимые условия для работы научных подразделений института в 2001 г. обеспечивали службы АХЧ численностью 67 человек под руководством заместителя директора по общим вопросам. Определяющими особенностями этой стороны деятельности можно отметить следующее.

На балансе КФТИ, в его оперативном управлении, – четыре объекта на четырех отдельных земельных участках общей площадью 2.982 га с общей балансовой стоимостью недвижимого имущества порядка 32 млн. руб. Это два административно-лабораторных здания общей площадью 16.667 тыс. кв.м и полезной площадью около 11.5 тыс. кв.м, расположенных в разных районах г. Казани на расстоянии около четырех километров друг от друга; гараж, расположенный на площади 0.44 га, для всех институтов КазНЦ РАН; база отдыха “Голубой залив” на 110 койко-мест с двух-, трех- и пятиместными летними домиками на территории 1.08 га на берегу Волги примерно в 30 км от центра города.

Все здания и сооружения, состоящие на балансе КФТИ, являются объектами общего пользования, что существенно определяет многие стороны деятельности института, его роль и место в структуре КазНЦ РАН. Административно-хозяйственное обслуживание, обустройство, текущий и капитальный ремонт предельно изношенных строительных конструкций, инженерных сетей и коммуникаций указанных объектов осуществляется службами АХЧ института.

Администрация и основная часть научно-производственных подразделений КФТИ расположены по адресу: ул. Сибирский тракт, 10/7 в четырехэтажном здании, построенном в 1970 г. Общая площадь здания вместе с пристроем и вспомогательными сооружениями составляет 7.518 тыс. кв.м, полезная площадь около 5 тыс. кв.м и занимает территорию 0.783 га. Балансовая стоимость составляет около 14 млн. руб. Здесь расположено большое количество уникального

специализированного оборудования с особыми требованиями к помещениям и коммуникациям. Почти в каждой лаборатории установлено крупноразмерное энергоемкое оборудование с использованием, в частности, многотонных магнитов, применением жидкого азота и гелия, как правило, подключенное к системам водоснабжения, канализации, вентиляции и другим коммуникациям. В этом же здании располагаются несколько подразделений института механики и машиностроения КазНЦ РАН, который был образован в 1991 г. на основе подразделений механики физико-технического института.

Другая значительная часть научно-производственных и хозяйственных подразделений КФТИ расположена по адресу: ул. Лобачевского, 2/31. Общая площадь здания вместе с вспомогательными сооружениями составляет 8.182 тыс. кв.м, полезная площадь – около 6.5 тыс. кв.м. Комплекс занимает территорию площадью 0.615 га в центре города.

Согласно постановлению Совета министров ТАССР № 601 от 23 октября 1981 г. здание внесено в список памятников истории и культуры республиканского значения как здание бывшей Ксенинской женской гимназии. История этого здания связана с именами многих великих ученых и общественных деятелей. Здание пережило множество реконструкций и перестроек, аварий, возгораний и других событий. Оно предельно изношено и перегружено, требует капитального ремонта с укреплением фундаментов, сменой кровли, межэтажных перекрытий и всех инженерных коммуникаций.

История здания начинается с 1814 г., когда князем Баратаевым на этом месте был построен двухэтажный дом. В 1839 г. для нового владельца – купца И. И. Апакова – по проекту архитектора Ф. И. Петонди и в 1878 г. по проекту архитектора П. И. Романова надстраиваются третий и четвертый этажи. С 1880 г. в здании размещалась Ксенинская женская гимназия. После революции в здании был открыт татарский рабочий факультет, где учился поэт Муса Джалиль. После закрытия рабфака в здании размещалась средняя школа, в годы Великой Отечественной войны – госпиталь, а с 1945 г. – Казанский филиал АН СССР. В конце 1940-ых годов по проекту

архитектора П. Т. Сперанского сделан один трехэтажный пристрой, а в 1957 г. по проекту архитектора М. К. Игланова добавлен еще один пристрой с цокольным этажом.

В настоящее время в здании располагаются восемь разнопрофильных научных организаций со своим специализированным научным оборудованием и особыми требованиями к помещениям. Кроме подразделений КФТИ, администрации и некоторых лабораторий Института механики и машиностроения КазНЦ РАН, здесь в полном составе размещаются Президиум и два института КазНЦ РАН: Отдел энергетики на правах института и Казанский институт биохимии и биофизики. Здесь же в полном составе – Институт языка, литературы и искусства АН РТ и несколько подразделений Института истории АН РТ, а также некоторые службы других организаций, образовавшихся на базе подразделений КазНЦ РАН или входивших в его состав в свое время. Здесь же расположены централизованные библиотечные фонды, читальный и актовый залы, котельная, архив и другие вспомогательные подразделения. Котельная КазНЦ РАН обеспечивает теплом помещения Национальной библиотеки РТ.

Здание находится на балансе КФТИ и в значительной степени содержится за счет его средств. Фактически КФТИ вынес на своих плечах все трудности экономического кризиса и затянувшегося перестроенного периода, в т.ч. дефолт 1998 г. КФТИ оплачивал коммунальные услуги в полном объеме и своевременно, а институты гасили эти беспроцентные ссуды через год и более, причем некоторые не оплачены до сих пор. Несмотря на все проблемы этих лет, КФТИ обеспечил безаварийное содержание здания и необходимые условия не только для своих ученых, но и всех сотрудников институтов КазНЦ РАН, за исключением ИОФХ им. А. Е. Арбузова, расположенного отдельно от всех других институтов.

Уделяя большое внимание благополучию всех институтов КазНЦ РАН, в 2001 году с подачи автора этих строк и вопреки ожиданиям всех скептиков, удалось убедить руководство республики в необходимости включить в план подготовки к празднованию 1000-летия Казани проведение капитального ремонта здания КазНЦ РАН. В ре-

зультате, в федеральной целевой комплексной программе “Сохранение и развитие исторического центра г. Казани”, утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации № 180 от 14 марта 2001 г., предусмотрено целевое финансирование капитального ремонта здания КазНЦ РАН на 2003–2005 гг. в размере 30 млн. руб.

К настоящему времени подготовлен пакет необходимых документов от КазНЦ РАН, Реставрационное задание от Министерства культуры РТ, Техническое задание на разработку проектно-сметной документации на реконструкцию, реставрацию здания КазНЦ РАН за подписью Главы администрации г. Казани К. Ш. Исакова. Ведется планомерная работа по претворению в жизнь мероприятий, утвержденных в указанной программе, и привлечению дополнительных средств для полной реконструкции аварийных объектов и всех систем коммуникаций.

Вместе с решением столь масштабных проблем в 2001 г. проведен значительный объем ремонтно-строительных работ за счет собственных средств института и частично за счет централизованных источников финансирования.

Ремонтно-строительной группой численностью 9 человек во главе с мастером Гнездиловым И.Д. обеспечено проведение ремонта значительной части кровли в обоих зданиях, гараже и базе отдыха. Результатом явилось отсутствие серьезных протеканий кровли за период с лета 2001 по настоящее время. На всех объектах проведен текущий ремонт лабораторных, служебных, производственных и вспомогательных помещений на общей площади более 1.0 тыс. кв.м. Проведен ремонт большого количества мебели, оконных переплетов, дверных полотен, врезных замков, замена битых стекол и т.п. Отремонтированы котельная, трансформаторная подстанция, здание химического склада, бомбоубежище, актовый зал, большин-



Главное здание КФТИ
им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН
по ул. Сибирский тракт, 10/7
(фото автора).



Здание Казанского научного центра Российской академии наук по ул. Лобачевского, 2/31, где расположена часть научно-производственных и хозяйственных подразделений КФТИ им. Е. К. Завойского (фото автора).

ство помещений библиотеки, лестничные клетки, коридоры, столярная и механическая мастерская, помещения сантехников, электриков, ряд лабораторных помещений КФТИ и других институтов КазНЦ РАН по ул. Лобачевского. Проведена противопожарная обработка чердачного помещения.

В здании по ул. Сибирский тракт проведены ремонт крыльца и навеса над ним, фасадов здания, капитальный ремонт туалетов, холлов, коридоров и переходов на втором и третьем этажах, ряда лабораторий и кабинетов научных и служебных помещений, в т.ч. переоборудование генераторной, стеклодувной и к. № 213 для лаборатории радиационной физики и др.

Проведен значительный ежегодный ремонт на базе отдыха “Голубой залив”, где отдохнули и улучшили свое здоровье более 500 сотрудников и членов их семей.

Отделом главного энергетика в количестве 20 человек, в т.ч. 4 оператора котельной, под руководством Гайнуллина Р.Х., обеспечена безаварийная эксплуатация всех систем энергоснабжения и отопления, инженерных систем и коммуникаций. Кроме того, обеспечен ремонт оборудования трансформаторных подстанций и силовых щитов, монтаж нового уличного освещения с установкой сумеречных выключателей в обоих зданиях, монтаж нового освещения и оборудование охранно-пожарной сигнализации чердачного помещения и ряда лабораторий по ул. Лобачевского. Обеспечено проведение работ по монтажу охранно-пожарной сигнализации на всех этажах и многих лабораториях

здания по ул. Сибирский тракт, системы видеонаблюдения с выводом на пульт охраны и многое другое.

Отделом материально-технического снабжения из трех человек во главе с начальником Садыковым Н.Р. обеспечено бесперебойное снабжение материальными ресурсами всех подразделений института. Объем работ ОМТС за два последних года увеличился почти вдвое. Отдел активно участвует в реализации неликвидов и неиспользованного оборудования и материалов, обеспечивает мероприятия по использованию вторичных ресурсов, отходов производства, а также организует поверку метрологического оборудования подразделений и служб института.

Транспортное обслуживание института и техническое содержание транспортных средств обеспечивают четыре водителя, механик и слесарь.

В структуре АХЧ два АХО во главе с Макаровой Е.А. и Куприяновой О.А. с общей численностью МОП 30 человек, в т.ч. 4 контролера-вахтера. Они обеспечивают соответствующее обслуживание всех подразделений института, в т.ч. отдыхающих на базе отдыха “Голубой залив”.

Подводя итоги 2001 г. хочется надеяться на положительную оценку руководством и общественностью КазНЦ хозяйственной деятельности АХЧ КФТИ и выразить свою признательность всем работникам АХЧ за их кропотливый повседневный труд.

В. И. Рахамов
заместитель директора по общим вопросам



2001 год в цифрах

Кадры (на 31 декабря 2001 г.)

Уволены

1. Агапов Ю.Б., вед. инженер
2. Ватанина Э.В., вед. библиотекарь
3. Габитова Г.В., вед. библиотекарь
4. Евхимович В.А., инженер
5. Еремина Е.А., стажер-исследователь
6. Есин Е.А., инженер
7. Леонтьев В.Е., мл. науч. сотрудник
8. Сальманова Д.Н., библиотекарь 1 кат.
9. Супрун И.П., гл. спец. бухгалтерии
10. Трофанчук О.В., инженер
11. Хлебникова Т.А., вед. инженер ТБ и ОТ
12. Шаронова Г.П., гл. спец. библиотеки

Приняты

1. Баталов Р.И., мл. науч. сотрудник
2. Гайнуллин Р.Х., гл. энергетик
3. Гумерова Г.Э., зав. библиотекой
4. Дунаев Д.М., мл. науч. сотрудник
5. Исмаилова А.И., вед. инженер
6. Карсалова Н.А., вед. инженер
7. Марьин В.В., вед. инженер
8. Никонова И.В., инженер
9. Обыночный А.А., ст. науч. сотрудник
10. Рыбакова Л.А., вед. инженер ТБ и ОТ

Численность (человек)

- Общая численность – 298
(из них 71 совместитель)
- Научных сотрудников – 127
(из них 19 совместителей)
- Действительных членов АН Татарстана – 2
(из них 1 совместитель)
- Член-корреспондентов АН Татарстана – 1
- Член-корреспондентов Российской АН – 2
(из них 1 совместитель)
- Докторов наук – 31
(из них 9 совместителей)

- Кандидатов наук – 66
(из них 7 совместителей)

Средний возраст (лет)

- Докторов наук – 57.2
- Кандидатов наук – 46.8
- Научных сотрудников без степени – 35.3

Финансирование (в тыс. руб. на 1 января 2002 г.)

- Общий объем – 21556.8
- Финансирование РАН – 12357.7
- Гранты РФФИ (включая гранты на командировки) – 45/3213.9
- Международные и зарубежные фонды – 3/134.3
- Гранты Министерства науки – 6/636.7
- Интеграция – 110.0
- Гранты фонда НИОКР РТ – 34/3623.7
- Хозяйственные договора – 17/576.9
- Другие источники – 903.6

Темы научных исследований

Темы, финансируемые из госбюджета (Отделение общей физики и астрономии)

1. Теоретическое исследование резонансных, неравновесных и критических явлений в твердых телах.
2. Разработка методов целенаправленного изменения физических свойств твердых тел путем воздействия на систему структурных и примесных центров.
3. Исследование металлов в нормальном и сверхпроводящем состояниях резонансными методами.
4. Теоретические и экспериментальные исследования сильнокоррелированных электронных систем.
5. Синтез и исследование металлосодержащих жидких кристаллов и растворов парамагнетиков радиоспектроскопическими методами.
6. Исследование магнетизма и динамики кристаллической решетки в диэлектрических кристаллах и неупорядоченных системах методами радиоспектроскопии.

7. Когерентные явления в фотохимических реакциях.
8. Изучение электронного строения вещества методами ЯКР спектроскопии.
9. Исследование воздействия быстрых ионов и мощных энергетических импульсов на состав, кристаллическую структуру и фундаментальные свойства твердых тел (физические основы микро- и наноэлектроники).
10. Поиск и создание новых регистрирующих сред на основе полупроводников, полимеров и диэлектриков для магнитной и магнитно-оптической записи информации с использованием пучков быстрых ионов и мощных импульсов электромагнитного излучения.
11. Разработка физических принципов оптической памяти на основе фотонного эха.
12. Исследование микро- и наноструктур методами сканирующей зондовой микроскопии и оптическими методами.
13. Экспериментальное исследование архитектуры и характеристик элементов нейронной сети.
14. Моделирование нелинейных процессов в сложных физико-механических системах и повреждений в структурах на различных масштабных уровнях.

А также выполняются

- Темы, финансируемые за счет Президентской программы – 3
- Темы, финансируемые за счет Российского фонда фундаментальных исследований – 31
- Темы, финансируемые за счет Министерства промышленности, науки и технологий – 7
- Темы, финансируемые международными организациями – 4
- Темы, финансируемые за счет грантов Фонда научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ РТ – 18

Из общего количества тем в 2001 году завершено выполнение 19.

Публикации

Монографии – 2

Сборники – 2

Статьи всего – 152

из них:

- в зарубежных изданиях – 82
- в отечественных центральных журналах – 39
- в других изданиях – 33

Тезисы всего – 197

из них:

- в зарубежных изданиях – 117
- в других изданиях – 80

Производство жидкого гелия

В течение 2001 года в Отделе криогенной техники произведено 3650 литров жидкого гелия.

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, вошедшие в отчет РАН за 2000 год

Экспериментальное исследование эффекта близости в тонкопленочных системах сверхпроводник/ферромагнетик

При экспериментальном исследовании эффекта близости в слоистых пленках сверхпроводник/ферромагнетик установлено, что коэффициент прохождения куперовских пар через границу раздела сверхпроводник/ферромагнетик ограничен вследствие обменного расщепления зоны ферромагнетика.

Аннотация. Исследованы структурные, сверхпроводящие и магнитные свойства тонкопленочных систем Pb/Fe и V/Fe. Обнаружены осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в зависимости от толщины слоя Fe при постоянных толщинах слоев Pb и V. Данный эффект обусловлен реализацией состояния Ларкина-Овчинникова-Фульде-Феррела в системе сверхпроводник/ферромагнетик. На основании сравнения теоретических модельных расчетов с экспериментом установлено, что коэффициент прохождения куперовских пар через границу раздела сверхпроводник/ферромагнетик сильно ограничен. В качестве причин, ограничивающих прозрачность интерфейса сверхпроводник/ферромагнетик, обсуждаются обменное расщепление зоны проводимости ферромагнетика и степень гибридизации зон проводимости металлов, находящихся в контакте.

Приоритетное направление: 1.2.5.

Лаборатория физики перспективных металлов КФТИ КазНЦ РАН, Казанский госуниверситет, Рурский университет, Германия.

Научный руководитель: Гарифуллин И.А.

Отв. исполнители: Гарифьянов Н.Н., Горюнов Ю.В., Тагиров Л.Р., Лазар Л., Вестерхольт К., Цабель Х.

Публикации:

1. Lazar L., Westerholt K., Zabel H., Tagirov L.R., Goryunov Yu.V., Garifyanov N.N., Garifullin I.A.: Phys. Rev. B **61**, no. 5, 3711–3722 (2000)

Публикации сотрудников института

Монографии

1. Голованов А.Т., Бережной Д.В.: Метод конечных элементов в механике деформируемых твердых тел. Казань 2001. 301 с.
2. Шлянников В.Н.: Вычислительная механика деформирования и разрушения. Казань: Казан. гос. энерг. ун-т 2001. 251 с.

Сборники

1. Samartsev V.V. (ed.): Photon echo and coherent spectroscopy. Proc. of SPIE, vol. 4605. Washington 2001. 428 p.
2. Салахов М.Х., Самарцев В.В. (ред.): Когерентная оптика и оптическая спектроскопия. Тр. V Всерос. школы молодых ученых. Казань: изд-во КГУ 2001. 293 с.

Статьи

1. Akhmadullin I.Sh., Golenishev-Kutuzov V.A., Migachev S.A., Sadykov M.F.: Investigation of the Cotton-Mouthon effect in α -Fe₂O₃ easy-plane antiferromagnet. ФММ 92, № 6 (2001)
2. Alcaraz F.C., Bariev R.Z.: New exact integrable spin-1 quantum chains. J. Phys. A: Math. Gen. 34, 467–471 (2001)
3. Andrianov S.N., Bagautdinov I.R., Lutfullina N.M., Maksimuk V.S., Mirumyants S.O., Samartsev V.V., Shegeda A.M., Trofanchuk L.A., Zalilova N.E., Zuikov V.A.: Fiber optic read-out and write-down head for devices of information storage and processing. PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 134–140. Washington 2001.
4. Andrianov S.N., Bochkarev V.V., Samartsev V.V.: On the possibility of the gravitational wave detection in the scheme of active interferometer based on the quantum beat correlated laser. PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 228–232. Washington 2001.
5. Andrianov S.N., Samartsev V.V.: Quantum dynamic holography on the basis of the experiments on stopping of light pulses. PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 182–187. Washington 2001.
6. Andrianov S.N., Samartsev V.V.: Solid state lasers with internal laser refrigeration effect. PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of

7. SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 208–213. Washington 2001.
7. Anikeenok O.A., Augustyniak-Jablokow M.A., Ivanova T.A., Reiche P., Uecker R., Yablokov Yu.V.: Delocalisation of Cu²⁺ unpaired electron on the next nearest ligands in the LaSrGa_{0.995}Cu_{0.005}O₄ single crystal. Phys. Status. Solidi B 226, no. 1, R1–R3 (2001)
8. Augustyniak-Jablokow M.A., Yablokov Yu.V., Lukaszewicz K., Pietraszko A., Petrashen V.E., Ulanov V.A.: Continuous changes of the Jahn-Teller deformation of Cu(H₂O)₆ complex in ferroelastic Cs₂Cu(ZrF₆)₂·6H₂O crystal. Chem. Phys. Lett. 344, 345–351 (2001)
9. Batalov R.I., Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh.: Pulsed ion-beam synthesis of β -FeSi₂ precipitate layers in Si(100). Nanotechnology 12, 1–4 (2001)
10. Bayazitov R.M., Batalov R.I.: X-ray and optical characterization of β -FeSi₂ layers formed by pulsed ion-beam treatment. J. Phys. Cond. Matt. 13, 113–118 (2001)
11. Bietsch W., Mirea A., Domracheva N.: ESR on supramolecular grid structures with four Cu(II) centers. Electronic Properties of Molecular Materials (Kuzmany H., Fink J., Mehring M., Roth S., eds.), vol. 591, pp. 529–532. AIP 2001.
12. Bogdanova Kh.G., Bulatov A.R., Golenishev-Kutuzov V.A., Leont'ev V.E., Nazipov M.R., Shakirzyanov M.M.: Propagation of ultrasound waves in the vicinity of phase transitions in manganite perovskites. ФММ 92, № 5 (2001)
13. Bogdanova Kh.G., Golenishev-Kutuzov V.A., Kurkin M.I., Leont'ev V.E., Nazipov M.R., Petrov S.V., Shakirzyanov M.M.: The giant magnetoacoustic effect caused by nuclear magnetism. ФММ 92, № 6 (2001) in press.
14. Binnemans K., Deun R. Van, Gorller-Walrand C., Haase W., Bruce D.W., Malykhina L., Galyametdinov Yu.G.: Anisotropic molecular magnetic materials based on liquid-crystalline lanthanide complexes. Materials Science and Engineering C: Biomimetic and Supramolecular Systems 18, 247–254 (2001)
15. Binnemans K., Lodewyck K., Deun R. Van, Galyametdinov Yu.G., Hunz P., Meyer G.: Rare-earth complexes of mesomorphic Schiff's base ligand. Liq. Cryst. 28, no. 2, 279–285 (2001)
16. Bour G., Reinholdt A., Stepanov A.L., Keutgen C., Kreibig U.: Optical and electrical properties of hydrogenated yttrium nanoparticles. Eur. Phys. J. D 16, 219 (2001)
17. Brink J. van den, Khaliullin G., Khomskii D.: Reply to S.-Q. Shen' comment "Coulomb interaction and instability of CE-type structure in half-doped manganites". Phys. Rev. Lett. 86, 5843 (2001)
18. Bukharaev A.A., Nurgazizov N.I.: SPM nanotomography. Proc. of Int. Workshop "Scanning Probe Microscopy 2001", Nizhny Novgorod, 26.02–01.03, pp. 65–67. Nizhny Novgorod 2001.

19. Bukharaev A.A., Nurgazizov N.I., Mozhanova A.A., Ovchinnikov D.V.: AFM investigation of selective etching mechanism of nanostructured silica. *Surface Science* **482**, no. 5, 1319–1324 (2001)
20. Bukharaev A.A., Nurgazizov N.I., Skuratov V.A.: AFM visualization of single latent ion tracks in silicon dioxide using selective liquid etching. *Proc. of Int. Workshop "Scanning Probe Microscopy 2001"* Nizhny Novgorod, 26.02–01.03, pp. 97–99. Nizhny Novgorod 2001.
21. Falin M.L., Gerasimov K.I., Leushin A.M., Bill H., Lovy D., Sanadze T.I.: EPR and optical spectroscopy of SrF_2 doped with Yb^{3+} . *J. Alloys and Compounds* **323–324**, 692–695 (2001)
22. Fattakhov Ya.V., Galyautdinov M.F., L'vova T.N., Khaibullin I.B.: In situ investigation of phase transition of implanted silicon at powerful light irradiation. *Vacuum* **63**, no. 4, 649–655 (2001)
23. Fattakhov Ya.V., Galyautdinov M.F., L'vova T.N., Zakharov M.V., Khaibullin I.B.: Investigation of dynamics of phase transitions on silicon surface at light pulse heating. *PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V., ed.)*, vol. 4605, pp. 399–408. Washington 2001.
24. Faizrahmanov I.A., Bazarov V.V., Zhikharev V.A., Stepanov A.L., Khaibullin I.B.: Influence of Xe ion irradiation on the microstructure of diamond-like carbon. *Vacuum* **62**, 15 (2001)
25. Gainutdinova T.Kh., Andrianov V.V., Nazyrova R.R., Gainutdinov Kh.L.: The duration of persistence of the electrical characteristics of command neurons during acquisition of long-term sensitization in the common snail. *Neurosci. Behav. Physiol.* **31**, no. 1, 69–70 (2001)
26. Galyametdinov Yu.G., Haase W., Malykhina L., Prosvirin A., Bikchantaev I., Rakhmatullin A., Binne-mans K.: Synthesis, mesomorphism and unusual magnetic behaviour of lanthanide complexes with perfluorinated counterions. *Chem. Eur. J.* **7**, no. 1, 99–105 (2001)
27. Galyametdinov Yu.G., Ksenofontov V., Prosvirin A., Ovchinnikov I.V., Ivanova G.I., Gutlich P., Haase W.: First example of coexistence of thermal spin transition and liquid crystal properties. *Angewandte Chemie (Int. Edition)* **40**, no. 22, 4269–4271 (2001)
28. Gumarov G.G., Zhiharev V.V., Khaibullin I.B.: Radiation enhanced diffusion effect in ion beam synthesis of iron silicides. *Defect and Diffusion Forum* **194–199**, 217–223 (2001)
29. Horsch P., Khaliullin G.: Density response of cuprates and renormalization of breathing phonons. *Open problems in Strongly Correlated Electron Systems (Bonca J. et al., eds.)*, pp. 81–90. Boston: Kluwer-Academic 2001.
30. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipulse excitation of optical superradiance in multilevel systems. *PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.)*, vol. 4605, pp. 317–324. Washington 2001.
31. Kandrashkin Yu.E., Vollmann W., Stehlik D., Salikhov K.M., van der Est A.: The magnetic field dependence of the electron spin polarization in consecutive spin-correlated radical pairs in type I photosynthetic reaction centres. *Mol. Phys.* **100**, 1431–1443 (2002)
32. Kataev V., Choi K.-Y., Gruninger M., Ammerahl U., Buchner B., Freimuth A., Revcolevschi A.: Interplay of spin and charge dynamics in $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. Rev. B* **64**, 104422 (2001)
33. Kataev V., Choi K.-Y., Gruninger M., Ammerahl U., Buchner B., Freimuth A., Revcolevschi A.: ESR study of $(\text{Sr}, \text{La}, \text{Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. B* **312–313**, 614–616 (2002)
34. Kataev V., Choi K.-Y., Gruninger M., Ammerahl U., Buchner B., Freimuth A., Revcolevschi A.: Strong anisotropy of superexchange in the copper-oxygen chains of $\text{La}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2882 (2001)
35. Kessel A.R., Ermakov V.L.: Coding of quantum information on the virtual qubits. *PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.)*, vol. 4605, pp. 107–110. Washington 2001.
36. Khaliullin G.: Order from disorder: quantum spin gap in magnon spectra of LaTiO_3 . *Phys. Rev. B* **85**, 3950–3953 (2001)
37. Khaliullin G., Horsch P., Oles A.M.: Spin order due to orbital fluctuations: cubic vanadates. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3879–3882 (2001)
38. Khaibullin R.I., Lopatin O.N., Vagizov F.G., Bakhtin A.I., Khaibullin I.B.: Optical and Mössbauer investigations of iron ion-irradiated natural beryl. *Proc. of First Eurasia Conference on "Nuclear Science and its Application"*. Turkey, Izmir, 23–27 October 2000, pp. 999–1005. Izmir 2001.
39. Kozyreff G., Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Coussement R., Mandel P.: Inversionless amplification and propagation in an electronuclear level-mixing scheme. *Phys. Rev. A* **64**, 013810 (2001)
40. Kuhns P.L., Reyes A.P., Moulton W.G., Kukovitskii E.F., Vavilova E.L., Teitel'baum G.B.: The inhomogeneous magnetic fluctuations in the superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Proc. of PPHMF-IV. World Scientific* 2001 (accepted)
41. Lisin V.N.: Polarization stability of SIT solitons. *PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.)*, vol. 4605, 286–290. Washington 2001.
42. Lisin V.N.: Vector area theorem mapping in crystals and polarization stability of SIT solitons. *Письма ЖЭТФ* **74**, 314–317 (2001)
43. Lisin V.N., Zuikov V.A., Shgeda A.M.: Interaction of nonequilibrium phonons with different types of optically excited impurity centers. *PECS'2001: Pho-*

- ton Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 104–105. Washington 2001.
44. Mamin R.F.: Peculiarity of incommensurate phase connected with electronic system dynamics. *Ferroelectrics* **250**, 127–130 (2001)
 45. Mamin R.F., Inushima T.: Conductivity in boron-doped diamond. *Phys. Rev. B* **63**, no. 3, 3201 (2001)
 46. Mamin R.F., Inushima T.: High conductivity of synthetic diamond. *Synth. Met.* **121**, 1219–1220 (2001)
 47. Mironov V.S., Galyametdinov Yu.G., Ceulemans A., Gorller-Walrand C., Binnemans K.: Influence of crystal-field perturbations on the room-temperature magnetic anisotropy of lanthanide complexes. *Chem. Phys. Lett.* **345**, 1320–140 (2001)
 48. Mitrofanova T.G., Popov I.I., Samartsev V.V.: Possibilities of photon echo technique in sensing of atmosphere. PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 157–164. Washington 2001.
 49. Moiseev S.A., Kroll S.: Complete reconstruction of the quantum state of a single-photon wave packet absorbed by a Doppler-broadened transition. *Phys. Rev. Lett.* **87**, no. 17, 173601-1–173601-4 (2001)
 50. Mursalimov L.R., Salikhov K.M.: A manifestation of two-quantum transitions in the ODEPR spectra of spin-correlated radical pairs in mecelles. *Appl. Magn. Reson.* **21**, no. 2, 223–248 (2001)
 51. Nurgazizov N.I., Bukharaev A.A., Sugonyako A.V., Zhikharev V.V.: AFM investigation of radiation damage distribution in implanted silicon oxide by atomic force microscopy. *Phys. Low-Dim. Struct.* **3/4**, 97–102 (2001)
 52. Olivares J., Requejo-Isidro J., Coso R., Nalda R., Solis J., Afonso C.N., Stepanov A.L., Hole D., Townsend P.D., Naudon A.: Large enhancement of the third-order optical susceptibility in Cu-silica composites produced by low-energy high-current ion implantation. *J. Appl. Phys.* **90**, 1064 (2001)
 53. Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A.: MFM tip optimal parameters determination by the MFM images computer simulation. Proc. of Int. Workshop “Scanning Probe Microscopy 2001.” Nizhny Novgorod, 26.02–01.03, pp. 110–112. Nizhny Novgorod 2001.
 54. Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A., Borodin P.A., Biziaev D.A.: In situ MFM investigation of magnetization reversal in Co patterned microstructures. *Phys. Low-Dim. Struct.* **3/4**, 103–108 (2001)
 55. Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: On the collective effects application in laser cooling of solids. PECS' 2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 195–200. Washington 2001.
 56. Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Superradiance regime of laser cooling of crystals and glasses doped with rare earth ions. *Laser Phys.* **11**, 948–956 (2001)
 57. Pod'yachev S.N., Mustafina A.R., Morozov V.I., Ivanova G.I., Galyametdinov Yu.G., Konovalov A.I.: Liquid complexation of dialkylaminomethylated calix-[4]resorcinarenes with bis-acetonato and salicylal-diminato complexes of CuII. *Materials Science and Engineering C: Biomimetic and Supramolecular Systems* **18**, 141–145 (2001)
 58. Popok V., Azarko I., Odzhaev V., Toth A., Khaibullin R.: High fluence ion beam modification of polymer surface: EPR and XPS study. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* **178**, 305 (2001)
 59. Rameev B., Tarapov S., Yildiz F., Aktas B.: Magnetoresonance study of amorphous magnetic microwires. *J. of Science and Engineering (Firat Univ., Turkey)* **13**, 405 (2001)
 60. Rameev B., Khaibullin R.I., Aktas B., Zhikharev V.A., Stepanov A.L., Osin Yu.N., Bazarov V.V., Khaibullin I.B.: Granular metal-polymer composites formed by ion implantation technology. Proc. of First Eurasia Conference on Nuclear Science and its Application. Turkey, Izmir, 23–27 October 2000, pp. 921–931. Izmir 2001.
 61. Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: Light-induced radical pair intermediates in photosynthetic reaction centers in contact with an observer spin label: spin dynamics and effects on transient EPR spectra. *Mol. Phys.* **100**, 1311–1321 (2002)
 62. Samartsev V.V., Kalachev A.A.: Optical and gamma superradiance. *Hyperfine Interactions* **135**, 257–273 (2001)
 63. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Electromagnetically induced transparency for gamma-quanta using an RF field. *Hyperfine Interactions* **35**, 215–221 (2001)
 64. Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Coussemont R., Szabo A.: Low-frequency coherence excitation in the ground state manifold and saturation of the quasi-two-level atom by a resonant field. *Laser Phys.* **11**, 50–53 (2001)
 65. Shakurov G.S., Tarasov V.F.: High-frequency tunable EPR spectroscopy of Cr³⁺ in synthetic forsterite. *Appl. Magn. Reson.* **21**, 597–605 (2001)
 66. Shlyannikov V.N., Iltchenko B.V., Stepanov N.V.: Fracture analysis of turbine disks and computational-experimental background of the operational decisions. *Int. J. Engineering Failure Analysis* **8**, 461–475 (2001)
 67. Stepanov A.L., Bayazitov R.M., Hole D.E., Khaibullin I.B.: Pulsed ion beam annealing of europium implanted silicon. *Phil. Mag. Lett.* **81**, 29 (2001)
 68. Stepanov A.L., Bour G., Gartz M., Osin Yu.N., Reinholdt A., Kreibig U.: Synthesis of yttrium clusters. *Vacuum* **64**, 9 (2001)
 69. Stepanov A.L., Hole D.E.: Formation of metal nanoparticles in dielectrics by low energy ion implantation. Resent Research Development in Applied Physics (Pandalai A. Kuala, ed.), pp. 52–73. Transworld Research Network 2001.

70. Stepanov A.L., Hole D.E., Bukharaev A.A.: Interaction of high-power excimer-laser pulses with silicate glass containing ion implanted metal nanoparticles. *Vacuum* **64**, 169 (2001)
71. Stepanov A.L., Kreibig U., Hole D.E., Khaibullin R.I., Khaibullin I.B., Popok V.N.: Laser annealing of sapphire with implanted copper nanoparticles. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* **178**, 120 (2001)
72. Stepanov A.L., Zhiharev V.V., Khaibullin I.B.: Depth profiles of metal ions implanted in dielectrics at low energies. *Physics of the Solid State* **43**, 767–771 (2001)
73. Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.B.: Ballistic versus diffusive magnetoresistance of a magnetic point contact. *Phys. Rev. B* **63**, 104428–104431 (2001)
74. Tagirov L.R., Garifullin I.A., Garif'yanov N.N., Khlebnikov S.Ya., Tikhonov D.A., Westerholt K., Zabel H.: Re-entrant superconductivity in superconductor/ferromagnet layered system. *JMMM* (2002) accepted.
75. Teitel'baum G.B., Abu-Schiekah I.M., Bakharev O., Brom H.B., Zaanen J.: Spin dynamics and ordering of a cuprate stripe-antiferromagnet. *Phys. Rev. B* **63**, 020507 (2001)
76. Turanov A., Ovchinnikov I.V., Galyametdinov Yu.G., Bruce D.: Magnetic anisotropy of smectic A phase of lanthanide complexes derived from Schiff's bases and DOS, NO₃ anions. *Liq. Cryst.* **28**, no. 6, 845–850 (2001)
77. Tseitlin M.P., Salikhov K.M.: Two-dimensional EPR image visualization of a skin effect for a conductive coal cylinder. *Appl. Magn. Reson.* **20**, no. 1, 159 (2001)
78. Vodopyanov B.P., Tagirov L.R., Durusoy H.Z., Berezhnov A.V.: The influence of alloying or interdiffusion on the superconducting properties of ferromagnet/superconductor layered systems. *Physica C* **366**, no. 1, 31–42 (2001)
79. Voronkova V.K., Korobchenko L.V., Legendziewicz J.: EPR investigation of spin-spin interactions in mixed crystal of [Pr₂Cu(C₄O₄)₄(H₂O)₁₆]·2H₂O. *Mol. Phys. Report* **34/2** (2002) in press.
80. Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Andrianov S.N., Silaeva N.B., Samartsev V.V.: Optical superradiance in pyrene doped biphenyl crystals in a cavity. *PECS'2001: Photon Echo and Coherent Spectroscopy. Proc. of SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 4605, pp. 310–316. Washington 2001.
81. Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V., Silaeva N.B.: Triggered optical superradiance in biphenyl crystals with pyrene molecules. *Laser Phys.* **11**, no. 12, 1307–1311 (2001)
82. Zuikov V.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Phase conjugate photon induction decay in the regime of four wave mixing. *Laser Phys.* **11**, 361–363 (2001)
83. Алемасов В.Е., Бренерман М.Х., Кессель А.Р., Кравцов Я.И.: Стохастические модели тепломассопереноса и горения в турбулентных двухфазных течениях с крупномасштабными неоднородностями. *Материалы докл. Рос. нац. симпоз. по энергетике. Казань, 10–14 сентября, с. 297–301. Казань 2001.*
84. Альтшулер Т.С., Альтшулер А.Е., Бреслер М.С.: Исследование температурной зависимости энергетической щели додекаборида иттербия YbB₁₂ методом ЭПР. *ЖЭТФ* **120**, вып. 1(7), 127–133 (2001)
85. Андрианов В.В., Береговой Н.А., Гайнутдинова Т.Х., Гайнутдинов Х.Л.: Мембранные корреляты долговременной сенситизации оборонительного рефлекса у виноградной улитки. *Двигательная активность: нейрофизиологические исследования. Сб., посвящ. 125-летию кафедры физиологии КГУ, с. 148–162. Казань: Тан-Заря 2001.*
86. Андрианов С.Н., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение примесных кристаллов. *Квантовая электроника* **31**, 247–251 (2001)
87. Анашкин В.Н., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Хабилов Р.Ш., Шагалов В.А.: Магнитно-резонансный томограф “ТМР-0.06-КФТИ”. *Материалы докл. Рос. нац. симпоз. по энергетике. III-й международ. симпоз. по энергетике, окружающей среде и экономике, с. 159–162. Казань: КГЭУ 2001.*
88. Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: Моделирование электромагнитного поля в зондах сканирующей ближколевой оптической микроскопии. *Тр. V Всерос. молодежной школы по когерентной и нелинейной оптике. Казань, октябрь, с. 103–108. Казань 2001.*
89. Архипов Р.В., Овчинников И.В., Пименов Г.Г., Скирда В.Д.: Релаксационное поведение жидких кристаллов в объеме и порах. *Сб. “Структура и динамика молекулярных систем”, том. 8, с. 90–93. Йошкар-Ола 2001.*
90. Ахмадуллин И.Ш., Голенищев-Кутузов В.А., Мигачев С.А., Садыков М.Ф.: Акустический эффект Коттона-Мутона в гематите. *Изв. ВУЗов. Проблемы энергетики* **7**, 80–84 (2001)
91. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Рентгеновский и люминесцентный анализ мелкодисперсных пленок β-FeSi₂, сформированных в Si импульсной ионной обработкой. *ФТТ* **43**(9), 1569–1572 (2001)
92. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х., Визер Г., Кюне Х.: Импульсный синтез слоев β-FeSi₂ на кремнии, имплантированном ионами Fe⁺. *ФТП* **35**(11), 1320–1325 (2001)
93. Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Синтез и свойства тонких пленок β-FeSi₂ на Si, сформированных непрерывными и импульсными ионными пучками. *В: Тр. 3-го Всерос. совещ. “Нанопотоника”, с. 291–294. Нижний Новгород 2001.*
94. Бережной Д.В., Голованов А.И., Паймушин В.Н., Сидоров И.Н.: Исследование напряженно-деформированного и предельного состояния водона-

- сыщенных грунтов. Материалы VI Междунар. симпоз. “Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред”, с. 8–9. Москва 2001.
95. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Шакирзянов М.М.: Особенности распространения высокочастотного ультразвука в области структурных и магнитных фазовых переходов в манганите $\text{Ln}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$). ФТТ **43**, № 8, 1512–1515 (2001)
 96. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Леонтьев В.Е., Шакирзянов М.М.: ЯМР и динамика монодоменизации антиферромагнетика FeVO_3 в постоянном магнитном поле. ФММ **91**, № 5, 28–35 (2001)
 97. Бренерман М.Х.: О влиянии флуктуаций плотности компонент двухфазной турбулентной среды на интенсивность двухфазных взаимодействий. Материалы докл. Рос. нац. симпоз. по энергетике. Казань, 10–14 сентября, с. 432–436. Казань 2001.
 98. Бренерман М.Х., Евграфова Н.В.: Феноменологическая модель изотропной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси. Изв. РАН. Энергетика **3**, 106–113 (2001)
 99. Булярский С.В., Амброзевич А.С., Моливер С.С., Джабраилов Т.А., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Исследование кремния, имплантированного ионами углерода. Письма в ЖТФ **27**(6), 77–81 (2001)
 100. Ваньков Ю.В., Голованов А.И., Тюленева О.Н.: Численное исследование свободных колебаний бездефектных и дефектных осей грузовых вагонов МКЭ в трехмерной постановке. Тр. IV Междунар. конф. “Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решений”, с. 60–61. Санкт-Петербург 2001.
 101. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Сафин Р.Ш.: Исследование процессов восстановления $\text{Cr}^{6+} \rightarrow \text{Cr}^{5+} \rightarrow \text{Cr}^{3+}$ и особенности образования изолированных и ассоциированных комплексов хрома в ряде ионитов по данным ЭПР. Сорбционные и хроматографические процессы **1**, 236–243 (2001)
 102. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Квазизидкостное проявление электронной релаксации и молекулярной подвижности структурных элементов в ряде кристаллогидратов Cr^{3+} . Сб. “Структура и динамика молекулярных систем”, том 8, с. 14–19. Йошкар-Ола 2001.
 103. Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Легенджиевич Я., Очко Г.: ЭПР квазиодномерного кристалла $[\text{Nd}_2 \times (\text{Cl}_3\text{CCOO})_6(\text{H}_2\text{O})_3]_n \cdot \text{H}_2\text{O}$. ФТТ **43**, 299–306 (2001)
 104. Гайнутдинов Х.Л., Андрианов В.В., Архипова С.С., Гайнутдинова Т.Х., Голубев А.И., Звездочкина Н.В., Муранова Л.Н., Назырова Р.Р., Плещинский И.Н.: Исследование роли дофаминергических структур в стереотипном поведении, локомоции и долговременной сенситизации. Двигательная активность: нейрофизиологические исследования. Сб., посвящ. 125-летию кафедры физиологии КГУ, с. 136–147. Казань: Тан-Заря 2001.
 105. Галяутдинов М.Ф., Лобков В.С., Моисеев С.А., Неграшев И.В.: Исследование динамики неравновесных решеток, индуцированных фемтосекундными лазерными импульсами в пленках кремния. Физика и техника полупроводников **32**, № 12, 1428–1430 (2001)
 106. Герасимов К.И., Латыпов В.А., Леушин А.М., Фалин М.Л., Швейзер С., Шпэт И.М.: ДЭЯР и оптическая спектроскопия Yb^{3+} и KZnF_3 . V Всерос. молодежная науч. школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”. Казань, 26–28 октября 2001 г. Сб. стат., с. 147–152. Казань: изд-во КГУ 2001.
 107. Герасимов К.И., Латыпов В.А., Леушин А.М., Фалин М.Л.: Оптическая спектроскопия Yb^{3+} в SrF_2 и BaF_2 . V Всерос. молодежная науч. школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”. Казань, 26–28 октября 2001 г. Сб. стат., с. 63–68. Казань: изд-во КГУ 2001.
 108. Герасимов К.И., Леушин А.М., Фалин М.Л.: ЭПР и оптическая спектроскопия кубического центра Yb^{3+} в b-PbF_2 . ФТТ **43**, № 9, 1609–1612 (2001)
 109. Голенищев-Кутузов В.А., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Ахмадуллин И.Ш.: Экспериментальное исследование акустооптических процессов в магнитных материалах. Материалы докл. Рос. нац. симпоз. по энергетике. Казань, 10–14 сентября, с. 225–228. Казань 2001.
 110. Голованов А.И., Митряйкин В.И., Михайлов С.А., Конюхов А.В.: Расчет и экспериментальное исследование торсиона рулевой лопасти легкого вертолета из композиционных материалов. Материалы VI Междунар. симпоз. “Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред”, с. 41–43. Москва 2001.
 111. Голованов А.И., Митряйкин В.И., Фетисов Л.В.: Оценка прочности торсиона лопасти рулевого винта при действии эксплуатационных нагрузок. Внутрикамерные процессы в энергетических установках, акустика, диагностика, экология. Тезисы докл. Всерос. межвузовской науч.-техн. конф., с. 290–293. Казань: КВАКИУ 2001.
 112. Домрачева Н.Е., Овчинников И.В., Туранов А., Латтерманн Г., Фачер А.: Особенности магнитного и диэлектрического поведения мезофаз комплексов хрома(III) с азоциклическими лигандами. ФТТ **43**, № 6, 1145–1151 (2001)
 113. Кессель А.Р., Донская И.С.: Обменное взаимодействие изинговского типа для оптических ДУС. Письма в ЖЭТФ **74**, № 7, 283–286 (2001)
 114. Кессель А.Р., Ермаков В.Л.: Квантовая информатика на виртуальных спинах. Междунар. со-

- вещ. “Квантовые нейронные сети”. Москва, 23–26 января, с. 89–92. Москва: МИФИ 2001.
115. Кессель А.Р., Попов В.А.: Косвенное взаимодействие мессбауэровских ядер. *ФТТ* **43**, вып. 7, 1176–1180 (2001)
116. Латышов В.А., Фалин М.Л.: Автоматизация ЭПР-спектрометра ERS-231 на основе компьютера IBM PC. *ПТЭ* **4**, 164–166 (2001)
117. Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Вагизов Ф.Г., Базаров В.В., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Имплантация ионов железа в кристаллическую структуру природного берилла. *Записки ВМО* **4**, 122 (2001)
118. Малыхина Л.В., Просвирин А.В., Хаазе В., Галяметдинов Ю.Г.: Синтез и магнитные свойства жидкокристаллических комплексов лантаноидов с алкилсульфатным противоионом. *Изв. Акад. наук. Сер. хим.* № 3, 469–474 (2001)
119. Мамин Р.Ф.: К теории фазовых переходов в релаксорах. *ФТТ* **43**, № 7, 1262–1267 (2001)
120. Моисеев С.А.: Задержанная во времени квантовая интерференция и однофотонное эхо в когерентных трехуровневых средах. *Квантовая электроника* **31**, № 6, 557–563 (2001)
121. Моисеев С.А., фон Борщисковский Х.: Интерференция и излучение пары фотонов в когерентных трехуровневых средах. *Изв. РАН, Сер. физ.* **65**, № 7, 1046–1049 (2001)
122. Моисеев С.А., Носков М.И.: Электрон-колебательная динамика Na_2 -молекулярного газа при возбуждении квантовыми и фемтосекундными световыми полями. *Тр. V Всерос. молодежной школы по когерентной и нелинейной оптике.* Казань, октябрь, с. 199–204. Казань 2001.
123. Новицкий Г., Шова С., Воронкова В.К., Коробченко Л.В., Симонов Ю.А., Туртэ К.И.: Синтез и строение полимерного цианоацетата меди(II). *Журн. координационной хим.* **27**, № 11, 839–844 (2001)
124. Нургазизов Н.И., Бухараев А.А.: Методика определения толщины радиационно-поврежденного слоя диоксида кремния при помощи атомно-силового микроскопа. *Тр. XI Межнац. совещ. “Радиационная физика твердого тела”.* Севастополь, 25–30 июня, с. 433–436. Севастополь 2001.
125. Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Компьютерное моделирование МСМ-изображений в рамках статической модели распределения намагниченности и диполь-дипольного взаимодействия. *Журн. техн. физики* **71**, вып. 8, 85–91 (2001)
126. Овчинников И.В., Галяметдинов Ю.Г.: Магнитные жидкие кристаллы на основе координационных соединений. *Рос. хим. журн.* **45**, № 3, 74–79 (2001)
127. Петров Г.И., Матухин В.Л.: Исследования влияния р.ч. магнитного поля на релаксацию аморфных металлических сплавов при джоулевым отжиге. *Изв. ВУЗов* **3/4**, 110–114 (2001)
128. Петров Г.И., Матухин В.Л.: Рентгено-структурные и Мессбауэровские исследования аморфного $\text{Fe}_{81}\text{Si}_5\text{B}_{14}$ после джоулевого отжига при р.ч. магнитном поле. *Изв. ВУЗов* **7/8**, 64–68 (2001)
129. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Метод исключения бозонных операторов в проблеме лазерного охлаждения твердых тел. *ТМФ* **126**, 165–176 (2001)
130. Петухов В.Ю., Ибрагимова М.И., Хабибуллина Н.Р., Шулындин С.В., Осин Ю.Н., Жеглов Е.П., Вахонина Т.А., Хайбуллин И.Б.: Влияние структуры полимерной матрицы на ионно-лучевой синтез тонких металло-полимерных пленок. *Высокомолекулярные соединения. Сер. А* **43**, № 11, 1–11 (2001)
131. Попок В.Н., Азарко И.И., Карпович И.А., Хайбуллин Р.И., Степанов А.Л.: Влияние режимов ионной имплантации на парамагнитные и электрические свойства полиимида. *Материалы IV междунар. конф. “Взаимодействие излучений с твердым телом”.* Минск, 3–5 октября, с. 288–290. Минск 2001.
132. Степанов А.Л.: Зависимость распределения имплантированных ионов серебра по глубине от температуры облучаемого стекла. *Письма в ЖТФ* **27**, 39 (2001)
133. Степанов А.Л.: Оптическое пропускание диэлектрических слоев, содержащих неоднородно-распределенные по толщине образца металлические наночастицы. *Оптика и спектроскопия* **91**, 645 (2001)
134. Степанов А.Л., Жихарев В.А., Хайбуллин И.Б.: Особенности профилей распределения по глубине ионов металлов, имплантированных в диэлектрики при низких энергиях. *ФТТ* **43**, 733 (2001)
135. Степанов А.Л., Попок В.Н.: Последовательная лазерная и термическая модификация стекол, имплантированных ионами серебра. *ЖПС* **68**, 120 (2001)
136. Степанов А.Л., Попок В.Н., Холе Д.Е., Бухараев А.А.: Взаимодействие мощных импульсов лазерного излучения со стеклами, содержащими имплантированные металлические наночастицы. *ФТТ* **43**, 2100–2106 (2001)
137. Степанов А.Л., Оджаев В.Б., Холе Д.Е., Осин Ю.Н., Хайбуллин И.Б.: Лазерный отжиг Al_2O_3 , содержащего наночастицы меди, сформированные имплантацией. *Материалы IV междунар. конф. “Взаимодействие излучений с твердым телом”.* Минск, 3–5 октября, с. 300–302. Минск 2001.
138. Степанов А.Л., Холе Д.Е., Попок В.Н.: Влияние температуры поверхности облучаемой мишени на распределение наночастиц, сформированных имплантацией. *Письма в ЖТФ* **27**, 57 (2001)

139. Степанов А.Л., Оливарес Х., Рекуейо-Изидро Х., Косо Р., Налда Р., Солис Х., Афонсо К.Н., Холе Д.Е., Таунсенд П.Д., Наудон А.: Нелинейно-оптические свойства SiO_2 с синтезированными имплантацией наночастицами меди. Материалы IV междунар. конф. “Взаимодействие излучений с твердым телом”. Минск, 3–5 октября, с. 303–305. Минск 2001.
140. Туранова О.А., Галяметдинов Ю.Г., Овчинников И.В.: Синтез и жидкокристаллические свойства замещенных β -аминовинилкетонс и их комплексов с медью(II). Изв. Акад. наук. Сер. хим. № 5, 805–808 (2001)
141. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Жихарев В.А., Хайбуллин И.Б.: Влияние бомбардировки ионами углерода на наноструктуру алмазоподобных пленок. ФТП **35**, 612–618 (2001)
142. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Хайбуллин И.Б.: Структура и прочность имплантированных ионами азота пленок алюминия. Поверхность **6**, 95–98 (2001)
143. Фазлижанов И., Уланов В.А., Зарипов М.М.: Локальная структура центров двухвалентной меди в кристалле SrF_2 : исследование методом ДЭЯР. ФТТ **43**, вып. 6, 1018–1024 (2001)
144. Файзрахманов И.А., Курбатова Н.В., Базаров В.В., Галяутдинов М.Ф., Хайбуллин И.Б.: Влияние отжига в атмосфере азота на колебательный спектр и оптические свойства углеродных пленок. Алмазоподобные пленки и пленки родственных материалов. Сб. докл. XII-го Междунар. симпози. “Тонкие пленки в электронике”, с. 202–206. Харьков: ИПЦ “Контраст” 2001.
145. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Хайбуллин И.Б.: Исследование методом оптической спектроскопии микроструктуры пленок α -C, полученных ионно-стимулированным осаждением. Алмазоподобные пленки и пленки родственных материалов. Сб. докл. XII-го Междунар. симпози. “Тонкие пленки в электронике”, с. 137–140. Харьков: ИПЦ “Контраст” 2001.
146. Хайбуллин Р.И., Жеглов Е.П., Рамеев Б., Акташ Б., Попок В.Н., Азарко И.И., Кондюрин А.В.: ФМР исследования металл-полимерных композитных пленок, формируемых путем имплантации ионов железа в вязкую силаксановую подложку. Тр. IV Междунар. конф. “Взаимодействие излучений с твердым телом”. Минск, 3–5 октября, с. 318–320. Минск 2001.
147. Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Анализ НДС несущих систем автомобилей методом конечных элементов с распараллеливанием вычислений. Тр. II междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 76–79. Казань 2001.
148. Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Об одном методе построения адаптивных сеток. Тр. XIX междунар. конф. “BEM&FEM-2001”, с. 215–220. Санкт-Петербург 2001.
149. Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Программная реализация метода подконструкций для анализа сложных структур с распараллеливанием вычислений. Тр. XIX междунар. конф. “BEM&FEM-2001”, с. 221–224. Санкт-Петербург 2001.
150. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ильченко Б.В.: Использование вычислительных технологий при проектировании и доводке несущего кузова из стеклопластика. Тр. II междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 80–85. Казань, 2001.
151. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ильченко Б.В., Ларин В.М.: Математическая модель несущей системы автомобиля “Ока” и ее использование при выборе направлений модернизации конструкции. Тр. II междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 373–376. Казань, 2001.
152. Щеглов И.Ю., Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Стрельников Ю.П., Хайбуллин И.Б.: Синтез алмазоподобных пленок методом PCVD для просветления германия. Алмазоподобные пленки и пленки родственных материалов. Сб. докл. XII-го Междунар. симпози. “Тонкие пленки в электронике”, с. 160–162. Харьков: ИПЦ “Контраст” 2001.

Гранты

Гранты Президиума РАН

1. *Квантовая макрофизика*. Лазерное охлаждение примесных кристаллов и интерференционные эффекты квантовой оптики. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
2. *Квантовая макрофизика*. Создание лазера на свободных электронах и его применение в физике, химии и биологии. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
3. *Низкоразмерные квантовые структуры*. Магнитнорезистивные свойства низкоразмерных структур. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.

Гранты по программам Министерства промышленности, науки и техники

1. *Актуальные проблемы в физике конденсированных сред*. Радиоспектроскопические исследования высокотемпературных сверхпроводников. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.
2. *Перспективные технологии и устройства микро- и нанoeлектроники*. Разработка нового метода мо-

- ниторинга in-situ процессов химического травления в технологии субмикронной и нанолитографии. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.
3. *Перспективные технологии и устройства микро- и нанoeлектроники*. Разработка новой технологии формирования субмикронных слоев силицидов для приборов микро- и нанoeлектроники, в том числе для силидизации контактов к слоям $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с использованием специальных режимов имплантации и импульсных энергетических воздействий. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.; Петухов В.Ю., д.ф.-м.н.
 4. *Физика квантовых и волновых процессов. Фундаментальная спектроскопия*. Разработка физических принципов оптимального функционирования оптических эхо-процессоров в видимом диапазоне длин волн. Поиск перспективных носителей информации на основе кристаллов ван-флековских парамагнетиков. Исследование взаимодействия мощного лазерного излучения с веществом. Нелинейная лазерная спектроскопия атомов, молекул, кластеров, твердых тел и поверхности, квантовая оптика. Нестационарная фонон-фотонная когерентная спектроскопия. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
 5. *Физика твердотельных наноструктур*. Процессы магнитного упорядочения в планарных магнитных наноструктурах. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.
 6. *Фуллерены и атомные кластеры*. Радиоспектроскопия фуллеренов и их производных. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
 7. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: Двухквантовые переходы в спектрах ЭПР спин-коррелированных радикальных пар (№ 01-03-32270)
 8. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Исследование ионных механизмов долговременной сенситизации и ассоциативного обучения у виноградной улитки (№ 01-04-46764)
 9. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Мультимедийная энциклопедия беспозвоночных животных (№ 00-07-90144)
 10. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Эффекты близости в гетероструктурах сверхпроводник-ферромагнетик (№ 99-02-17393)
 11. Иванова Т.А., к.ф.-м.н.: Электрон-фононные взаимодействия в системах с орбитальной неустойчивостью (№ 01-03-32266)
 12. Куковицкий Е.Ф.: Рост углеродных нанотрубок на поверхности металлов (№ 01-03-32272)
 13. Лисин В.Н., к.ф.-м.н.: Нестационарная фонон-фотонная спектроскопия (№ 00-02-16510)
 14. Лобков В.С., к.ф.-м.н.: Исследование механизмов фототока в тонкопленочных полимерных компонентах (№ 01-03-32280)
 15. Мамин Р.Ф., к.ф.-м.н.: Исследование особенностей различных типов структурных фазовых переходов в сегнетоэлектриках, связанных с динамикой электронной подсистемы (№ 01-02-16350)
 16. Моисеев С.А., д.ф.-м.н.: Квантовая когерентность в молекулярной динамике сверхбыстрых фотохимических процессов (№ 01-03-32730)
 17. Мосина Л.В., к.ф.-м.н.: Интегрируемые модели статистической физики сильно коррелированных частиц (№ 01-02-16644)
 18. Мустафин Р.Г., к.ф.-м.н.: Мюонное спиновое эхо в нулевом внешнем магнитном поле (№ 00-02-16192)
 19. Овчинников И.В., д.ф.-м.н.: Магнитные жидкие кристаллы на основе координационных соединений (№ 99-03-32716)
 20. Туранов А.Н. (молодежный грант № 01-03-06254)
 21. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Изучение микромагнетизма методами магнитно-силовой и магнитно-оптической сканирующей микроскопии (№ 99-02-17462)
 22. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Поддержка проведения международного симпозиума-семинара "Современные достижения магнитного резонанса-2001"
 23. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Элементарные фотохимические процессы (№ 00-15-97410, грант ведущей научной школы)
 24. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Исследование фундаментальных проблем оптической фазовой памяти на основе долгоживущего фотонного эха и других оптических переходных явлений (№ 99-02-18495)
 25. Степанов А.Л., к.ф.-м.н.: Синтез материалов с контролируемыми нелинейно оптическими свойствами на основе диэлектриков с имплантирован-

Международные гранты

1. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Материалы и технологии XXI века. Грант CRDF (совместно с КГУ)
2. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Оптическое сверхизлучение и оптические переходные процессы в протяженных резонансных и оптических волноводных средах. Грант Международного научно-технического центра

Гранты Российского фонда фундаментальных исследований

1. Альтшулер Т.С., к.ф.-м.н.: Исследование сильно-коррелированных электронных систем методами магнитной радиоспектроскопии (№ 00-02-16080)
2. Вишневская Г.П., д.ф.-м.н.: Микроструктура, молекулярная подвижность и свойства многокомпонентных растворов парамагнитных комплексов. Проявление немарковских процессов в спиновой релаксации (№ 00-03-32915)
3. Фролова Е.Н., к.ф.-м.н. (молодежный грант № 01-03-06165)

- ными металлическими наночастицами (№ 99-02-17767)
21. Сулейманов Н.М., д.ф.-м.н.: Магнитные дефекты и пиннинг в высокотемпературных сверхпроводниках (№ 99-02-18064 Н)
 22. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.: Корреляция зарядов и спинов в металлоксидах (№ 01-02-17533)
 23. Уланов В.А., к.ф.-м.н.: Многоядерные примесные кластеры ионов металлов переходной группы в кристаллах с суперионной проводимостью: электронная и молекулярная структуры и физические свойства (№ 01-02-17718)
 24. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.: Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в диэлектрических кристаллах (№ 99-02-17481)
Герасимов К.И. (молодежный грант № 01-02-0613)
 25. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Ионный синтез, легирование и фотостимулированная рекристаллизация тонких субмикронных пленок и наноструктур в различных матрицах (№ 00-15-96615, грант ведущей научной школы)
 26. Хайбуллин Р.И., к.ф.-м.н.: Синтез тонких пленок и наноструктур примеси в вязких органических средах (№ 99-03-32548)
 27. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Структурно-фазовые переходы в полупроводниках в сильно неравновесных условиях воздействия мощными импульсами (№ 01-02-16649)
 28. Январев Е.А.: Ядерная суперфлуоресценция в ^{178}Hf при распространении гамма-импульса в резонансной среде произвольной плотности (№ 00-02-16512a)
 6. Галаяутдинов М.Ф., к.ф.-м.н.: Экологический мониторинг поверхностных и грунтовых вод методом лазерного зондирования флуоресцентных индикаторов
 7. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Эффект близости в гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик
 8. Гарифьянов Н.Н., к.ф.-м.н.: Магнитные и сверхпроводящие особенности сильнокоррелированных электронных систем (радиоспектроскопия и СКВИД-магнитометрия)
 9. Голубев А.И. (КГУ): Долговременная сенситизация как модель экспериментальной патологии: исследования биофизических и нейрохимических механизмов и эффектов воздействия на нее лекарственных веществ
 10. Зарипов М.М., д.ф.-м.н.: Динамика восьмикоординированных примесных ян-теллеровских комплексов с трехкратно-вырожденными основными орбитальными состояниями
 11. Кессель А.Р., д.ф.-м.н.: Разработка прототипов квантового компьютера на основе резонансной спектроскопии
 12. Куковицкий Е.Ф.: Синтез нанотрубного углерода на поверхности массивных каталитически активных металлов
 13. Матухин В.Л., д.ф.-м.н.: Свойства галогенированной ВТСП керамики и возможности ее применения в энергетике
 14. Несмелова И.М. (ГИПО): Электрофизические свойства перспективных полумагнитных твердых растворов марганец-ртуть-теллур, предназначенных для ИК-оптоэлектроники
 15. Овчинников И.В., д.ф.-м.н.: Физические эффекты и приложения, основанные на применении магнитных жидких кристаллов
 16. Петухов В.Ю., д.ф.-м.н.: Ионно-лучевой синтез ферромагнитных наноструктур в полимерах
 17. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Развитие новых методов управления быстропротекающими фотохимическими реакциями: когерентный контроль элементарных стадий фотохимических реакций
 18. Сулейманов Н.М., д.ф.-м.н.: Развитие новых методов когерентной мюонной спектроскопии для изучения новых перспективных материалов и динамических процессов
 19. Таланов Ю.И., д.ф.-м.н.: Исследование структуры и динамики вихревой системы в оксидных сверхпроводниках с помощью локальных зондов
 20. Тарасов В.Ф., к.ф.-м.н.: Разработка и применение новых резонансных методов на основе субмиллиметровой ЭПР спектроскопии для контроля качества материалов квантовой электроники и оптоэлектроники
 21. Файзрахманов И.А., к.ф.-м.н.: Влияние допирующей примеси на колебательный спектр, оптические и электрические свойства графеновых наноструктур

Гранты Фонда НИОКР Республики Татарстан

1. Аминова Р.М., д.ф.-м.н.: Изучение фотоиндуцированных процессов перегруппировки производных азометинов в пико- и фемтосекундной шкале времен
2. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.: Разработка нетрадиционных импульсно-пучковых технологий для управления свойствами материалов микроэлектроники
3. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.: Изучение *in situ* физико-химических процессов на границе жидкость-твердое тело новыми методами сканирующей зондовой микроскопии
4. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: Развитие метода определения времени жизни короткоживущих промежуточных состояний в химических реакциях по обратному сдвигу ЭПР сигнала
5. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Исследование физических основ технологии сенсорных элементов молекулярной электроники: формирование контактов носелективных мембран и активных областей микропреобразователей

22. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.: Оптико-магнитная спектроскопия (ЭПР, ДЭЯР, ОДМР) примесных ионов во фторидных материалах
23. Фаттахов Я.И., к.ф.-м.н.: Экспериментальное и теоретическое исследование динамики структурных и фазовых переходов на поверхности полупроводников в нестационарных условиях
24. Хабилов Р.Ш.: Разработка оригинального программного обеспечения медицинского магнитно-резонансного томографа
25. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Ионный синтез тонких металлических пленок и наноструктур в вязких полимерных матрицах
26. Черников С.К., к.ф.-м.н.: Разработка математической модели и расчетное обоснование проблемы модернизации автомобиля “Ока”
27. Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н.: Исследование магнитоупругих свойств ферро- и антиферромагнетиков методами ядерного магнитного и магнитоакустического резонансов с целью поиска эффектов, перспективных для твердотельной электроники
28. Штырков Е.И., д.ф.-м.н.: Разработка и исследование процесса лазерной обработки трущихся поверхностей деталей машин, функционирующих в режиме граничного трения
29. Яхин Р.Г., к.ф.-м.н.: Датирование археологических находок органического происхождения методом электронного парамагнитного резонанса и ЭПР-дозиметрия исследуемых образцов археологических находок

Защиты, награды, государственные стипендии

Защита диссертаций

В 2001 году кандидатские диссертации защитили следующие сотрудники:

1. Бикчантаев Искандер Ильдарович
01.04.05 “Оптика”
2. Гумаров Габдрауф Габдрашитович
01.04.07 “Физика конденсированного состояния”
3. Жеглов Евгений Петрович
01.04.11 “Физика магнитных явлений”
4. Ильясов Наиль Ахатович
01.04.17 “Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва”
5. Леонтьев Вячеслав Евгеньевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”

Награждения

- Государственная премия РТ в области науки присуждена Овчинникову И.В., Галяметдинову Ю.Г., Ивановой Г.И., Бикчантаеву И.Г. за цикл работ “Создание магнитных жидких кристаллов”
- Международная премия фонда Александра фон Гумбольдта присуждена Салихову К.М.
- Почетное звание “Заслуженный деятель науки РФ” присвоено Самарцеву В.В.
- Почетными грамотами РАН были отмечены Воронкова В.К., Куркина Н.Г., Петухов В.Ю., Шегада А.М.

Государственные научные стипендии

Лауреатами Государственных научных стипендий на 2000–2003 гг. являются следующие сотрудники:

- Вишневская Г.П., д.ф.-м.н., проф.
- Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н., г.н.с.
- Кессель А.Р., д.ф.-м.н., проф., заведующий лабораторией резонансных явлений
- Овчинников И.В., д.ф.-м.н., проф., заведующий лабораторией магнитной радиоспектроскопии
- Самарцев В.В., д.ф.-м.н., заведующий лабораторией нелинейной оптики
- Штырков Е.И., д.ф.-м.н., г.н.с.

Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ

1. International workshop “Modern development of magnetic resonance imaging and spectroscopy. Basic physics and applications in medicine and biology”, June 11–13, 2001, Kazan. (Совместно с Казанским государственным университетом, АН Татарстана, ISMAR, администрацией г. Казани)
2. VII Международный симпозиум по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (ФЭКС), 20–24 июня 2001, Новгород Великий. (Совместно с Новгородским государственным университетом)
3. Annual workshop “Modern development of magnetic resonance”, October 1–3, 2001, Kazan.
4. XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, September 24–28, 2001, Kazan. (Совместно с Научным советом по спектроскопии атомов и молекул РАН и Казанским государственным университетом)

5. Конференция молодых ученых КФТИ 2001, 25 января 2002, Казань.
6. Итоговая научная конференция КазНЦ РАН, секция физическая, 4 и 8 февраля 2002, Казань.
7. V Российская конференция по физике полупроводников, 10–14 сентября 2001, Нижний Новгород. (Совместно с Институтом физики микроструктур РАН, Нижегородским государственным университетом)
8. VIII Всероссийская школа для молодых ученых по нейробиологии, 25–27 сентября 2001, Казань. (Совместно с АН Татарстана, Казанским государственным медицинским университетом, Казанским государственным университетом, Казанским институтом биохимии и биофизики КазНЦ РАН)
9. V Всероссийская молодежная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”, 26–28 октября 2001, Казань. (Совместно с Казанским государственным университетом)
10. V Молодежная школа “Новые аспекты применения магнитного резонанса”, 1–3 ноября 2001, Казань. (Совместно с Казанским государственным университетом)

Программы конференций, организованных институтом

Annual workshop “Modern development of magnetic resonance”

Salikhov K.M.: Opening of the workshop

- Zaripov M.M. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Magnetic resonance in Kazan and S. A. Altshuler: reminiscences
- Yablokov Yu.V. (Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Poznan, Poland): Paramagnetic resonance of oxides. Crystals or ceramic?
- Prokhorov A.M., Manenkov A.A. (Institute of General Physics, Moscow, Russia): Reminiscences about S. A. Altshuler
- Golenischev-Kutuzov V.A. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): The main discovery of S. A. Altshuler
- Eremin M.V. (Kazan State University, Kazan, Russia): Crystal field and Dzyaloshinsky-Moriya interaction in $\text{La}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{MnO}_3$: an EPR study
- McLauchlan K.A. (The University of Oxford, Oxford, UK): The chemical effects of very low static and time-varying magnetic fields
- Tseitlin M.P., Salikhov K.M. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): EPR imaging of lossy objects
- Forrer J. (ETH, Zurich, Switzerland): From the first down to the present EPR detection systems: investigations and modern applications

- Annino G. (Institute of Atomic and Molecular Physics, Pisa, Italy): Development of an effective whispering gallery mode-based EPR probehead
- Vavilova E.L., Garif'yanov N.N. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): The high-temperature magnetic anomalies in NaWO_3 single crystals at low sodium content
- Stegmann H. (Institute of Organic Chemistry, Tübingen, Germany): Molecular and chiral recognition by EMR
- Moiseev S.A. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Principles of the photon echo for the complete reconstruction of the quantum states of the light
- Corvaja C. (University of Padua, Padua, Italy): Spin polarization of stable free radicals by singlet oxygen
- Eremina R.M. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Temperature dependence of EPR spectra of $\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{GeO}_3$
- Falin M.L., Gerasimov K.I. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia), Leushin A.V. (Kazan State University, Kazan, Russia), Bill H. (University of Geneva, Geneva, Switzerland): EPR and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in fluorite-type crystals

Lecture of the Zavoisky Awardee 2001:

McLauchlan K.A. (The University of Oxford, Oxford, UK): Flash photolysis electron spin resonance

Конференция молодых ученых КФТИ 2001

- Архипова С.С., Петров К.М.: Мультимедийная библиотека беспозвоночных животных
- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Крыжков Д.И., Кудоярова В.Х.: Люминисцентные свойства преципитатов дисилицида в кремнии
- Булатов А.Р., Капралов А.В.: Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$
- Герасимов К.И., Фалин М.Л., Леушин А.М.: ЭПР и оптическая спектроскопия и анализ структуры кубических и тригональных центров иона Yb^{3+} в кристаллах SrF_2
- Калинкин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Поляризационные свойства оптического сверхизлучения в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$
- Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Проявление двухквантовых переходов в спектрах ОД ЭПР спинкоррелированных радикальных пар в мицеллах
- Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Моделирование процессов перемагничивания в планарных ферромагнитных микроструктурах
- Петрушкин С.В.: Лазерное охлаждение активных элементов твердотельных лазеров
- Туранова О.А., Вен Ван, Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.: Первые жидкокристаллические лантаноиды как поляризованные среды для органических светодиодов

*Итоговая научная конференция**КазНЦ РАН*

Пленарное заседание

Тарасов В.Ф.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия

Секция физическая

Архипова С.С., Гайнутдинов Х.Л., Черников С.К. (КФТИ КазНЦ РАН), Голубев А.И., Сабиров Р.М. (КГУ): Гипертекстовая энциклопедия беспозвоночных животных

Ахмадуллин И.Ш., Голенищев-Кутузов В.А., Мигачев С.А., Садыков М.Ф.: Магнитное двулучепреломление ультразвука в гематите

Ахмадуллин И.Ш., Мигачев С.А., Садыков М.Ф.: АС-электропроводность кристаллов ниобата лития
Баязитов Р.М., Мустафин Р.Г., Нурутдинов Р.М.: Модернизация импульсного ионного ускорителя и его экспериментальные возможностиБогданова Х.Г., Булатов А.П., Голенищев-Кутузов В.А., Шакирзянов М.М., Капралов А.В.: Особенности акустических и магнитных свойств манганата типа $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ в области температур 310–100 К

Бренерман М.Х., Евграфова Н.В.: Феноменологическая модель свободной турбулентности и миграции в ней пассивной примеси

Валидов А.А., Еремина Р.М. (КФТИ КазНЦ РАН), Еремин М.В. (КГУ), Катаев В.Е. (КФТИ КазНЦ РАН): Анизотропное обменное взаимодействие в LiCuVO_4

Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Электронная релаксация в водных и водно-глицериновых растворах нитрата гадолиния

Водопьянов Б.П. (КФТИ КазНЦ РАН), Тагиров Л.Р. (КГУ), Ефетов К.Б. (ИТФ им. Ландау РАН): Гигантские воспроизводимые флуктуации магнетосопротивления в квантовых магнитных контактах

Воронкова В.К., Галеев Р.Г., Коробченко Л.Г.: ЭПР спектроскопия некоторых квазиодномерных соединений

Галеев Р.Т., Фахрутдинов А.Р., Ермаков В.Л., Анашкин В.Н., Шагалов В.А.: Программные и технические средства для улучшения однородности магнитного поля медицинского ЯМР-томографа

Галяметдинов Ю.Г., Просвирин А.В., Овчинников И.В., Иванова Г.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Ксенофонов В.А., Гютлих Ф. (Майнцский университет, Майнц), Хаазе В. (Технический университет, Дармштадт): Первый пример сосуществования теплового спинового перехода и жидкокристаллических свойств

Герасимов К.И., Латыпов В.А. (КФТИ КазНЦ РАН), Леушин А.М. (КГУ), Фалин М.Л. (КФТИ КазНЦ

РАН), Аникеев О.А. (КГУ): ЭПР, ДЭЯР и магнито-оптическая спектроскопия ионов Yb^{3+} в KZnF_3 Горюнов Ю.В.: Наблюдение ферромагнитного резонанса в ультратонких эпитаксиальных пленках $\text{Fe}(001)$, разделенных прослойкой Cr переменной толщиныГумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Шустов В.А., Хайбуллин И.Б. (КФТИ КазНЦ РАН), Пчелеков О.П., Машанов В.И. (ИИФП СО РАН): Ионно-лучевой синтез проводящих слоев в Si и SiGe структурах
Еремина Р.М., Гладков В.А. (ИФП им. П. Я. Капицы РАН): Температурная зависимость g -факторов в CuGeO_3

Захаров М.В.: Фрактальное распределение локальных областей плавления на поверхности полупроводников, подвергнутых импульсному фотонному воздействию

Зиновьев В.П. (ФТИНТ АН Украины), Калачев А.А., Самарцев В.В. (КФТИ КазНЦ РАН): Триггерное оптическое сверхизлучение в кристалле дифенила с пиреном

Иванова Т.А., Петрашень В.Е. (КФТИ КазНЦ РАН), Аугустиныяк М.А., Яблоков Ю.В. (ИМФ РАН, Познань): Ян-теллеровские центры низкоспинового Ni^{3+} в оксидных керамикахКессель А.Р., Донская И.С.: Изинговское обменное взаимодействие оптических двухуровневых систем
Кондрашкин Ю.Е., Салихов К.М.: (КФТИ КазНЦ РАН), Фольманн В., Штелих Д., ван дер Эст А. (Берлинский свободный университет, Берлин): Зависимость от магнитного поля поляризации электронных спинов в последовательных спин-коррелированных радикальных парах в реакционном центре фотосистемы

Лисин В.Н.: Векторная теорема площадей в кристаллах и поляризационная стабильность солитонов при самоиндуцированной прозрачности

Лисин В.Н., Зуйков В.А., Шегада А.М.: Взаимодействие неравновесных фононов с различными типами оптически возбужденных примесных центров

Мамин Р.Ф. (КФТИ КазНЦ РАН), Инушима Т. (Токийский университет, Хиратцука): Проводимость сильно допированного голубого алмаза

Моисеев С.А. (КФТИ КазНЦ РАН), Кролл С. (Лундский технологический институт, Лунд): Полное восстановление квантового состояния однофотонного волнового пакета поглощенного резонансным неоднородно уширенным переходом

Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Проявление двухквантовых переходов в спектрах ОД ЭПР спин-коррелированных радикальных пар в мицеллах

Нургазизов Н.И., Бухараев А.А., Сугоняко А.В., Жихарев В.А.: Радиационно-стимулированное растворение диоксида кремния: эксперимент и компьютерное моделирование

- Салихов К.М. (КФТИ КазНЦ РАН), Зех Ш., Штелих Д. (Берлинский свободный университет, Берлин): Светоиндуцированные радикальные пары в фотосинтетическом реакционном центре в контакте со спином-наблюдателем: спиновая динамика и ее проявления во время-разрешенных спектрах ЭПР
- Салихов К.М., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Анашкин В.Н., Шагалов В.А., Аминов К.Л., Хабипов Р.Ш., Романов В.С. (КФТИ КазНЦ РАН), Курбанов Р.Х. (КИББ КазНЦ РАН): Медицинский магнитно-резонансный томограф "ТМР-0.06-КФТИ"
- Соловаров Н.К.: О коррелированной динамике замкнутой квантовой системы
- Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С.: Высокочастотная перестраиваемая ЭПР спектроскопия Cr^{3+} в синтетическом форстерите
- Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П.: Влияние локальных деформаций на статические и динамические свойства ян-теллеровских комплексов меди и серебра в смешанных кристаллах группы флюорита
- Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П., Еремина Р.М.: Тримеры примесных двухвалентных ионов меди в кристаллах CaF_2 : структура и механизмы образования
- Фазлижанов И.И., Уланов В.А., Зарипов М.М., Еремина Р.М.: ДЭЯР парных центров титана в SrF_2
- Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Курбатова Н.В., Галютдинов М.Ф., Штырков Е.И., Хайбуллин И.Б.: Влияние термического отжига в атмосфере азота на оптические свойства и колебательный спектр графеновых наноструктур
- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Математическая модель и анализ НДС несущей системы автомобиля КамАЗ-53212
- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Программная реализация метода подконструкций для анализа сложных структур с распараллеливанием вычислений
- Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ильченко Б.В.: Математическая модель несущей системы автомобиля "Ока" и ее использование при выборе направлений модернизации конструкции
- Шахмуратов Р.Н.: Запись и считывание информации с помощью бихроматического поля

Секция биофизики

- Анрианов В.В., Назырова Р.Р., Гайнутдинов Х.Л. (КФТИ КазНЦ РАН), Голубев А.И. (КГУ): Изучение длительности сохранения изменений электрических характеристик командных нейронов оборонительного поведения при формировании долговременной сенситизации после инъекции 6-гидроксидофамина (6-OHDA)

- Гайнутдинова Т.Х., Гайнутдинов Х.Л.: Электрофизиологическое исследование роли серотонина при ассоциативном обучении у виноградной улитки
- Мещанинова А.В., Андрианов В.В.: Долговременные эффекты введения хлопромазина у виноградной улитки
- Муранова Л.Н., Исмаилова А.И.: Сравнительное исследование поведенческих реакций виноградной улитки при воздействии галоперидола и 6-гидроксидофамина
- Мухамедшина Д.И., Гайнутдинова Т.Х.: Исследование роли кальция в электрогенезе командных нейронов у интактных и обученных виноградных улиток
- Назырова Р.Р., Исмаилова А.И., Мухамедшина Д.И.: Сравнение механизмов формирования условного рефлекса на отвергание пищи и обстановочного условного рефлекса

Гости института

1. Доктор Роланд Фрелих, Университет Мюнстера, Мюнстер, Германия (совместные научные исследования)
2. Доктор Герда Хартман, "Биохимфар", Берлин, Германия (участие в симпозиуме)
3. Профессор Карло Корвайа, Университет Падуи, Падуя, Италия (участие в симпозиуме)
4. Профессор Хартмут Штегманн, Университет Тюбингена, Тюбинген, Германия (участие в симпозиуме)
5. Доктор Джузеппе Эмануэле Аннино, Институт атомной и молекулярной физики, Пиза, Италия (участие в симпозиуме)
6. Профессор Кис Алан МакЛохлан, Оксфордский Университет, Оксфорд, Великобритания (участие в симпозиуме)
7. Профессор Йорг Форрер, Федеральный технологический институт, Цюрих, Швейцария (участие в симпозиуме)
8. Доктор Мария Аугустиньяк-Яблоков, Институт молекулярной физики ПАН, Познань, Польша (совместные научные исследования, участие в симпозиуме)
9. Профессор Юрий Васильевич Яблоков, Институт молекулярной физики ПАН, Познань, Польша (совместные научные исследования, участие в симпозиуме)

9. Доктор Коэн Биннеманс, Католический Университет Левена, Левен, Бельгия (совместные научные исследования, участие в симпозиуме)
10. Академик Леонид Вениаминович Келдыш, Советник Президиума РАН, член Бюро ООФА, г. Москва
11. Академик Вячеслав Васильевич Осико, Научный центр лазерных материалов и технологий ИОФАН, г. Москва
12. Академик Владислав Борисович Тимофеев, ИФТТ РАН, г. Черноголовка, Московской обл.
13. Академик Ренад Зиннурович Сагдеев, Заместитель председателя президиума СО РАН, г. Новосибирск
14. Профессор Тасолтан Тазретович Басиев, ИОФАН, г. Москва
15. Профессор Иван Иванович Жеру, Государственный университет Республики Молдова
16. Профессор Михаил Иванович Куркин, ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
17. Профессор Александр Алексеевич Маненков, ИОФАН, г. Москва

Участие сотрудников в конференциях

Международные конференции

VI Международный симпозиум “Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред”, 25–28 января 2001, Москва, Россия

- Бережной Д.В., Голованов А.И., Паймушин В.Н., Сидоров И.Н.: Исследование напряженно-деформированного и предельного состояния водонасыщенных грунтов (пленарн.)
- Голованов А.И., Митряйкин В.И., Михайлов С.А., Конюхов А.В.: Расчет и экспериментальное исследование торсиона рулевой лопасти легкого вертолета из композиционных материалов (пленарн.)

IV Международный Уральский семинар “Физика радиационных дефектов в металлах и сплавах”, 25 февраля – 3 марта 2001, Снежинск, Россия

- Баязитов Р.М., Ивойлов Н.Г., Лукманова М.И., Нурутдинов Р.М.: Мессбауэровские и электронно-спектроскопические исследования чугунов, подвергнутых ионно-импульсному облучению (устн.)

International Conference “Scanning probe microscopy - 2001”, February 26 – March 1, 2001, N. Novgorod, Russia

- Bukharaev A.A., Nurgazizov N.I.: SPM nanotomography (oral)
- Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A., Borodin P.A., Biziaev D.A.: In situ MFM investigation of magnetization reversal in Co patterned microstructures (oral)
- Bukharaev A.A., Nurgazizov N.I., Skuratov V.A.: AFM visualization of single latent ion tracks in silicon dioxide using selective liquid etching (poster)
- Nurgazizov N.I., Bukharaev A.A., Sugonyako A.V., Zhiharev V.V.: AFM investigation of radiation damage distribution in implanted silicon oxide (poster)
- Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A.: MFM tip optimal parameters determination by the MFM images computer (poster)

Evro-Asian Symposium “Trends in Magnetism”, February 27 – March 2, 2001, Ekaterinburg, Russia

- Rameev B.Z., Tarapov S.I., Yildiz F., Aktas B.: Magnetoresonance study of amorphous magnetic micro-wires (poster)
- Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Quasiclassical theory of nanosize point contacts giant magnetoresistance (poster)

Chemical and Biological Applications, March 12–15, 2001, Jerusalem, Israel

- Goncharov V.A.: Thermal-noise correlation spectroscopy of dielectrics (oral)

V Международная конференция “Новые идеи в науках о Земле”, 3–5 апреля 2001, Москва, Россия

- Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Ионная имплантация в кристаллические структуры самоцветов (устн.)

XII Международный симпозиум “Тонкие пленки в электронике”, 23–27 апреля 2001, Харьков, Украина

- Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Хайбуллин И.Б.: Исследование методом оптической спектроскопии микроструктуры пленок α -C, полученных ионно-стимулированным осаждением (устн.)
- Файзрахманов И.А., Курбатова Н.В., Базаров В.В., Галаяудинов М.Ф., Хайбуллин И.Б.: Влияние отжига в атмосфере азота на колебательный спектр и оптические свойства углеродных пленок (устн.)
- Щеглов И.Ю., Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Стрельников Ю.П., Хайбуллин И.Б.: Синтез алмазоподобных пленок методом PCVD для просветления германия (устн.)

XIX International Seminar on Modern Magnetic Resonances, RAMIS, May 6–10, 2001, Poznań-Bedlewo, Poland

- Anikeenok O.A., Augustyniak-Jablokow M.A., Ivanova T.A., Reiche P., Uecker R., Yablokov Yu.V.: Delocalisation of Cu^{2+} unpaired electron on the next nearest ligands in the $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ single crystal (poster)
- Ivanova T.A., Jasyna-Onyszkiewicz I., Augustyniak-Jablokow M.A., Yablokov Yu.V.: Relationship between EPR spectra and transport properties in LaSrNiO_4 ceramics (poster)

II International symposium "Information technology in biodiversity", May 14–17, 2001, St. Petersburg, Russia

- Arkhipova S.S., Chernikov S.K., Gainutdinov Kh.L., Golubev A.I., Sabirov R.M.: Hypertext encyclopedia of invertebrates animals. Information technology in biodiversity research (oral)

X Международная конференция студентов и аспирантов "Синтез, исследование свойств, модификация и переработка высокомолекулярных соединений", 22–24 мая 2001, Казань, Россия

- Фомин В.П., Бухараев А.А., Амирова Л.М.: Изучение структуры поверхности модифицированных эпоксиполимеров сканирующей зондовой микроскопией (стенд.)

XIX Международная конференция "BEM&FEM-2001", 30 мая – 2 июня 2001, Санкт-Петербург, Россия

- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Об одном методе построения адаптивных сеток (пленарн.)
- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Программная реализация метода подконструкций для анализа сложных структур с распараллеливанием вычислений (пленарн.)

III Международная Конференция "Ядерная и радиационная физика", 4–7 июня 2001, Алматы, Казахстан

- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Хайбуллин И.Б., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Синтез слоев дислицида железа для кремниевой оптоэлектроники с использованием ионных пучков (устн.)
- Баязитов Р.М.: Мощные наносекундные ионные пучки – новые возможности модификации материалов (устн.)

VII International Symposium on Metallomesogens, June 6–9, 2001, Nagano, Japan

- Domracheva N.E., Ovchinnikov I.V., Turanov A., Lattermann G.: Magnetoelectric effect in the paramagnetic chromium(III) mesogen (oral)

Международный семинар "Современное развитие магнитно-резонансной томографии и спектроскопии. Физические основы и применение в медицине и биологии", 11–13 июня 2001, Казань, Россия

- Ибрагимова М.И., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П., Конюхов Г.В., Низамов Р.Н., Мухаметшин И.Р.: Исследование растительных радиотоксинов в крови животных методом ЭПР (стенд.)
- Fattakhov Ya.V., Anashkin V.N., Fakhrutdinov A.R., Khabipov R.Kh., Shagalov V.A.: Magnetic resonance tomograph "TMR-0.06-KPTI" – technical characteristic capability (poster)

IX International Symposium "Nanosrtuctures: Physics and Technology", June 15–18, 2001, St. Petersburg, Russia

- Batalov R.I., Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh.: Pulsed ion-beam synthesis of $\beta\text{-FeSi}_2$ layers on Si implanted by Fe^+ ions (oral)

Международная конференция "Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решений", 20–23 июня 2001, Санкт-Петербург, Россия

- Ваньков Ю.В., Голованов А.И., Тюленева О.Н.: Численное исследование свободных колебаний бездефектных и дефектных осей грузовых вагонов МКЭ в трехмерной постановке (устн.)

VII International symposium "Photon Echo and Coherent Spectroscopy" (PECS' 2001), June 20–24, 2001, Novgorod, Russia

- Kessel A.R., Ermakov V.L.: Coding of the quantum information on virtual qubits (plenary)
- Andrianov S.N., Bochkarev V.V., Samartsev V.V.: On the possibility of the gravitational wave detection in the scheme of active interferometer based on the quantum beat correlated laser (oral)
- Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipulse excitation of optical superradiance in multilevel systems (oral)
- Lisin V.N., Zuikov V.A., Shegeda A.M.: Interaction of nonequilibrium photons with different types of optically excited impurity centers (oral)
- Samartsev V.V., Kalachev A., Usmanov R.G.: Peculiarities of photon echo in extended crystals of ruby (oral)
- Andrianov S.N., Bagautdinov I.R., Lutfullina N.M., Maksimuk V.S., Mirumyants S.O., Samartsev V.V., Shegeda A.M., Trofanchuk L.A., Zalilova N.E., Zuikov V.A.: Fiber-optic read-out and write-down head for the devices of information storage and processing (poster)
- Andrianov S.N., Samartsev V.V.: Quantum dynamic holography on the basis of the experiments on stopping of light pulses (poster)

- Andrianov S.N., Samartsev V.V.: Solid-state lasers with internal laser refrigeration effect (poster)
- Biktchantaev I., Samartsev V.V.: Spectroscopy of terrylene and perylene isolated in Kr matrix. Investigation of multiplet structure (poster)
- Biktchantaev I., Samartsev V.V., Seriol J.: Spectroscopic properties of terrylene and di-tert-butylterrylene in series of crystalline n-alkanes (poster)
- Zinoviev P.V., Zuikov V.A., Andrianov S.N., Silaeva N.B., Samartsev V.V.: Optical superradiance in pyrene-doped biphenyl crystals in a cavity (poster)
- Petrushkin S.V.: On the collective effects application in laser cooling of solids (poster)
- Rassvetolov L.A., Samartsev V.V.: Optical data processing based on long-lived photon echo (oral)

Symposium on Metallic Multilayers, June 24–29, 2001, Eurocongress, Aachen, Germany

- Garifullin I.A.: Proximity effects in ferromagnet/superconductor hybrid structures (invited)
- Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.B.: The theory of magnetic nanosize point contact magnetoresistance (invited)
- Vodopyanov B.P., Tagirov L.R., Berezhnov A.V.: The effect of alloying on the superconducting properties of S/F layered systems (poster)
- Tagirov L.R., Garifullin I.A., Garif'yanov N.N., Khlebnikov S.Ya., Tikhonov D.A., Westerholt K., Zabel H.: Re-entrant superconductivity in superconductor/ferromagnet layered system (poster)

XX Международная Чугаевская конференция по координационной химии, 25–29 июня 2001, Ростов-на-Дону, Россия

- Туранова О.А., Туранов А.Н., Овчинников И.В., Галяметдинов Ю.Г.: О жидкокристаллических свойствах координационных соединений на основе свойств β -аминовинилкетон (стенд.)

Международная конференция "Оптика, оптоэлектроника и технологии", 25–29 июня 2001, Ульяновск, Россия

- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Хайбуллин И.Б., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х., Красильник З.Ф., Андреев Б.А., Крыжков Д.И.: Особенности люминесценции импульсно-синтезированных пленок β -FeSi₂ в кристаллическом Si (стенд.)

XI Межнациональное совещание "Радиационная физика твердого тела", 25–30 июня 2001, Севастополь, Россия

- Нургазизов Н.И., Бухараев А.А.: Методика определения толщины радиационно-поврежденного слоя диоксида кремния при помощи атомно-силового микроскопа (устн.)

The X-th International Laser Physics workshop (LPHYS' 01), July 3–7, 2001, Moscow, Russia

- Andrianov S.N., Bochkarev V.V., Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Laser cooling of impurity solids and quantum information processing (plenary)
- Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipulse excitation of optical superradiance (plenary)
- Kessel A.R., Ermakov V.L.: Quantum entanglement and separability in NMR computing (plenary)
- Samartsev V.V.: From long-lived photon echo and triggering optical superradiance to optical phase processors (plenary)
- Shakhmuratov R.N., Odrurs J., Coussement R., Megret P., Kozyreff G., Mandel P.: Electromagnetically induced transparency via adiabatic following of the dark state (plenary)
- Andrianov S.N., Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Superradiant information macroqubits (poster)

Spin chemistry symposium, July 15–21, 2001, Tokyo, Japan

- Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: Light-induced radical pair intermediates in photosynthetic reaction centers in contract with an observer spin label: spin dynamics and effects on transient EPR spectra (invited)

Specialized Colloque AMPERE "ESR and Solid State NMP in High Magnetic Fields", July 22–26, 2001, Stuttgart, Germany

- Domracheva N.E., Ovchinnikov I.V., Turanov A., Lattermann G.: EPR detection of the magnetoelectric effect in chromium mesogen (poster)
- Eremina R.M., Glazkov V.N., Smirnov A.I., Dhalenne G., Revcolevschi A.: Bottle-neck governed temperature dependence of the g-factor value in Cu_{1-x}Ni_xGeO₃ (poster)

Central European Conference of Neurobiology, August 11–15, 2001, Krakow, Poland

- Gainutdinova T.H., Gainutdinov Kh.L., Meschaninova A.V.: The effects of 5,6-dihydroxytryptamine injection on defensive reflex conditioning in HELIX LUCORUM (poster)
- Mukhamedshina D., Andrianov V., Gainutdinova T.: Duration of retention of changes of the electrical characteristics of command neurons after associative learning of grape snails (poster)
- Nazyrova R., Andrianov V., Gainutdinov Kh.L., Mukhamedshina D.: Dynamics of defensive reactions and changes of the electrical characteristics after conditioning of defensive reflex on food aversion in HELIX LUCORUM (poster)

XIV Conference of the International Society of Magnetic Resonance, August 18–23, 2001, Rhodes, Greece

- Vishnevskaja G.P., Frolova E.N., Fakhrutdinov A.R., Yulmetyev R.M.: Molecular mobility, spin-lattice and spin-spin relaxation in solutions of $Gd(NO)_3$ (poster)

IBRO Summer School 2001 “Neuronal transmission: microphysiology of synaptic currents and receptor function”, August 19–31, 2001, Tihany, Hungary

- Gainutdinova T.H.: Investigations of 5,6-dihydroxytryptamine effects on electrical characteristics of interneurons after associative learning in HELIX LUCORUM (oral)

Workshop on Nanostructured Magnetic Materials and Their Applications, September 3–7, 2001, Gebze, Turkey

- Garifullin I.A.: Proximity effects in ferromagnet/superconductor layered systems (invited)
- Ibragimova M.I., Petukhov V.Yu., Bukharaev A.A., Khabibullina N.R., Khaibullin I.B.: Investigation of ion-synthesized magnetic metal-polymer nanostructures by scanning probe microscopy (oral)
- Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A., Borodin P.A.: Observation of domain wall motion in Co planar microstructures with MFM (oral)
- Petukhov V.Yu., Ibragimova M.I., Khabibullina N.R., Osin Yu.N., Bukharaev A.A.: Investigation of self-organized magnetic nanostructures formed by Fe^+ implantation into polymethylmethacrylate (oral)
- Rameev B.Z., Tagirov L., Tarapov S.I., Yildiz F., Aktas B.: High-frequency magnetic resonance studies of amorphous microwires (oral)
- Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A.: Computer simulation of MFM tip optimal parameters determination (poster)
- Petukhov V., Ibragimova M., Khabibullina N., Shulyndin S., Osin Yu.: Phase composition and structure of metal nanoparticles formed in polymers during ion implantation (poster)
- Rameev B.Z., Okay C., Yildiz F., Khaibullin R.I., Tarapov S.I., Tagirov L.R., Aktas B.: Electron microscopy and magnetic resonance investigations of iron-implanted polyimides (poster)

X International Meeting on Ferroelectricity, September 3–7, 2001, Madrid, Spain

- Mamin R.F.: Semi-phenomenological model of relaxor ferroelectrics (poster)
- Mamin R.F., Blinc R.: Delay time of phase transition in low-temperature phase of relaxors (poster)

11 International Conference on Radiation Effects in Insulators (REI-11), September 3–7, 2001, Lisbon, Portugal

- Khaibullin R.I., Popok V.N., Bazarov V.V., Zheglov E.P., Rameev B.Z., Okay C., Tagirov L.R., Aktas B.:

Ion synthesis of iron and cobalt granular films in polyimide (poster)

- Popok V.N., Azarko I.I., Khaibullin R.I., Stepanov A.L., Hnatowicz V., Mackova A.: High fluence and current density ion implantation to polyimide (poster)
- Popok V.N., Khaibullin R.I., Bazarov V.V., Valeev V.F., Hnatowicz V., Mackova A., Odzhaev V.B.: Anomalous depth distribution of Fe and Co atoms in polyimide implanted to high fluence (poster)
- Stepanov A.L., Hole D.E., Townsend P.D.: Copper ion implantation and laser annealing of silica (poster)
- Stepanov A.L., Popok V.N.: Optical properties of polymethylmethacrylate with implanted silver nanoparticles (poster)

XII International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beam (SMMIB 2001), September 9–14, 2001, Murburg, Germany

- Mackova A., Perina V., Hnatowicz V., Khaibullin R.I., Bazarov V.V.: High fluence implantation of iron into polyimide (poster)
- Stepanov A.L., Hole D.E.: Implantation and laser annealing of Cu nanoparticles in silica (poster)

I Hellenic-Turkish International Physics Conference, September 10–15 2001, Bodrum-Turkey and Kos-Greece

- Rameev B., Popov S., Aktas B.: EPR spectroscopy of chromium ions in $CdIn_2S_4$ Spinel (oral)
- Yildiz F., Khaibullin R.I., Rameev B., Okay C., Tarapov S.I., Tagirov L.R., Aktas B.: FMR studies of granular metal thin films in polyimides (poster)

IX Международная конференция “Физико-химические основы ионообменных процессов”, 10–15 сентября 2001, Воронеж, Россия

- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Сафин Р.Ш.: Концентрирование, разделение и строение ионитных комплексов разновалентных ионов хрома по данным ЭПР (пленарн.)

XII International School on Vacuum, Electron and Ion Technologies, September 17–21, 2001, Varna, Bulgaria

- Batalov R.I., Bayazitov R.M., Khaibullin I.B.: Synthesis of polycrystalline layers of β -SiC on Si by pulsed ion-beam treatment (poster)
- Batalov R.I., Bayazitov R.M., Terukov E.I., Kudozarova V.Kh., Krasil'nik Z.F., Andreev B.A., Krizhkov D.I.: 1.5 mm luminescence of pulsed ion-beam synthesized β -FeSi₂ films on Si (poster)

Международная конференция “Кристаллогенезис и минералогия”, 17–21 сентября 2001, Санкт-Петербург, Россия

- Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Кристаллохимия минералов, имплантированных элементами группы железа (стенд.)

XI-th Feofilov symposium on spectroscopy of crystals activated by rare earth and transition metal ions, September 24–28, 2001, Kazan, Russia

- Kalachev A.A., Zuikov V.A., Samartsev V.V., Shgeda A.M.: Optical superradiance in Van-Vleck paramagnet (plenary)
- Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Anikeenok O.A., Leushin A.M., Yakovleva Zh.S., Schweizen S., Rogulis U., Spaeth J.-M.: EPR, ENDOR and magneto-optical spectroscopy of the tetragonal Yb^{3+} center in KZnF_3 (oral)
- Tarasov V.F.: Tunable EPR spectroscopy of impurity non-Kramers ions in dielectric crystals (oral)
- Altshuler A.E., Altshuler T.S., Bresler M.S.: About the nature of the energy gap in YbB_{12} (poster)
- Altshuler A.E., Altshuler T.S., Bresler M.S.: About the nature of the energy gap in YbB_{12} (poster)
- Altshuler T.S., Bresler M.S., Goryunov Yu.V., Iga F., Takabatake T.: Effect of defects on the valence of Yb in YbB_{12} (poster)
- Anikeenok O.A., Augustyniak-Jablokow M.A., Ivanova T.A., Reiche P., Uecker R., Yablokov Yu.V.: Next nearest neighbour delocalisation of Cu^{2+} unpaired electron in LaSrGaO_4 single crystal (poster)
- Batalov R.I., Bayazitov R.M., Stepanov A.L., Khaibullin I.B., Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh.: Behavior of 3d and 4f elements in Si at pulsed beam treatments (poster)
- Domracheva N.E., Ovchinnikov I.V., Turanov A., Lattermann G.: Magnetoelectric effect in chromium mesogen LCrCl_3 (poster)
- Falin M.L., Gerasimov K.I., Leushin A.M., Bill H., Sanadze T.: EPR and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in SrF_2 and BaF_2 single crystals. An analysis of distortions of the crystal lattice near Yb^{3+} (poster)
- Fazlizhanov L.I., Ulanov V.A., Zaripov M.M., Eremina R.M.: Local structure of titanium pair centres in strontium fluoride crystals (poster)
- Gafurov M.R., Iskhakova A.I., Kurkin I.N., Kurzin S.P., Malkin B.Z., Nikitin S.I., Orlinskii S.B., Rakhmatullin R.M., Shakurov G.S., Tarasov V.F., Demirebilek R., Heber J.: Spectra and dynamics of optical, millimeter- and microwave excitations in $\text{CsCdBr}_3:\text{Yb}^{3+}$ and $\text{CsCdBr}_3:\text{Nd}^{3+}$ monocrystals (poster)
- Ivanova T.A., Petrashen V.E., Yablokov Yu.V.: Jahn-Teller dynamics of the low-spin Ni^{3+} centers in LaAlO_3 (poster)
- Legendziewicz J., Voronkova V.K., Galeev R.T., Keller B., Oczko G.: Magnetic and spectroscopic properties of polymeric Nd(III) crystals (oral)
- Moiseev S.A., Noskov M.I.: Quantum trajectories at the continuous deflection of single photon echoes (oral)
- Samartsev V.V.: Long-lived phase memory under multipulsed laser excitation of crystals doped by non-Kramers rare-earth ions (poster)
- Samartsev V.V., Kalachev A.A., Usmanov R.G.: Some peculiarities of photon echo in a ruby (poster)

- Shakurov G.S., Muraviev F.M., Osin Yu.N., Shcherbakov V.D., Bulka G.R., Galeev A.A.: Optical and ESR spectroscopy of 3d transition ions in natural dolomite (poster)
- Shakurov G.S., Tarasov V.F.: Submillimeter EPR spectroscopy of Cr^{3+} - Cr^{3+} pairs in synthetic forsterite (poster)
- Turanov A., Ovchinnikov I., Rakhmatullin A., Galyametdinov Yu., Petrashen' V.E., Ivanova T.A.: Comparative study (NMR, EPR and magnetic susceptibility) of some mesogenic and non-mesogenic compounds of Schiff base lanthanides (L_3LnX_3) (poster)
- Ulanov V.A., Zaripov M.M., Zheglov E.P.: Influence of the local strains on static and dynamic properties of eightfold coordinated Jahn-Teller copper and silver complexes in mixed fluorite type crystals: results of the EPR study (poster)
- Ulanov V.A., Zaripov M.M., Zheglov E.P., Krupski M., Hoffmann S.K., Pavlov A.V.: Temperature and pressure dependencies of spin-Hamiltonian parameters of divalent copper impurity pair centers in barium fluoride crystals (poster)

International Conference "Geometrization of Physics V", September 24–28, 2001, Kazan, Russia

- Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Coherent processes in laser cooling of solids (oral)
- Samartsev V.V., Kalachev A.A.: Optical phase based on the long-lived photon echo and multichannel optical superrediance in crystals doped by non-Kramers rare-earth ions (oral)
- Solovarov N.K.: On the correlated dynamics of subsystems of closed quantum systems (oral)

Annual Workshop "Modern development of magnetic resonance", October 1–3, 2001, Kazan, Russia

- Eremina R.M.: Temperature dependence of EPR spectra of $\text{Cu}_{1-x}\text{NiGeO}_3$ (oral)
- Falin M.L., Gerasimov K.I., Leushin A.V., Bill H.: FPR and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in fluorite-type crystals (oral)
- Golenischev-Kutuzov V.A.: The main discovery of S. A. Al'tshuler (oral)
- Moiseev S.A.: Principles of the photon echo for the complete reconstruction of the quantum states of the light (oral)
- Tseitlin M.P., Salikhov K.M.: EPR imaging of lossy objects (oral)
- Vavilova E.L., Garif'yanov N.N.: The anomaly magnetic behavior of Na_xWO_3 single crystal at low sodium content (oral)
- Zaripov M.M.: Magnetic resonance in Kazan and S. A. Al'tshuler: reminiscences (oral)

IV Международная конференция “Взаимодействие излучений с твердым телом”, 3–5 октября 2001, Минск, Беларусь

- Нургазизов Н.И., Бухараев А.А., Старков В.В.: Определение величины распыления или распухания имплантированного слоя с помощью атомно-силового микроскопа (устн.)
- Сугоняко А.В., Жихарев В.А., Бухараев А.А., Нургазизов Н.И.: Компьютерное моделирование формирования дефектной структуры твердого тела при ионной имплантации (устн.)
- Хайбуллин Р.И., Жеглов Е.П., Рамеев Б.З., Акташ Б., Попок В.Н., Азарко И.И., Кондюрин А.В.: ФМР исследования металл-полимерных композитных пленок, формируемых путем имплантации ионов железа в вязкую силаксановую подложку (устн.)
- Попок В.Н., Азарко И.И., Карпович И.А., Хайбуллин Р.И., Степанов А.Л.: Влияние режимов ионной имплантации на парамагнитные и электрические свойства полиимида (стенд.)
- Степанов А.Л., Оджаяев В.Б., Холе Д.Е., Осин Ю.Н., Хайбуллин И.Б.: Лазерный отжиг Al_2O_3 , содержащего наночастицы меди, сформированные имплантацией (стенд.)
- Степанов А.Л., Оливарес Х., Рекуейо-Изидро Х., Косо Р., Налда Р., Солис Х., Афонсо К.Н., Холе Д.Е., Таунсенд П.Д., Наудон А.: Нелинейно-оптические свойства SiO_2 с синтезированными имплантацией наночастицами меди (стенд.)

The IV-th International conference “Physical phenomena at high magnetic fields - IV”, October 19–25, 2001, Santa Fe, USA

- Kuhns P.L., Reyes A.P., Moulton W.G., Kukovitskii E.F., Vavilova E.L., Teitelbaum G.B.: The inhomogeneous magnetic fluctuations in the superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (poster)

International symposium on crystal chemistry of coordination, organic and supramolecular compounds, October 22–26, 2001, Chishinaw, Moldova

- Voronkova V.K., Korobchenko L.V., Novitskii G., Shova S., Simonov Yu., Turte C., Caneschi A.: EPR and magnetic behavior of two new quasi one-dimensional compounds containing square-pyramidal copper complexes (poster)

III Asia-Pacific EPR/ESR symposium, October 29 – November 1, 2001, Kobe, Japan

- Salikhov K.M.: EPR investigations of the Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm pairs (invited)
- Domracheva N., Ovchinnikov I.V., Turanov A., Lattermann G.: EPR detection of magnetoelectric effect and internal electric field in chromium mesogen (poster)

Workshop on Advanced EPR Applied to Biosciences, November 1–3, 2001, Kwansei University, Japan

- Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: The influence of label spins on EPR spectra of charge separated states in photosynthetic reaction centers (invited)

Research Society (MRS) Fall Meeting, November 26–30, 2001, Boston, USA

- Mamin R.F.: Polarization dynamics in phenomenological theory of relaxors (oral)

XXVII European rotorcraft forum, 2001, Moscow, Russia

- Golovanov A.I., Mitryaykin V.I., Michaylov S.A., Konyukhov A.V.: Numerical analysis and experimental investigation of a tail rotor blade composite torsion (пленапр.)

Российские конференции

Конференция молодых ученых КФТИ КНЦ РАН, 25 января 2002, Казань

- Архипова С.С., Петров К.М.: Мультимедийная библиотека беспозвоночных животных (устн.)
- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Крыжков Д.И., Кудоярова В.Х.: Люминисцентные свойства преципитатов дисилицида железа в кремнии (устн.)
- Булатов А.Р., Капралов А.В.: Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ (устн.)
- Герасимов К.И., Фалин М.Л., Леушин А.М.: ЭПР и оптическая спектроскопия и анализ структуры кубических и тригональных центров иона Yb^{3+} в кристаллах SrF_2 и BaF_2 (устн.)
- Калинин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Поляризационные свойства оптического сверхизлучения в кристалле $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ (устн.)
- Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Проявление двухквантовых переходов в спектрах ОД ЭПР спин-коррелированных радикальных пар в мицеллах (устн.)
- Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Моделирование процессов перемагничивания в планарных ферромагнитных микроструктурах (устн.)
- Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение активных элементов твердотельных лазеров (устн.)
- Туранова О.А., Вен Ван, Князев А.А.: Первые жидкокристаллические лантаноиды как поляризованные среды для органических светодиодов (устн.)

III Всероссийская научно-техническая конференция “Нейроинформатика 2001”, январь 2001, Москва

- Кессель А.Р., Ермаков В.Л.: Квантовая информатика на виртуальных спинах (пленарн.)
- Ермаков В.Л.: Возможная связь квантовых информационных процессов и физики сознания (устн.)

Всероссийское совещание “Нанопотоника”, 26–29 марта 2001, Нижний Новгород

- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Хайбуллин И.Б.: Полупроводниковый дисилицид железа – новый материал кремниевой оптоэлектроники ближнего ИК диапазона (устн.)
- Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Синтез и свойства тонких пленок β - FeSi_2NaSi , сформированных непрерывными импульсными ионными пучками (стенд.)

Российский симпозиум по растровой и электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел, 4–6 июня 2001, Черноголовка

- Бородин П.А., Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Магнитная силовая микроскопия доменной структуры кобальтовой микропроволоки при изменении внешнего магнитного поля (устн.)
- Шакуров Г.С., Осин Ю.Н., Муравьев Ф.А., Галеев А.А.: Примесные элементы в карбонатных минералах верхнепалеозойских пород морских и переходных формаций востока русской платформы (стенд.)

VIII Всероссийская конференция “Структура и динамика молекулярных систем”, 25–30 июня 2001, Яльчик

- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Квазизжидкостное проявление электронной релаксации и молекулярной подвижности структурных элементов в ряде кристаллогидратов Cr^{3+} (пленарн.)
- Овчинников И.В., Домрачева Н.Е., Туранов А., Латтерманн Г.: Влияние внутреннего электрического поля на магнитные свойства азоциклического мезогенного соединения хрома (устн.)

V Российская конференция по физике полупроводников, 10–14 сентября 2001, Нижний Новгород

- Баязитов Р.М.: Легирование и синтез полупроводников непрерывными и импульсными ионными пучками (устн.)
- Несмелова И.М., Барышев Н.С., Петухов В.Ю., Ибрагимова М.И., Жеглов Е.П., Андреев В.А.: Электрофизические свойства перспективных твердых растворов марганец-ртуть-теллур (стенд.)

VIII Всероссийская школа для молодых ученых по нейробиологии, 25–27 сентября 2001, Казань

- Мещанинова А.В., Мухамедшина Д.И., Андрианов В.В.: Долговременные эффекты введения хлорпромазина у виноградной улитки (стенд.)
- Муранова Л.Н., Исмаилова А.И.: Сравнительное исследование поведенческих реакций виноградной улитки при воздействии галоперидола и 6-гидроксидофамина (стенд.)
- Мухамедшина Д.И., Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В.: Исследование роли кальция в электрогенезе командных нейронов у интактных и обученных виноградных улиток (стенд.)
- Назырова Р.Р., Гайнутдинова Т.Х.: Динамика оборонительных реакций и электрических характеристик командных нейронов при выработке условного рефлекса на отвергание пищи у улитки (стенд.)

XVIII съезд физиологов России, 25–28 сентября 2001, Казань

- Гайнутдинов Х.Л.: Роль серотонина и дофамина в пластичности оборонительного поведения у моллюсков (устн.)
- Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л.: Исследование ионных и мембранных механизмов формирования долговременной сенситизации у виноградной улитки (стенд.)
- Архипова С.С., Мещанинова А.В., Муранова Л.Н.: Влияние хлорпромазина и галоперидола на оборонительное поведение и локомоцию *Helix lucorum* (стенд.)
- Звездочкина Н.В., Архипова С.С.: Участие дофаминергической системы спинного мозга в регуляции гипертонуса тонически напряженных мышц у крыс (стенд.)
- Гайнутдинова Т.Х.: Эффекты влияния нейротоксина 5,6-дигидрокситриптамина на ассоциативное обучение у виноградной улитки: электрофизиологическое исследование (стенд.)
- Мухамедшина Д.И., Назырова Р.Р., Гайнутдинова Т.Х.: Сенситизационные изменения оборонительных реакций у виноградной улитки в активном контроле на условный пищеотвергательный рефлекс (стенд.)
- Назырова Р.Р., Андрианов В.В., Голубев А.И.: Эффекты влияния нейротоксина 6-гидроксидофамина на формирование долговременной сенситизации у виноградной улитки (стенд.)

Всероссийской научно-технической конференции “Микро- и нанoeлектроника 2001”, 1–5 октября 2001, Звенигород

- Бухараев А.А., Нургазизов Н.И., Сугоняко А.В.: Мониторинг жидкостного травления имплантированного диоксида кремния с помощью атомно-силового микроскопа (устн.)

- Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Хайбуллин И.Б., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Импульсный синтез мелкодисперсных пленок полупроводникового дицилицида железа на кремнии и их люминесцентные свойства (стенд.)

I Российская конференция молодых ученых по физическому материаловедению, 4–7 октября 2001, Калуга

- Садыков М.Ф.: Исследование магнитного оптического и акустического двулучепреломления в монокристаллах $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (устн.)

XXII съезд по спектроскопии, 8–12 октября 2001, Звенигород Московской области

- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Спектры ЭПР аквакомплексов Gd^{3+} в застеклованных водных растворах и адсорбированных на поверхности капилляра (стенд.)
- Иванова Т.А., Яблоков Ю.В.: Электрон-фононные взаимодействия низкоспинового Ni^{3+} в оксидных керамиках (стенд.)

Всероссийская конференция “Магнитоэлектрические взаимодействия в кристаллах” (MEIPIC-4), 16–19 октября 2001, Великий Новгород

- Овчинников И.В., Домрачева Н.Е., Туранов А., Латтерман Г.: Магнитоэлектрический эффект за счет внутреннего электрического поля в мезогене хрома (пленарн.)

V Всероссийская молодежная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”, 25–27 октября 2001, Казань

- Салихов К.М.: ЭПР исследование пар Эйнштейна-Подольского-Розена-Боба (лекция)
- Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: Моделирование электромагнитного поля в зондах сканирующей близко-полевой оптической микроскопии (устн.)
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Электрон-колебательная динамика Na_2 -молекулярного газа при возбуждении квантовыми и фемтосекундными световыми полями (устн.)
- Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Сверхизлучательное антистоксовое охлаждение примесных кристаллов (устн.)
- Герасимов К.И., Латыпов В.А., Леушин А.М., Фалин М.Л.: Оптическая спектроскопия Yb^{3+} в SrF_2 и BaF_2 (стенд.)
- Герасимов К.И., Латыпов В.А., Леушин А.М., Фалин М.Л., Schweizer S., Spaeth J.-M.: ДЭЯР и оптическая спектроскопия Yb^{3+} в KZnF_3 (стенд.)
- Калинин А.А.: Поляризационные свойства сигналов сверхизлучения в кристалле $\text{LaF}_3(\text{Pr}^{3+})$ (стенд.)

Российская молодежная научная школа “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений”, 1–3 ноября 2001, Казань

- Еремина Р.М., Еремин М.В., Krug von Nidda H.A., Loidl A.: Угловая зависимость ширины линии ЭПР в LiCuVO_4 (устн.)
- Овчинников И.В.: Магнитные жидкие кристаллы (устн.)

I Форум молодых ученых и специалистов Республики Татарстан, 11–12 декабря 2001, Казань

- Архипова С.С.: Гипертекстовая энциклопедия беспозвоночных животных (стенд.)
- Архипова С.С., Мещанинова А.В., Муранова Л.Н.: Влияние галоперидола и флорпромазина на оборонительное поведение виноградной улитки (устн.)
- Бизяев Д.А., Бухараев А.А.: Система автоматического контроля и управления микроскопа “сдвиговых сил” (устн.)
- Бородин П.А., Бухараев А.А.: Магнитная силовая спектроскопия процессов перемагничивания планарных магнитных микроструктур (устн.)
- Галеев Р.Т., Салихов К.М.: Спектроскопические проявления переноса когерентности в ЭПР (устн.)
- Дулова М.И., Нурутдинов Р.М., Баязитов Р.М.: Мессбауэровские исследования чугунов, повергнутых воздействию мощных ионных пучков (устн.)
- Калачев А.А., В. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: О возможности повышения эффективности при лазерном охлаждении твердых тел (устн.)
- Капралов А.В., Булатов А.Р.: Особенности распространения высокочастотного ультразвука в области структурных и магнитных фазовых переходов в манганите $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (устн.)
- Мамбетов А.Е., Салихов К.М.: Проявление начальной когерентности в линии двухквантового поглощения спектрах ЭПР триплетной молекулы (устн.)
- Мещанинова А.В., Мухамедшина Д.И., Андрианов В.В.: Влияние хронического введения хлорпромазина на электрофизиологические характеристики командных нейронов оборонительного поведения виноградной улитки (устн.)
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Электрон-колебательная динамика газа двухатомных молекул типа Na_2 при возбуждении однофотонными фемтосекундными световыми полями (устн.)
- Муранова Л.Р., Исмаилова А.И.: Влияние галоперидола и 6-гидроксидофамина на поведенческие реакции виноградной улитки (устн.)
- Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Проявление двухквантовых переходов в спектрах оптически детектируемого ЭПР спин-коррелированных радикальных пар (устн.)
- Назырова Р.Р., Исмаилова А.И.: Изменение оборонительных реакций при выработке условного рефлекса на отвергание пищи (устн.)

- Овчинников Д.В., Бухараев А.А.: Компьютерное моделирование в магнитной силовой микроскопии (устн.)
- Сугоняко А.В., Жихарев В.А., Бухараев А.А., Нургазизов Н.И.: Компьютерное моделирование формирования дефектной структуры твердого тела при ионной имплантации (устн.)
- Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В., Евгеньева Е.А., Хайбуллин И.Б.: Фрактальное распределение локальных областей плавления по поверхности полупроводников, подвергнутых импульсным фотонным воздействиям (устн.)
- Фролова Е.Н., Вишневская Г.П., Гатауллин А.М.: Подвижность комплексов GD^{3+} в водно-глицериновых растворах по данным электронной релаксации (устн.)
- Яковлева Н.М., Ермаков В.Л.: Моделирование квантового алгоритма Гровера на языке Q^{++} (устн.)

Республиканская научно-практическая конференция “Интеллектуальные системы и информационные технологии”, 2001, Казань

- Голованов А.И., Закиров Р.Ф., Пискунов А.А., Рогов Н.В.: Математическое моделирование несущей способности пролетных строений моста из сборного железобетона (устн.)
- Голованов А.И., Конюхов А.В., Митряйкин В.И., Михайлов С.А., Фетисов Л.В.: Численное моделирование напряжений при проектировании и оптимизации конструкции торсиона несущего винта (устн.)
- Голованов А.И., Пискунов А.А.: Исследование напряженно-деформированного и предельного состояния железобетонных конструкций (устн.)

ФИЗТЕХПРЕСС
2002

ISBN 5-94469-002-X