



КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО-
ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ
Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2003

ЕЖЕГОДНИК

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2003



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 2003.
Ежегодник. – Казань: ФизтехПресс, 2004. 230 с.

ISBN 5-94469-009-7

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, 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 2003 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 5-94469-009-7

© КФТИ КазНЦ РАН, 2004
© Обложка Аксенов И.А., 2004

Ответственный редактор В. К. Воронкова
Редакторы С. М. Ахмин, Н. А. Карташева, Л. В. Мосина
Технические редакторы С. Г. Львов, О. Б. Яндуганова

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

Подписано в печать 21.04.2004
Формат 60х90/8. Бумага офсетная
Гарнитура Times. Печать офсетная
Тираж 225 экз.

Предисловие редактора

В 2003 году сотрудники нашего института трудились как всегда самоотверженно. Учеными получены интересные научные результаты, приведенные в этом выпуске. Расширенные аннотации позволяют получить представление об этих результатах. В этом году у нас улучшилась приборная база, вычислительная техника. Появление новых экспериментальных методик, развитие экспериментальных методов создают хорошие предпосылки для дальнейшего развития фундаментальных исследований в институте. Трудно, но поступательно развивается программа создания низкополевых магнитно-резонансных томографов. В этом году заметно возросло число студентов на базовой кафедре. Этот год ознаменовался и крупными ремонтными работами: впервые за многие годы на капитальный ремонт было выделено немало денег. Эти ремонтные работы стали большим испытанием для всех служб КФТИ.

В соответствии с решениями Президиума и Бюро Отделения физических наук РАН при составлении планов работы института на 2004 год Ученым советом был проведен тщательный анализ бюджетных тем, в результате в план 2004 года включены 12 тем, для выполнения которых ожидается финансирование из бюджета РАН.

В 2003 году произошли серьезные структурные изменения. Лаборатория радиационной физики стала отделом радиационной физики, в состав которого входят три лаборатории. Вместо лаборатории резонансных явлений были созданы две новые лаборатории. Эти изменения были вызваны стремлением оптимизировать структуру института, желанием дать возможность молодым докторам наук полнее реализовать себя. Но был и вынужденный момент. Уход из жизни Александра Рахмиевича Кесселя, зав. лабораторией резонансных явлений, сделал необходимым реорганизацию этой лаборатории.

Итоги деятельности института в 2003 году, представленные в этом выпуске ежегодника, показывают, что физтеховцы настойчиво ищут и находят пути успешного развития фундаментальных исследований и применения результатов фундаментальной науки для решения актуальных практических задач. Это дает основание с оптимизмом смотреть в будущее Казанского физтеха.

Это уже третий выпуск ежегодника, уже накоплен некоторый опыт его выпуска. Но от этого работа по подготовке ежегодника не стала легче. Поэтому я выражаю искреннюю благодарность всем физтеховцам, принимавшим участие в подготовке ежегодника. Особой благодарности заслуживает ученый секретарь института Виолета Константиновна Воронкова. Всех физтеховцев поздравляю с выходом очередного выпуска ежегодника.

К. М. Салихов
25 января 2004

Содержание

- 8 Структура института

Важнейшие события года

- 11 Посещение института руководителями Российской академии наук и Республики Татарстан

Важнейшие результаты года

- 13 Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Ученым советом КФТИ КазНЦ РАН в отчет РАН за 2003 год
- 17 Важнейшие законченные исследования и разработки, готовые к практическому применению
- 18 Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2003 года

Научные сообщения

- 19 Механизм электронной спиновой поляризации возбужденных триплетных состояний, вызванной взаимной аннигиляцией триплетов
К. М. Салихов
- 22 Исследование электронной спиновой поляризации и спинового обмена в смешанных растворах порфирина-стабильный свободный радикал
О. И. Гнездилов, А. Е. Мамбетов, А. А. Обычный, К. М. Салихов
- 26 ЭПР пятиядерных кластеров $\text{Cu}_3^{\text{II}}\text{Ln}_2^{\text{III}}(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8$ ($\text{Ln}^{\text{III}} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Pr}$): обменные взаимодействия и спиновая динамика
В. К. Воронкова, Р. Т. Галеев
- 31 Исследование кинетических характеристик люминесценции композитной пленки ПВК:Eu(DK)₃Вру с помощью многофункционального автоматизированного оптического спектрометра
Д. В. Лапаев, Г. М. Сафиуллин, В. С. Лобков, К. М. Салихов, А. А. Князев, Ю. Г. Галяметдинов
- 36 Радиочастотная деполяризация мюона в системе мюоний + ядерный спин
С. А. Моисеев, В. Г. Никифоров
- 40 Пространственные и временные свойства квантовой памяти на основе эффекта фотонного эха в газах
С. А. Моисеев, М. И. Носков
- 44 Двухчастотное облучение в ЯКР. Новые приложения
Д. Я. Осокин, Р. Р. Хуснутдинов
- 47 Перколяционная модель импульсного воздействия на нефтяной пласт и ее реализация на высокопроизводительных вычислительных системах
А. Р. Кессель, М. Х. Бренерман

- 52 Дискретная модель акустического воздействия на фильтрацию в анизотропном пласте
М. Х. Бренерман
- 55 Изучение in situ перемагничивания микроструктур во внешнем магнитном поле до 2000 Э с помощью магнитного силового микроскопа
А. А. Бухараев, Д. А. Бизяев, П. А. Бородин, Д. В. Овчинников
- 59 Влияние имплантации ионов бора на оптические и электрофизические свойства графеновых наноструктур
И. А. Файзрахманов, В. В. Базаров, И. Б. Хайбуллин
- 63 Исследования магнитных свойств тонких монокристаллических пленок CrO_2 методом ФМР
Б. З. Рамеев, Л. Р. Тагиров
- 67 Исследование магнитных свойств нанокompозита частиц никеля во фториде магния
Б. З. Рамеев, А. Л. Степанов, Р. И. Хайбуллин
- 71 Особенности оптического поглощения композиционных слоев на основе полимера с металлическими наночастицами, синтезированными ионной имплантацией
А. Л. Степанов, И. А. Файзрахманов
- 76 Импульсный лазерный отжиг слоев кремния, имплантированных ионами железа
Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов
- 80 Исследование ферромагнитных нанокompозитных слоев, полученных высокодозной имплантацией ионов Fe^+ в ПЭТФ
В. Ю. Петухов, Н. Р. Хабибуллина, М. И. Ибрагимова, Е. П. Жеглов, А. А. Можанова
- 84 Влияние типа исходной мишени на ионный синтез силицидов кобальта в Si и SiGe
Г. Г. Гумаров, В. Ю. Петухов, И. Б. Хайбуллин, В. А. Шустов
- 89 Исследование методом ex vivo ЭПР метаболических изменений в крови и тканях органов мышей под действием растительного радиотоксина
М. И. Ибрагимова, В. Ю. Петухов, Е. П. Жеглов
- 93 Температурный гистерезис и аномальное поведение скорости звука в гематите при ориентационном фазовом переходе
И. Ш. Ахмадуллин, С. А. Мигачев, М. Ф. Садыков, М. М. Шакирзянов
- 96 Фотоиндуцированные явления в релаксорах
С. А. Мигачев, М. Ф. Садыков, Р. Ф. Мамин
- 101 Исследование фазового расслоения манганита $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ по изменению упругих свойств
Х. Г. Богданова, А. Р. Булатов, В. А. Голенищев-Кутузов, А. В. Капралов
- 103 Времяразрешенная фононная регистрация оптических спектров поглощения в примесных кристаллах
А. М. Шегада, В. Н. Лисин
- 107 Субмиллиметровая ЭПР спектроскопия димерных центров Ho^{3+} в синтетическом форстерите
А. А. Коновалов, В. Ф. Тарасов
- 111 Низкосимметричные центры Tb^{3+} в двойном хлориде калия-свинца
Г. С. Шакуров
- 115 ЭПР и оптическая спектроскопия Yb^{3+} тетрагональной симметрии в CaF_2
К. И. Герасимов, В. А. Латыпов, М. Л. Фалин
- 120 ДЭЯР ян-теллеровских центров иона Cu^{2+} в кристалле CaF_2
И. И. Фазлижанов, В. А. Уланов, М. М. Зарипов

- 123 Кластеры примесных ионов железа в кристалле BaF_2 : данные исследований методом ЭПР
Е. Р. Житейцев, В. А. Уланов, М. М. Зарипов, Е. П. Жеглов
- 125 Ян-теллеровский механизм связи в ассоциатах примесного иона Co^{2+} с дефектом междоузельного фтора в кристалле BaF_2
В. А. Уланов
- 128 ЭПР в квазиодномерном проводнике $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$
Р. М. Ерёмкина
- 130 Микроструктура водных растворов нитрата гадолиния в процессе их охлаждения с различными скоростями
Г. П. Вишневская, Е. Н. Фролова, А. Р. Фахрутдинов
- 134 О возможном релаксационном магнитоэлектрическом эффекте в резко охлажденном металлomezогене
Н. Е. Домрачева, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов
- 136 Делокализация неспаренных электронов ионов Cu^{2+} в монокристалле $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.05}\text{O}_4$
Т. А. Иванова
- 139 Осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в бислоях сильный ферромагнетик/сверхпроводник
Б. П. Водопьянов, Л. Р. Тагиров
- 141 Поляризационная развязка суперфлуоресценции и накачки в кристалле дифенила с пиреном
А. А. Калачёв, А. А. Калинин, В. В. Самарцев
- 145 Динамика твердофазной эпитаксиальной кристаллизации и образования жидкой фазы на поверхности имплантированного кремния
Я. В. Фаттахов, М. Ф. Галяутдинов, Т. Н. Львова, М. В. Захаров
- 148 Моделирование корректирующей системы для устранения зональных и тессеральных гармоник магнитного поля в большом объеме для системы катушек Гарретта
Р. Т. Галеев, А. Р. Фахрутдинов
- 151 Долговременная сенситизация – модель мембранных механизмов нарушений в функционировании нейронной сети
Х. Л. Гайнутдинов, В. В. Андрианов, Т. Х. Гайнутдинова, Р. Р. Тагирова
- 155 Определение концентрации оксида азота в тканях крысы методом спектроскопии ЭПР
Х. Л. Гайнутдинов, О. И. Гнездилов, А. И. Исмаилова, Л. Н. Муранова, А. А. Обычный
- 158 Ca^{2+} -чувствительные ионселективные мембраны на основе некоторых подандов
В. В. Андрианов, Х. Л. Гайнутдинов, Ю. Г. Галяметдинов, В. А. Доронин
- 162 Высокопроизводительный кластер на базе процессоров Athlon XP
С. К. Черников, А. Н. Ашихмин
- 167 Математическое моделирование при проектировании и доводке рам автомобилей повышенной проходимости
Ю. В. Садчиков, С. К. Черников
- 171 Объектно-ориентированная постановка и некоторые особенности реализации поспроцессора комплекса для анализа конструкций методом конечных элементов
С. К. Черников, И. В. Русских
- 176 Кинетика НДС области вершины трещины при ползучести
В. Н. Шлянников, Н. В. Бойченко, Б. В. Ильченко

Аспиранты и молодые ученые

- 180 Аспиранты и молодые ученые

Персоналии

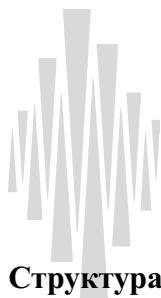
- 182 Юрий Васильевич Яблоков. К 70-летию со дня рождения
И. В. Овчинников, Т. А. Иванова
- 184 Нияз Рахметьянович Яфаев. К 70-летию со дня рождения
А. А. Бухараев
- 185 Слово об учителе. Памяти Уно Хермановича Копвиллема
В. В. Самарцев
- 187 Памяти Александра Рахмиевича Кесселя
И. С. Донская, И. В. Овчинников
- 190 Памяти Ильдара Гумеровича Бикчантаева
И. В. Овчинников, Н. Е. Домрачева

Научно-организационная деятельность

- 191 О работе Ученого совета
В. К. Воронкова
- 192 Развитие материально-технической базы института
В. Ф. Тарасов
- 193 Кафедра химической физики
К. М. Салихов
- 194 Международная премия им. Е. К. Завойского 2003
Л. В. Мосина
- 195 Журнал *Applied Magnetic Resonance*
Л. В. Мосина
- 196 *EPR newsletter* на родине электронного парамагнитного резонанса
Л. В. Мосина
- 199 IX Международные чтения по квантовой оптике
В. В. Самарцев
- 200 К 40-летию получения жидкого гелия в КФТИ: история, настоящее, перспективы
С. Я. Хлебников
- 202 Премия им. М. Л. Блатта 2003 года
Ю. И. Таланов
- 203 Архив Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского
КазНЦ РАН
Н. А. Карташева

Цифры и факты

- 204 2003 год в цифрах
- 205 Темы, финансируемые из госбюджета (Отделение физических наук РАН)
- 205 Проекты, финансируемые на конкурсной основе
- 209 Важнейшие результаты фундаментальных исследований, вошедшие в отчет о деятельности РАН в 2002 году
- 210 Публикации сотрудников института
- 215 Защиты, награды, государственные стипендии
- 216 Участие сотрудников института в преподавательской деятельности
- 217 Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ
- 220 Участие сотрудников в конференциях
- 230 Участие в выставках
- 230 Гости института



Структура института

Дирекция

Директор

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

Зам. директора по научной работе

Тарасов Валерий Федорович
доктор физ.-мат. наук

Зам. директора по общим вопросам

Рахамов Виктор Иванович

Ученый секретарь

Воронкова Виолета Константиновна
канд. физ.-мат. наук

Ученый совет

Салихов Кев Минуллинович, член-корр. РАН
председатель

Овчинников Игорь Васильевич, 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.

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, д.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

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: Рыбакова Людмила

Александровна (до 30.11.03), Хлебникова Альбина

Фердинандовна (с 24.10.03)

Экспериментальная мастерская

Мастер-станочник: Гайнутдинов Наиль

Валеевич

Отдел научно-технической информации

Вед. инженер: Богомолова Ольга Игоревна

Архив

Главный специалист: Карташева Нина Алексеевна

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: Гайнуллин Ринат Хайруллович

Группа капитального ремонта

Мастер: Гнездилов Иван Дмитриевич

Отдел материально-технического снабжения

Заведующий отделом: Садыков Нияз Рифгатович

Гараж

Механик: Лукин Иван Тимофеевич

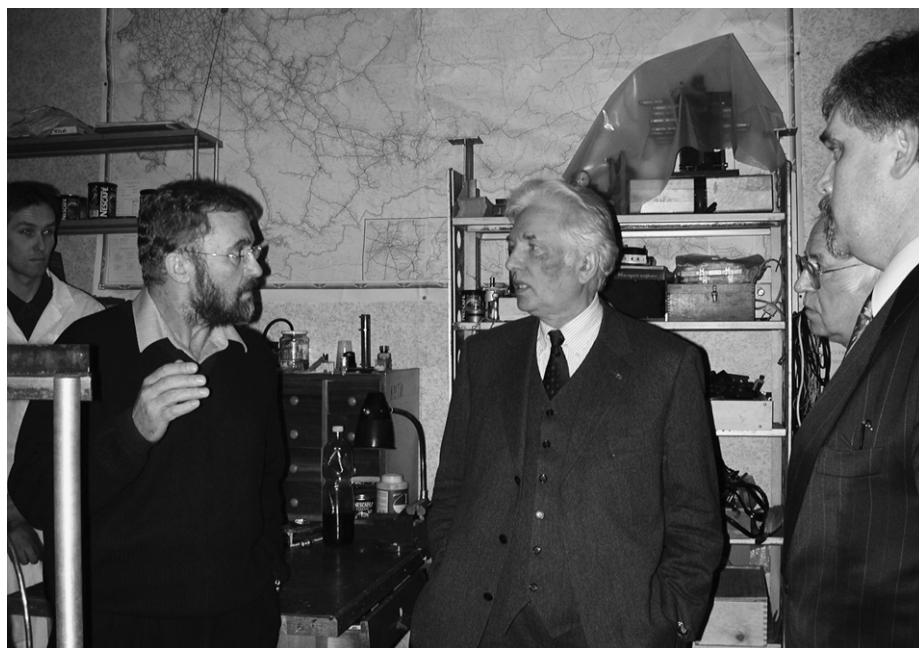
ВАЖНЕЙШИЕ СОБЫТИЯ ГОДА

Посещение института руководителями Российской академии наук и Республики Татарстан

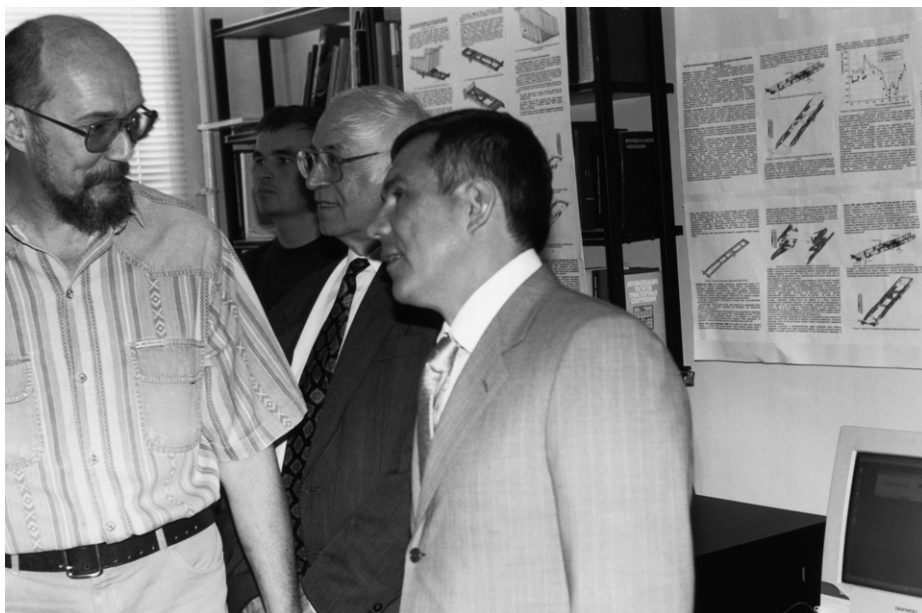
Посещение института руководителями РАН и Республики Татарстан всегда вызывает большой интерес всех сотрудников и является запоминающимся событием. Такие посещения вдохновляют и мобилизуют. Вдохновляют тем, что они демонстрируют интерес и внимание руководства к нашей работе. Мобилизирующая роль таких посещений проявляется уже на стадии ожидания таких визитов. Но главное, конечно, это оценка деятельности института. Сделанные во время посещения комментарии, оценки помогают, в одних случаях, укрепиться в правильности выбранных решений, в других случаях, внести коррективы в планы работ и принять необходимые решения.

В январе 2003 года в Казани состоялась научная сессия Академии наук Республики Татарстан и Казанского научного центра, посвященная 70-летию юбилею академика Роальда Зиннуровича Сагдеева. В ней приняли участие вице-президент РАН академик Геннадий Андре-

евич Месяц, академик Эдуард Павлович Кругляков (Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН), академик Алексей Максимович Фридман (Институт астрономии РАН), д.ф.-м.н. Вячеслав Михайлович Балебанов (Институт космических исследований РАН). Гости из РАН посетили институт, познакомились с проводимыми исследованиями. Состоялась встреча Г. А. Месяца с членами дирекции и заведующими лабораториями. Нам было очень интересно из первых рук услышать комментарии о научной политике Президиума РАН, о приборной политике, о новых веяниях в деятельности Высшей аттестационной комиссии РФ. Геннадий Андреевич посетил также несколько лабораторий, библиотеку института. О том, что у наших гостей сложилось положительное впечатление о работе нашего института, можно судить, например, по такому факту. 19–22 мая 2003 года состоялось общее собрание РАН и ОФН РАН. В докладе ака-



Академик Г. А. Месяц во время посещения лабораторий института.
Слева направо: С. В. Контуров,
В. С. Лобков, Г. А. Месяц,
К. М. Салихов, Г. В. Стинский.



Премьер-министр Республики Татарстан Р. Н. Минниханов знакомится с деятельностью КФТИ.

Наверху, слева направо: С. К. Черников, Ю. В. Садчиков, К. М. Салихов, Р. Н. Минниханов.

Внизу, слева направо: Р. Н. Минниханов, А. И. Коновалов, В. И. Рахамов, А. А. Камалеев, К. М. Салихов, А. Р. Кессель, М. Х. Бренерман.

демика Г. А. Месяца были отмечены результаты работ нашего института по жидким кристаллам со спин-переменными свойствами и разработка медицинского магнитно-резонансного томографа.

2 июня 2003 года КФТИ КазНЦ РАН посетил Премьер-министр Республики Татарстан Рустам Нургалиевич Минниханов. Одновременно с ним были Председатель Президиума КазНЦ РАН академик Александр Иванович Коновалов, руководитель Департамента науки в правительстве Республики Татарстан д.и.н. Рамиль Миргасимович Валеев, Глава администрации нашего района Альберт Аскарлович Камалеев и исполнительный директор фонда НИОКР Республики Татарстан Валерий Валентинович Чесноков. Гостям рассказали о проводимых в институте исследованиях, показали фемтосекундный

лазер, атомно-силовой микроскоп. Особый интерес Рустама Нургалиевича вызвали результаты работ по компьютерному моделированию автомобилей, их отдельных узлов, по математическому моделированию оптимального расположения нефтедобывающих скважин и деятельность института по развитию телекоммуникационных систем в Татарстане.

Посещение института Р. Н. Миннихановым, данная им оценка работы института показывают, что руководство Татарстана уделяет большое внимание успешному развитию науки, фундаментальной и прикладной.

*К. М. Салихов
директор*



ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ГОДА

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Ученым советом КФТИ КазНЦ РАН в отчет РАН за 2003 год

1.

Построена последовательная квазиклассическая теория андреевского отражения для гетерогенных структур, содержащих границу ферромагнетик/сверхпроводник, и проанализирован эффект близости для бислоя сильный ферромагнетик – “грязный” сверхпроводник.

Аннотация. Выведены квазиклассические уравнения сверхпроводимости для металлов с расщеплённой по спине зоной проводимости. Получены граничные условия для квазиклассических функций Грина на границе раздела ферромагнетик/сверхпроводник для произвольной прозрачности потенциального барьера. Найдено аналитическое выражение для андреевского контактанса точечного контакта ферромагнетик/сверхпроводник, представленное в виде функции отношения фермиевских импульсов спиновых подзон ферромагнетика. Из сравнения полученных результатов с экспериментальными данными сделаны корректные оценки для контактной поляризации различных ферромагнитных материалов.

Лаборатория физики перспективных материалов КФТИ КазНЦ РАН.

Зав. лабораторией: Тейтельбаум Г.Б.

Отв. исполнители: Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.

Публикации:

1. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Андреевский контактанс точечного контакта ферромагнетик/сверхпроводник. Письма в ЖЭТФ **77**, № 3, 153–158 (2003)
2. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в бислоях сильный ферромагнетик-сверхпроводник. Письма в ЖЭТФ **78**, № 9, 1043–1047 (2003)
3. Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Andreev reflection spectroscopy of ferromagnets. Int. Conference on Magnetism. Roma, July 27 – August 1, p. 217. Roma 2003.
4. Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Theory of Andreev spectroscopy of ferromagnets. Advanced Research Workshop

“Nanostructured Magnetic Materials and their Application” (ARW NMMA-2003). Istanbul, July 1–4, p. 61. Istanbul 2003.

5. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Андреевский контактанс точечного контакта ферромагнетик/сверхпроводник. Тез. докл. XXXIII совещания по физике низких температур. Екатеринбург, 17–20 июня, с. 62. Екатеринбург 2003.
6. Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Quasiclassical theory of ferromagnet-superconductor contacts. Int. Workshop “Recent Trends on Nanomagnetism”. Gebze, July 4, p. 14. Gebze 2003.

2.

Предложен и реализован метод времяразрешенной фотофононной спектроскопии примесных кристаллов, который позволяет исследовать как оптические спектры поглощения, так и передачи энергии внутри примесной системы в режиме реального времени.

Аннотация. Суть метода состоит в том, что по изменению температуры болометра в различные времена после действия лазерного импульса детектируется временная эволюция спектра возбуждения неравновесных фононов, возникающих из-за безызлучательной релаксации возбужденного состояния или в результате миграции энергии в примесной системе. Время разрешения порядка 20–30 нс и определяется инерционностью болометра. Экспериментальная апробация метода была осуществлена на кристаллах рубина и трифторида лантана с празеодимом. В рубине этим методом удалось зафиксировать новые местоположения одиночных ионов и обнаружить быструю резонансную передачу энергии от одиночных ионов к четвертым ближайшим соседям, а в кристалле трифторида лантана с празеодимом в спектрах возбуждения фононов вблизи 1D_2 области частот наряду с пятью ос-

10.

Установлены условия применения теорий эффективных сред для практического анализа оптических свойств ансамбля металлических наночастиц.

Аннотация. С использованием обобщенной теории Ми получены точные решения, определяющие граничные условия применения теорий эффективных сред для корректных расчетов эффективных диэлектрических функций и линейных оптических спектров экстинкции для композитных материалов типа диэлектрик с наночастицами металла. В качестве определяющих параметров структурной топологии композиционных материалов выделены такие величины, как размер наночастиц, их распределение по размерам, однородность пространственного расположения частиц в объеме матрицы и фактор заполнения диэлектрика металлом.

Лаборатория радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Степанов А.Л.

Отв. исполнитель: Степанов А.Л.

Публикации:

1. Stepanov A.L., Quinten M., Kreibig U.: Evaluation of efficiency of optical effective medium theories by comparison with the generalized Mie theory for metal nanoparticles. Conf. on Laser- and Electro-Optics/Europe (CLEO/Europe 2003) and Int. Quantum Electronics Conf. (EQEC 2003), June 22–27, p. 104. Munich 2003.
2. Stepanov A.L., Quinten M., Kreibig U.: Applicability of optical effective medium theories for metal nanoparticles composites. Surface Plasmon Photonics: Euroconf. on Nano-Optics. September 20–25, pp. 93–94. Granada 2003.

Важнейшие законченные исследования и разработки, готовые к практическому применению

1.

Разработаны математические модели для исследования прочности и жесткости несущей системы большегрузного автомобиля-самосвала семейства КамАЗ. Исследовано напряженно-деформированное состояние несущей системы автомобиля при изгибе и кручении.

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

Руководитель: Черников С.К.

2.

Разработан комплекс программ для кластера “АРКО-9A2200”.

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

Руководитель: Черников С.К.

3.

Разработаны методические рекомендации по сертификации нестандартных транспортных средств.

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

Руководитель: Черников С.К.

Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2003 года

В рамках ежегодной итоговой конференции КФТИ был проведен конкурс научных работ КФТИ КазНЦ РАН за 2003 год.

Конкурсная комиссия в составе: Салихова К.М. (председатель), Баязитова Р.М., Воронковой В.К., Лисина В.Н., Овчинникова И.В., Самарцева В.В., Таланова Ю.И., Тарасова В.Ф., Шакирзянова М.М. отобрала из 42 докладов, представленных на стендовой сессии, 10 докладов для устного представления.

По итогам конкурса 2003 года присуждены первая, вторая, третья и поощрительная премии.

1-е место

- Шегеда А.М., Лисин В.Н.: Времяразрешенная фотофононная спектроскопия примесных центров в диэлектриках

2-е место и 3-е место разделили:

- Гнездилов О.И., Мамбетов А.Е., Обычный А.А., Салихов К.М.: Исследование электронной спиновой поляризации и спинового обмена в смешанных растворах порфиринов и свободных радикалов методом времяразрешенной ЭПР спектроскопии
- Воронкова В.К., Галеев Р.Т. (КФТИ КазНЦ РАН), Шова Р.Т., Новицкий Г., Туртэ К.И. (Институт химии АНМ, Молдова), Канески А., Гаттески А. (Университет г. Флоренции, Италия), Симонов Ю.А. (Институт прикладной физики АНМ, Молдова): Обменные взаимодействия и спиновая динамика в пятиядерных кластерах $[\text{Cu}_3^{\text{II}}\text{Ln}_2^{\text{III}}(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, ($\text{Ln}^{\text{III}} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Pr}$)

Поощрительная премия

- Галютдинов М.Ф., Курбатова Н.В., Герасимов К.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Антонов Г.П., Шалин П.А., Зайцев В.И. (ТатНИПИнефть): Экологический мониторинг поверхностных и грунтовых вод методом лазерного зондирования флуоресцентных индикаторов

В рамках традиционной ежегодной конференции молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН был проведен конкурс научных работ за 2003 год.

Конкурсная комиссия в составе: Богдановой Х.Г., Самарцева В.В., Таланова Ю.И., Мурсалимова А.Р. по итогам устной сессии присудила следующие призовые места:

1-е место

- Лапаев Д.В., Сафиуллин Г.М., Лобков В.С., Салихов К.М., Галяметдинов Ю.Г., Князев А.А.: Исследование кинетических характеристик люминесценции композитной пленки $\text{pvk:Eu}(\text{dk})_3\text{Вру}$ с помощью многофункционального автоматизированного оптического спектрометра

2-е место

- Носков М.И.: Влияние дифракции света и движения атомов на качество сохранения информации в технике квантовой памяти на основе эффекта фотонного эха в газах

3-е место

- Капралов А.В., Булатов А.Р., Потапов А.В.: Генерация когерентных магнитоупругих волн на микронеоднородностях в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$

Комиссия рекомендовала поощрить Нурутдинова Р.М. за разработку и сборку уникальной исследовательской аппаратуры.

Механизм электронной спиновой поляризации возбужденных триплетных состояний, вызванной взаимной аннигиляцией триплетов

К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Рассмотрен новый механизм поляризации спинов триплетных состояний. Спиновая поляризация возникает в результате спин-селективной триплет-триплетной аннигиляции и последующей спиновой динамики в спин-коррелированных парах триплетов. Для короткоживущих пар триплетов получены соотношения, которые определяют знак поляризации.

Введение

Известно много механизмов поляризации электронных спинов. Выделим среди них те, которые связаны со спиновыми правилами отбора, со спиновой селективностью элементарных фотохимических и фотофизических процессов (см., например, [1, 2]). В этой ситуации сценарий формирования поляризации состоит в том, что в результате спин-селективного молекулярного процесса образуется спин-коррелированная пара парамагнитных частиц. В момент возникновения этих пар спины партнеров не поляризованы. Однако спиновая динамика в спин-коррелированных парах создает неравновесную поляризацию электронных спинов. Эта поляризация характерным образом проявляется в спектрах электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Поэтому анализ спектров ЭПР дает возможность изучать фотоиндуцированные процессы.

В этой работе обсуждается новый механизм поляризации возбужденных триплетных состояний, индуцированной взаимной аннигиляцией триплетов. Известно [3], что пара взаимодействующих экситонов в молекулярных кристаллах может аннигилировать в результате переноса энергии от одной молекулы пары к другой с образованием синглетного возбужденного состояния. Это приводит к задержанной флуоресценции. Такая аннигиляция триплетов является спин-селективным процессом. Поэтому пары триплетов, избежавшие аннигиляции, оказываются в спин-коррелированном состоянии и можно ожидать, что спиновая

динамика в этих спин-коррелированных парах индуцирует спиновую поляризацию триплетных состояний. Этот механизм поляризации можно назвать механизмом триплетных пар. Надо отметить, что аналогичный механизм был предложен в [4] в связи с влиянием кислорода на поляризацию возбужденных триплетных молекул.

В этой работе применительно к короткоживущим парам триплетов с помощью теории возмущений рассчитана спиновая поляризация, обусловленная триплет-триплетной аннигиляцией.

Описание поляризации триплетов и ее проявления в спектрах ЭПР

Поляризация состояний со спином $S = 1$ задается поляризационными операторами T_{LM} ($L = 0, 1, 2$; $-L \leq M \leq L$) [5]. Операторы T_{LM} определяют дипольный момент триплета и равны

$$T_{1,+1} = -\frac{1}{2}(S_X + iS_Y),$$

$$T_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}S_Z,$$

$$T_{1,-1} = \frac{1}{2}(S_X - iS_Y).$$

Операторы T_{2M} эквивалентны тензору квадрупольного момента Q_{ik}

магнитном поле. Например, при ориентации магнитного поля вдоль оси Z тензора РНП получаем

$$\langle S(A) \rangle_Z = -\frac{16}{27} J \gamma B_0 E^2 t^4.$$

Если поле направлено вдоль оси X , то дипольная поляризация равна

$$\langle S(A) \rangle_X = -\frac{4}{27} J \gamma B_0 (D + E)^2 t^2.$$

Отличный от нуля квадрупольный момент триплета появляется уже во втором порядке теории возмущений

$$\langle Q_{ZZ}(A) \rangle = -\frac{8}{27} D J t^2,$$

$$\langle Q_{XX}(A) - Q_{YY}(A) \rangle = -\frac{8}{9} E J t^2.$$

Отсюда следует, что во втором порядке теории возмущений наведенный квадрупольный момент не зависит от ориентации кристалла во внешнем магнитном поле. Такая зависимость появляется в четвертом порядке.

Заключение

Взаимная аннигиляция триплетов создает спин-коррелированные пары триплетов. Спиновая динамика в спин-

коррелированных парах трансформирует взаимную упорядоченность спинов пары в дипольную и квадрупольную поляризацию индивидуальных триплетов. Необходимым условием формирования спиновой поляризации, обусловленной триплет-триплетной аннигиляцией, является спин-спиновое взаимодействие между двумя триплетами. Когда расстояние между триплетами увеличивается настолько, что спин-спиновым взаимодействием уже можно пренебречь, формирование спиновой поляризации триплетов прекращается. Но разошедшиеся триплеты сохраняют поляризацию, которая сформировалась за время их встречи и взаимодействия.

Полное изложение результатов работы будет опубликовано в [6].

Эта работа поддерживалась грантами “Ведущие научные школы” НШ-1905.2003.2 и РФФИ № 03-03-32602.

Литература

1. Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского 2002. Ежегодник, с. 21–23. Казань: ФизтехПресс 2003.
2. Гнездилов О.И., Мамбетов А.Е., Обычный А.А., Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского 2003. Ежегодник, с. 22–25. Казань: ФизтехПресс 2004.
3. Johnson R.C., Merrifield R.E., Avakian P., Flippen R.B.: Phys. Rev. Lett. **19**, 285–287 (1967)
4. Fujisawa J., Ohba Y., Yamauchi S.: J. Phys. Chem. A **101**, 434 (1997)
5. Варшавский Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.: Квантовая теория углового момента. М.: Наука 1975. 439 с.
6. Salikhov K.M.: Appl. Magn. Reson. (2004) in press.

Исследование электронной спиновой поляризации и спинового обмена в смешанных растворах порфирина-стабильный свободный радикал

О. И. Гнездилов, А. Е. Мамбетов, А. А. Обычный, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Изучены спектры ЭПР с наносекундным разрешением для двух смешанных растворов порфиринов, ZnTPP и H₂TPP, и стабильного свободного радикала TEMPO в толуоле. Показано, что спектры ЭПР триплетного состояния порфиринов и свободных радикалов проявляют химически индуцированную спиновую поляризацию. Для относительно короткоживущих радикал-триплетных (радикал + порфирин в триплетном состоянии) пар (РТП), используя теорию возмущений до четвертого порядка, были получены теоретические выражения для спиновой поляризации триплетов и радикалов, индуцированной взаимодействием возбужденных порфиринов с радикалами. Были смоделированы зависящие от времени спектры ЭПР триплетов с учетом спин-решеточной релаксации. Показано, что перенос спиновой поляризации имеет существенно меньшую константу, чем константа скорости тушения триплетов при их столкновении с радикалами. Показано, что в триплете порфиринов величина начальной спиновой поляризации, наведенной спин-селективным интеркомбинационным переходом, на 2 порядка больше величины равновесной поляризации.

Механизмы поляризации спинов

Фотофизика и фотохимия систем, содержащих молекулы порфиринов в качестве доноров электрона в ходе фотоиндуцированного разделения заряда, привлекает большое внимание. Система порфирин/хинон может служить моделью для исследования процесса разделения заряда в реакционных центрах фотосинтеза. Исследование систем, содержащих порфирины, связано и с надеждой найти новые системы, которые можно использовать в солнечных батареях и т.д.

Эффективность переноса электрона определяется молекулярной динамикой донора и акцептора, перекрытием электронных орбиталей при столкновении молекул донора и акцептора и структурой столкновительного комплекса, а также стерическими факторами.

Исследованию переноса электрона может существенно помочь изучение другого бимолекулярного процесса – спинового обмена. Спиновый обмен является более простым процессом по сравнению с переносом электрона, так как спиновый обмен практически не вызывает реорганизации растворителя. Поэтому спиновый обмен может выступать как модельный процесс для измерения частоты бимолекулярных столкновений, определения степени перекрытия электронных орбиталей и обнаружения стерических факторов. Такие данные, полученные при исследовании спинового обмена, могут быть использованы в дальнейшем при исследовании переноса электрона. Спиновый обмен в растворах был всесторонне исследован для случая стабильных радикалов, кислорода и комплексов парамагнитных ионов (см., например, [1]). Уже давно изучается спиновый обмен между триплетными экситонами в молекулярных кристаллах (см., например, [2]). Исследования спинового обмена в растворах, когда участвуют возбужденные молекулы, начались недавно. Возбужденные триплетные молекулы в раство-

рах имеют короткое время жизни, так что их концентрация мала. Это является одним из существенных затруднений при регистрации ЭПР. Однако чувствительность ЭПР может быть заметно увеличена благодаря спиновой поляризации этих триплетных молекул. В литературе известны несколько механизмов поляризации триплетов. Один из них – триплетный механизм (ТМ) поляризации [3, 4]. В этом случае триплеты возникают с поляризованными спинами в результате спин-селективных триплет-синглетных внутримолекулярных переходов в электронно-возбужденных молекулах.

В растворах, содержащих электронно-возбужденные молекулы и радикалы, спиновая поляризация может также формироваться в спин-коррелированных парах триплет-радикал [5]. Для того, чтобы дать представление об этом механизме спиновой поляризации, представим себе диффузионную пару, состоящую из свободного радикала и молекулы в возбужденном электронном триплетном состоянии. Общий спин пары может быть 1/2 (дублетное состояние, D пары) или 3/2 (квартетное состояние, Q пары). Поляризация формируется в результате комбинации двух процессов: спин-селективное тушение триплетов свободными радикалами и спиновая динамика в РТП. Тушение триплетов происходит только в D парах. В результате диффузионные РТП обогащаются парами в Q состоянии. Таким образом, спин-селективное тушение триплетов радикалами создает спин-коррелированные РТП. Спиновая динамика в этих спин-коррелированных РТП превращает корреляцию спинов РТП в дипольную поляризацию и в квадрупольную поляризацию триплета, которые проявляются в спектрах ЭПР. Этот путь формирования спиновой поляризации называется радикал-триплет-парным механизмом (РТПМ).

Известен еще один механизм поляризации в смешанных растворах триплет-радикал [6]. Он связан с тем, что при столкновении возбужденных молекул в синглетном

Таблица 1. Результаты расчетов по теории возмущений спиновой поляризации для РТП, рожденных в дублетном и квартетном состояниях (использовано обозначение $\Delta g = g_R - g_T$).

Вклад второго порядка		Вклад четвертого порядка
Дублетное состояние		
$s_D(R) = \langle S_Z(R) \rangle$	$2\Delta g \beta B_0 J t^2 / 3\hbar$	$-\beta B_0 J \{4\Delta g [9J^2 + (\Delta g \beta B_0)^2 / \hbar^2] + D^2(8g_R - 20g_T/3) + E^2(24g_R - 20g_T)\} t^4 / 72\hbar$
$s_D(T) = \langle S_Z(T) \rangle$	$-2\Delta g \beta B_0 J t^2 / 3\hbar$	$\beta B_0 J \{4\Delta g [9J^2 + (\Delta g \beta B_0)^2 / \hbar^2] + D^2(40g_R/3 + 4g_T) + E^2(40g_R + 12g_T)\} t^4 / 72\hbar$
$\langle S_Z(R) \rangle + \langle S_Z(T) \rangle$	0	$2\beta(g_R + 2g_T)B_0 J(D^2 + 3E^2)t^4 / 27\hbar$
Q_{ZZ}	$(2/3)DJt^2$	$-J(3D^3 + 6D^2J - 18E^2J + D(9E^2 + 27J^2 + \beta^2 B_0^2(6g_R^2 - 5g_Rg_T + 17g_T^2)/\hbar^2)t^4 / 54$
Q_{X-Y}	$2EJt^2$	$-EJ(3D^2 + 9E^2 - 12DJ + 27J^2 + \beta^2 B_0^2(6g_R^2 - 5g_Rg_T + 17g_T^2)/\hbar^2)t^4 / 18$
Квартетное состояние		
$s_Q(R) = \langle S_Z(R) \rangle$	$-\Delta g \beta B_0 J t^2 / 3\hbar$	$\beta B_0 J(4\Delta g(9J^2 + (\Delta g \beta B_0)^2 / \hbar^2) + D^2(8g_R - 20g_T/3) + E^2(24g_R - 20g_T))t^4 / 144\hbar$
$s_Q(T) = \langle S_Z(T) \rangle$	$\Delta g \beta B_0 J t^2 / 3\hbar$	$-\beta B_0 J(4\Delta g(9J^2 + (\Delta g \beta B_0)^2 / \hbar^2) + D^2(40g_R/3 + 4g_T) + E^2(40g_R + 12g_T))t^4 / 144\hbar$
$\langle S_Z(R) \rangle + \langle S_Z(T) \rangle$	0	$-\beta(g_R + 2g_T)B_0 J(D^2 + 3E^2)t^4 / 27\hbar$
Q_{ZZ}	$-(1/3)DJt^2$	$J(3D^3 + 6D^2J - 18E^2J + D(9E^2 + 27J^2 + \beta^2 B_0^2(6g_R^2 - 5g_Rg_T + 17g_T^2)/\hbar^2)t^4 / 108$
Q_{X-Y}	$-EJt^2$	$EJ(3D^2 + 9E^2 - 12DJ + 27J^2 + \beta^2 B_0^2(6g_R^2 - 5g_Rg_T + 17g_T^2)/\hbar^2)t^4 / 36$

Таблица 2. Набор параметров, полученных из сравнения расчетов с экспериментальными данными по интенсивности спектров ЭПР радикала TEMPO в ZnTPP-TEMPO и H₂TPP-TEMPO растворах.

Параметр	Значение			
	ZnTPP-TEMPO		H ₂ TPP-TEMPO	
	240 К	180 К	240 К	180 К
T_{1T} (мкс)	0.4	20	0.4	20
T_{1R} (мкс)	3	50	3	50
τ_T (мкс)	1000	1000	1000	1000
K_{ESPT} (10 ⁶ л/с · мМ)	0.16	0.04	0.16	0.04
K_q (10 ⁶ л/с · мМ)	0.02	0.01	0.02	0.01
K_{EISC} (10 ⁶ л/с · мМ)	0.12	3	0.12	3
K_0 (10 ⁶ с ⁻¹)	100	30	20	10
K_S (10 ⁶ с ⁻¹)	1000	300	200	100
m_{eq}	0.001	0.001	0.001	0.001
m_0	0.2	0.2	-0.08	-0.08
m^Q (Т)	0.25	0.05	0.25	0.05
m^Q (R)	-0.125	-0.025	-0.125	-0.025
m^D (Т)	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
m^D (R)	0.25	0.25	0.25	0.25
K_D (10 ⁶ л/с · мМ)	2	1	2	1

зация по РТПМ для триплетного состояния и радикала, соответственно, для РТП, рожденных в дублетном состоянии.

Набор подгоночных параметров, приведенных в таблице 2, был взят на основе следующих предположений. Расчеты для короткоживущих РТП (см. таблицу 1) показывают, что поляризация спина радикала, наведенная EISC механизмом, в два раза больше, чем поляризация, наведенная механизмом тушения триплетов, и знак поляризации противоположен для этих двух механизмов: положителен в случае EISC механизма и отрицателен для механизма тушения триплетов радикалами. Оценки по теории возмущений показали, что РТПМ поляризует

триплеты на порядок больше, чем радикалы. Поэтому при симуляции мы предполагали, что РТПМ поляризует триплеты в десять раз сильнее, чем радикалы (см. таблицу 2). Мы предполагаем, что $g_T = g_R$ так, что РТПМ не дает вклад в поляризацию спинов во втором порядке теории возмущений (см. таблицу 1). Намагниченность триплета за счет одних спин-селективных межсистемных переходов была выбрана с положительным знаком для ZnTPP ($m_0 = +0.2$) и отрицательным знаком для H₂TPP ($m_0 = -0.08$), этот выбор был обусловлен знаком дипольной поляризации триплетного состояния, полученным при исследовании триплетных времяразрешенных спектров ЭПР и экспериментальным фактом, что интег-

ральная интенсивность спектра ЭПР триплета для H_2TPP меньше, чем для $ZnTPP$. Константы скорости переноса поляризации ESPT (electron spin polarization transfer), триплетного тушения и EISC были определены из уравнений: $K_{ESPT} = p_{ESPT}K_D$, $K_q = p_qK_D$, $K_{EISC} = p_{EISC}K_D$, $K_D = 4\pi d(D_R + D_T)$, здесь D – коэффициент диффузии. Например, для молекулярно-кинетических параметров $d = 0.4$ нм, $D = 10^{-9}$ м²/с K_D можно оценить как $K_D = 2 \cdot 10^6$ л/(с·мМ). Это значение было использовано нами в изученных системах при определении величины K_D при температуре 240 К. Для смешанных растворов $ZnTPP/TEMPO$ и $H_2TPP/TEMPO$ получено $p_{ESPT} = 0.16/3 \cong 0.05$. Этот результат означает, что для переноса спинового возбуждения от триплета к радикалу имеет место ситуация $Jt < 1$, т.е. ситуация слабого обмена. Неожиданным результатом оказалась очень высокая эффективность поляризации по механизму EISC в $ZnTPP/TEMPO$ и $H_2TPP/TEMPO$ (см. таблицу 2).

Следует отметить, что экспериментальные данные могут быть описаны и другими наборами параметров. Представленный набор не уникален, но показывает, что экспериментальные данные могут быть объяснены разумными параметрами. Чтобы найти единственный набор параметров, мы предполагаем провести дальнейшие экспериментальные (включая также и оптические изме-

рения) и теоретические исследования смешанных растворов порфирина-свободный радикал.

Полное изложение результатов этого исследования опубликовано в работе [8].

В проведении экспериментов участвовали М. П. Цейтлин и О. А. Цейтлин.

Эта работа поддерживалась грантами “Ведущие научные школы” (НШ-1905.2003.2) и РФФИ (№ 03-03-32602).

Литература

1. Molin Yu.N., Salikhov K.M., Zamaraev K.I.: Spin exchange. Principles and applications in chemistry and biology. Heidelberg Berlin: Springer 1977. 317 p.
2. Jones M.T., Chesnut D.B.: J. Chem. Phys. **38**, 1311 (1963)
3. Wong S.K., Hutchison D.A., Wan J.K.S.: J. Chem. Phys. **58**, 985 (1973)
4. Salikhov K.M., Molin Yu.N., Sagdeev R.Z., Buchachenko A.L.: Spin polarization and magnetic effects in radical reactions. Amsterdam: Elsevier 1984. 419 p.
5. Blaetter C., Jent F., Paul H.: Chem. Phys. Lett. **166**, 375 (1990)
6. Kawai A., Obi K.: J. Phys. Chem. **96**, 52 (1992)
7. Обыночный А.А., Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Завойского 2001. Ежегодник, с. 19–20. Казань: ФизтехПресс 2002.
8. Gnezdilov O.I., Mambetov A.E., Obynochny A.A., Salikhov K.M.: Appl. Magn. Reson. **25**, 157 (2003)

нения. Величина взаимодействия между ионом меди и неодима через четыре карбоксильные группы оценена как $J = 15 \pm 5 \text{ см}^{-1}$, что существенно меньше, чем соответствующие величины взаимодействия в димерных комплексах меди с аналогичными мостиковыми фрагментами [9], но более чем на порядок больше, чем взаимодействие медь-неодим в изученном нами ранее соединении [6].

Работа выполнена совместно с С. Шова, Г. Новицким, К. И. Туртэ (Институт химии АНМ, Молдова), которые синтезировали данные соединения и предоставили их нам для исследования методом ЭПР, с А. Канески, Д. Гаттески (Университет г. Флоренции, Италия), которые выполнили некоторые измерения температурной зависимости спектров ЭПР, с Ю. А. Симоновым (Институт прикладной физики АНМ, Молдова), в группе которого выполнены рентгеноструктурный анализ соединений. Авторы благодарят К. М. Салихова за полезные обсуждения, Л. В. Коробченко и Е. Р. Житейцова за помощь в проведении эксперимента. Более подробно результаты описаны в [7]. Работа выполнена частично в рамках гранта Фонда НИОКР РТ (проект № 06-6.3-223).

Литература

1. а) Kahn O.: *Molecular magnetism*, p. 380. New York: VCH Publishers 1993; б) Kahn O. (ed.): *Magnetism: A supramolecular function* (NATO ASI series C484). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers 1996; в) Kahn O.: *Adv. Inorg. Chem.* **4**, 179–358 (1996); г) Kahn O.: *Struct. Bonding* **68**, 89–167 (1987); д) Kahn M.L., Mathoniere C., Kahn O.: *Inorg. Chem.* **38**, 3692–3697 (1999)
2. Benelli C., Gatteschi D.: *Chem. Rev.* **102**, 2369 (2002); Gatteschi D., Kahn O., Miller J.S., Palacio F. (eds.): *Molecular magnetic materials* (NATO ASI Series, series E, vol. 198). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers 1991; Miller J.S., Epstein A.J.: *Chem. Eng. News* **1995**, 30–42.
3. Sakamoto M., Manseki K., Okawa H.: *Coord. Chem. Rev.* **219–221**, 379–414 (2001); Okawa H., Furutachi H., Fenton D.E.: *Coord. Chem. Rev.* **174**, 51–75 (1998)
4. Avecilla F., Platas-Iglesias C., Rodrigues-Cortinas R., Guillemot G., Bunzli J.-C.G., Brondino C.D., Geraldes C.F.G., de-Blas A., Rodriguez-Blas T.: *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **2002**, 4659–4665; Piguot C., Edde C., Rigaut S., Bernardinelli G., Bunzli J.-C.G., Hopfgarther G.: *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **2000**, 3999–4006.
5. Likodimos V., Guskos N., Gamari-Seale H., Koufoudakis A., Wabia M., Typek J., Fuks H.: *Phys. Rev. B* **54**, 12342–12352 (1996); Rudra I., Raghu C., Ramasesha S.: *Phys. Rev. B* **65**, 224411 (2002)
6. Salikhov K.M., Galeev R.T., Voronkova V.K., Yablokov Yu.V., Legendziewicz J.: *Appl. Magn. Reson.* **14**, 457–472 (1998)
7. Voronkova V.K., Galeev R.T., Shova S., Novitchi G., Turta C.I., Caneschi A., Gatteschi D., Lipkowski J., Simonov Yu.A.: *Appl. Magn. Reson.* **25**, 227–247 (2003)
8. Абрагам А., Блинн Б.: *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, т. 1. М.: Мир 1970. 651 с.
9. Яблоков Ю.В., Воронкова В.К., Мосина Л.В.: *Парамагнитный резонанс обменных кластеров*. М.: Наука 1988. 182 с.

лекса и электронной структуры его лигандов, так и кинетических особенностей каждого последующего этапа их развития, что позволит прогнозировать фотофизические свойства соединений во время их синтеза.

В данной работе было проведено исследование кинетических характеристик люминесценции композитной пленки, состоящей из органического полупроводникового (сопряженного) полимера поливинилкарбазола (ПВК) и комплекса трис[1-(4-додецилоксифенил)-3-(4-гексадецилоксифенил)-пропан-1,3-дион-5,5'-ди(гептадецил)-2,2'-бипиридил]Eu [Eu(DK)₃Vру], чистого комплекса Eu(DK)₃Vру и чистого ПВК, и сопоставление полученных результатов.

Методика и техника эксперимента

Приготовление образца

Для получения комплекса Eu(DK)₃Vру к горячему спиртовому раствору, содержащему 0.195 г (0.3 ммоль) замещенного β-дикетона, 0.032 г (0.1 ммоль) 5,5'-ди(гептадецил)-2,2'-бипиридила и 0.012 г (0.3 ммоль) NaOH, при перемешивании медленно прикапали спиртовой раствор EuCl₃·6H₂O 0.037 г (0.1 ммоль). Суспензию перемешивали 10 мин.

Выпавший мелкодисперсионный осадок желтого цвета отфильтровали в горячем виде, промыли спиртом и высушили в вакууме над P₂O₅. Установление структуры полученного соединения проводилось на основе данных элементного анализа и ИК спектров. Для приготовления композитной пленки ПВК:Eu(DK)₃Vру, ПВК вместе с комплексом европия растворялся в толуоле в соотношении 1:1. Раствор фильтровался через мембрану 0.2 мкм. Отфильтрованная смесь накапывалась на кварцевую подложку, закрепленную на центрифуге и вращающуюся со скоростью 2000 оборотов/мин.

Методика исследований

Изучение кинетических характеристик люминесценции композитной пленки ПВК:Eu(DK)₃Vру проведено при помощи многофункционального автоматизированного оптического спектрометра, построенного на базе универсального спектрального вычислительного комплекса КСВУ-23. Модернизация спектрометра основана на добавлении в схему регистрации сигнала следующих блоков: предусилителя сигнала с фотоэлектронного преобразователя (ФЭУ), устройства выборки хранения (УВХ) [6], масштабного усилителя сигнала, устройства управ-

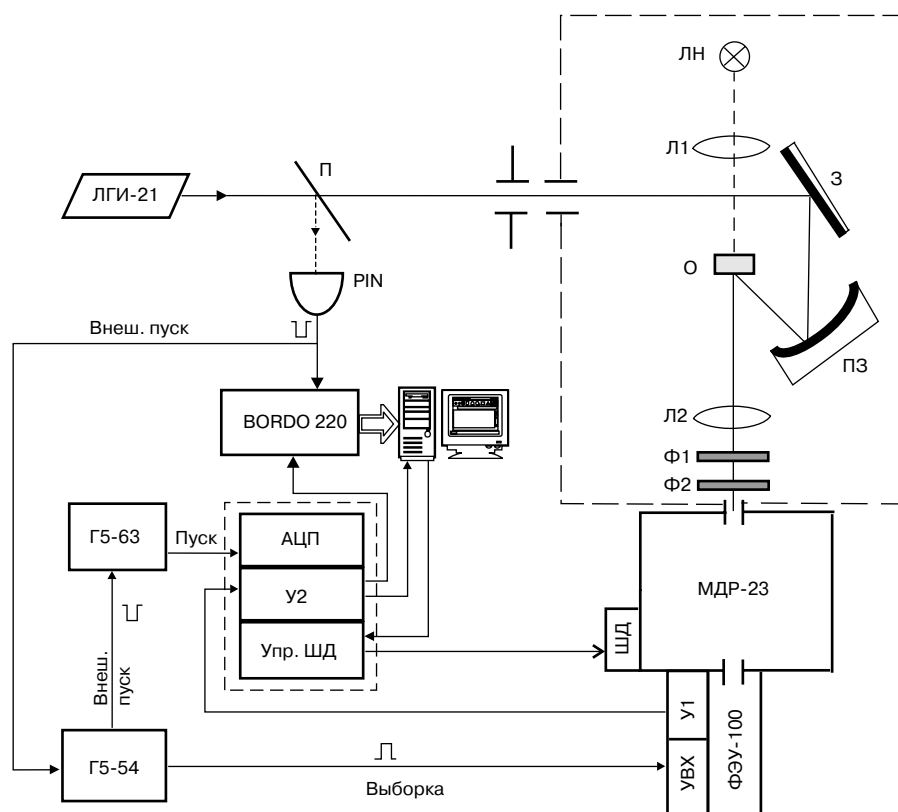


Рис. 2. Блок-схема спектрометра. ЛГИ-21 – импульсный азотный лазер; П – светоделительная кварцевая пластинка; PIN – кремниевый PIN-диод; Д – диафрагма; ЛН – галогенная лампа накаливания; З – зеркало; ПЗ – параболическое зеркало; О – образец; Л1 и Л2 – фокусирующие кварцевые линзы; Ф1 и Ф2 – цветные оптические светофильтры; МДР-23 – монохроматор; ШД – шаговый двигатель; Упр. ШД – устройство управления ШД; УВХ – устройство выборки хранения; У1 – предусилитель сигнала с ФЭУ; У2 – масштабный усилитель сигнала; Г5-54 и Г5-63 – импульсные генераторы, БОРДО 220 – цифровой осциллографический блок.

где C_0 – концентрация комплексов европия, возбужденных одним импульсом;

$$[Eu_1^*] = \frac{C_0 K_2}{K_5 - K_2} (\exp(-K_2 t) - \exp(-K_5 t)) + K_2 K_3 C B_0 \left[\frac{1}{K_2 - K_1} \left(\frac{\exp(-K_1 t) - \exp(-K_5 t)}{K_5 - K_1} - \frac{\exp(-K_2 t) - \exp(-K_5 t)}{K_5 - K_2} \right) - \frac{1}{K_2 - K_6} \left(\frac{\exp(-K_6 t) - \exp(-K_5 t)}{K_5 - K_6} - \frac{\exp(-K_2 t) - \exp(-K_5 t)}{K_5 - K_2} \right) \right].$$

Нами была произведена оценка коэффициента пространственной диффузии энергии D , концентрации центров стока n и среднего расстояния между этими центрами r_0 при времени затухания люминесценции в пленке концентрированного комплекса 410 мкс. Они составляют: $D = 10^{-4}$ см²/с, $n = 5 \cdot 10^{13}$ и $r_0 = 2000$ Å, соответственно. Детальный анализ кинетических кривых еще предстоит сделать.

Заключение

Создана установка, позволяющая регистрировать спектры времяразрешенной люминесценции и кинетику люминесценции в пленках и растворах как при комнатной температуре, так и при температуре жидкого азота (77 К). Обнаружен более чем семикратный рост интенсивности люминесценции в композите ПВК:Eu(DK)₃Вру по сравнению с чистым комплексом. Время затухания люминесценции в композите увеличено по сравнению с концентрированным комплексом. Произведена оценка коэффициента пространственной диффузии, числа мест стока энергии возбуждения и среднего расстояния между этими центрами в концентрированном комплексе. Рост интенсивности и времени затухания люминесценции Eu в композите объясняется структурными особенностями комплекса, определяющими передачу энергии между ним и полимером и эффективность концентрационного тушения возбужденных ионов европия.

Литература

1. McGehee M.D., Bergstedt T., Zhang C., Staab A.P., O'Regan M.B., Bazan G.C., Srdanov V.I., Heeger A.J.: Adv. Mater. **11**, no. 16, 1349–1354 (1999)
2. Zhang F.L., Wang Y.S., Yang X.H., Hou Y.B., Xu Z., Xu X.R., Zhang R.H., Huang R.H.: J. Luminescence **87–89**, 1149–1151 (2000)
3. Peng J., Takada N., Minami N.: Thin Solid Films **405**, 224–227 (2002)
4. Kido J., Okamoto Y.: Chem. Rev. **102**, no. 6, 2357–2368 (2002)
5. Золин В.Ф., Коренева Л.Г.: Редкоземельный зонд в химии и биологии. М.: Наука 1983. 335 с.
6. Нефедов А.В.: Интегральные микросхемы и их зарубежные аналоги. Справочник, т. 8. М.: ИП Радио Софт 2000. 512 с.

Радиочастотная деполяризация мюона в системе мюоний + ядерный спин

С. А. Моисеев, В. Г. Никифоров

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Предсказан эффект значительного усиления мюонной деполяризации при наблюдении резонанса в условиях квазипересечения уровней (Avoided Level Crossing (ALC) резонанс) на системе мюоний + ядерный спин в присутствии радиочастотного (РЧ) поля. На основе анализа полученных решений и численных расчётов всесторонне изучены закономерности мюонной деполяризации в РЧ поле. Показаны возможности использования усиления мюонной деполяризации для значительного увеличения чувствительности экспериментов по изучению взаимодействий мюония с соседними ядерными спинами и получения новой спектроскопической информации.

Введение

При имплантации в вещество положительно заряженный мюон (μ^+) часто захватывает электрон, формируя водородоподобный парамагнитный мюоний Mu (μ^+e^-). За процесс формирования Mu , прежде всего, отвечают кулоновские взаимодействия электрона и мюона, не оказывая при этом сильного влияния на начальную поляризацию мюона и электрона. Благодаря этому становится возможным исследовать спиновую динамику мюона в технике вращения мюонного спина (muon spin rotation – μSR техника) и получать информацию о спектроскопических параметрах Mu . Значительный интерес вызывают сверхтонкие взаимодействия Mu с соседними ядрами, изучение которых позволяет получать важную информацию об атомах и химических связях [1–3].

Один из часто применяемых методов изучения спиновых взаимодействий Mu с окружающими атомами ($Mu + Nu$) основан на использовании процессов кроссрелаксации, приводящих к переносу поляризации от мюонных спинов к ядерным посредством сверхтонких взаимодействий с электронными спинами [4]. Перенос поляризации от мюона к ядру идет в условиях квазипересечения уровней энергии общей квантовой системы (Avoided Level Crossing (ALC) резонанс), включающей спины мюона, электрона и ядер, что достигается дополнительной подстройкой величины статического магнитного поля H_z . В силу достаточно малого времени жизни мюона, успешное наблюдение ALC резонанса возможно лишь при быстрой деполяризации мюона, что происходит при больших сверхтонких взаимодействиях, ответственных за перенос поляризации. Несмотря на значительный прогресс μSR техники ALC резонанса, получить информацию в таком же объёме, как это достигается в спектроскопических экспериментах с использованием стационарных и особенно импульсных методов магнитного резонанса (см., например, [4]), не представляется возможным. Для получения в ALC экспериментах спектроскопической информации о системе мюоний + ядерные спины в настоящей работе предлагается исполь-

зовать дополнительное воздействие радиочастотного (РЧ) излучения на параметры сигнала.

Целью настоящего исследования является выяснение закономерностей спиновой динамики мюония в РЧ поле, открывающих возможности усиления мюонной деполяризации, что с практической точки зрения важно для увеличения амплитуды наблюдаемого сигнала в эксперименте. Проведенный теоретический анализ показал, что применение РЧ поля может значительно увеличить амплитуду сигнала, были найдены благоприятные условия для наблюдения данного эффекта, благодаря которому открываются возможности наблюдения ALC спектров в веществах со слабыми сверхтонкими взаимодействиями, изучение которых при использовании традиционной техники ALC эксперимента может оказаться крайне затруднительным или практически невозможным. Наблюдение сигнала в РЧ поле также позволит получать дополнительную информацию о спектроскопических параметрах мюония и взаимодействующих с ним ядерных спинах.

Физическая модель

Изучение влияния РЧ поля на сигнал ALC резонанса основывается на часто используемой базовой модели взаимодействия мюония с одним ядерным спином $1/2$ ($Mu + Nu(S)$). Гамильтониан выбранной модели запишем в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(t), \quad (1)$$

где $\mathcal{H}_0$ – энергия системы мюоний + спин ядра:

$$\mathcal{H}_0 = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}_{\mu e} \cdot \boldsymbol{\tau} - \hbar \omega_{\mu} \sigma_z + \hbar \omega_e \tau_z - \hbar \omega_n S_z + \hbar \mathbf{S} \cdot \mathbf{A}_{ne} \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

$V(t)$ – энергия взаимодействия трех спинов с магнитным H_1 полем РЧ излучения:

$$V(t) = -\hbar \gamma_{\Sigma} S^{\Sigma} H_1 \cos(\omega t), \quad (3)$$

$$\gamma_{\Sigma} S^{\Sigma} \equiv \gamma_{\mu} \sigma_x + \gamma_n S_x - \gamma_e \tau_x.$$

$|1\rangle_j$. Ниже мы будем пренебрегать столкновениями атомов в газе, рассматривая достаточно короткие времена эволюции атомов. Примем, что в атоме существуют два разрешенных дипольных перехода: $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, где уровень $|2\rangle$ является метастабильным и близок по энергии к основному уровню $|1\rangle$. В изучаемой технике квантовой памяти после поглощения фотона на среду подаются один за другим два лазерных импульса. Первый импульс, действуя спустя время t_1 после влета фотона, переводит созданное фотоном возбуждение с уровня $|3\rangle$ на уровень $|2\rangle$, где оно хранится до действия вто-

рого лазерного импульса. Второй считывающий импульс, действуя с задержкой $t_2 > t_1$, возвращает возбуждение на уровень $|3\rangle$, изменяя фазы возбужденных состояний атомов таким образом, что последующая эволюция среды сопровождается восстановлением макроскопической атомной когерентности и появлением сигнала эха, с высокой вероятностью восстанавливающего поглощенный фотон в свободное состояние.

Состояние атомов газа и квантового поля будет определяться из решения следующей системы уравнений [8, 9]:

$$\frac{\partial f(k, t)}{\partial t} = -i\omega_k f(k, t) - i \sum_{j=1}^N g_j(k) b_j(t) \exp(-ikr_j(t)), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_j(t)}{\partial t} = & -i\omega_{31} b_j(t) - i \int dk f(k, t) \exp(ikr_j(t)) + \frac{i}{2} \xi_j(t) \left\{ \Omega_1 \frac{t - t_1 - n_1 r_j(t)/c}{T_1} \exp[-i(\omega_1 t - k_1 r_j(t)) + i\varphi_1] \right. \\ & \left. + \Omega_2 \frac{t - t_2 - n_2 r_j(t)/c}{T_2} \exp[-i(\omega_2 t - k_2 r_j(t)) + i\varphi_2] \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_j(t)}{\partial t} = & -i\Delta \xi_j(t) + \frac{i}{2} b_j(t) \left\{ \Omega_1 \frac{t - t_1 - n_1 r_j(t)/c}{T_1} \exp[i(\omega_1 t - k_1 r_j(t)) - i\varphi_1] \right. \\ & \left. + \Omega_2 \frac{t - t_2 - n_2 r_j(t)/c}{T_2} \exp[i(\omega_2 t - k_2 r_j(t)) - i\varphi_2] \right\}, \end{aligned} \quad (3)$$

где функция $f(k, t)$ описывает состояние однофотонного поля, величины $b_j(t)$ и $\xi_j(t)$ – амплитуды вероятности обнаружения j -го атома на уровне $|2\rangle$ и $|3\rangle$, соответственно, $\Omega_m(t) = dE_m(t)/\hbar$, T_m , $E_m(t)$, ω_m , φ_m – частота Раби, длительность и амплитуда электрического поля, несущая частота и начальная фаза m -го лазерного импульса ($m = 1, 2$), $|k_m| = \omega_m/c$, $n_m = k_m/|k_m|$, $d = d_{32} = d_{23}$ – дипольные моменты перехода $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, g – константа взаимодействия световых мод квантового поля с атомом на переходе $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, c – скорость света.

Отметим, что при соответствующем выборе параметров лазерных полей данные уравнения описывают процессы квантовой памяти как в технике фотонного эха, так и в технике ЭИП, отличающиеся формально

лишь параметрами интенсивных лазерных импульсов, несмотря на сильно отличающуюся физику взаимодействия излучения и атомов. Нахождение решения данной системы уравнений в общем случае затруднительно, поэтому будем решать её поэтапно, соответственно различным стадиям эволюции среды и поля, естественным образом возникающих в технике фотонного эха, благодаря наличию процессов дефазировки и фазировки атомных диполей.

В результате проведения вычислений находим следующее выражение для функции восстанавливаемого однофотонного поля $F_e(t, r)$, излучаемого в обратном направлении, связанной с спектральной функцией фотона $f_{-k}(t)$:

$$\begin{aligned} \int dk f_{-k}(t) \exp(-ikr) = & 4\pi^2 F_e(t, r) \exp(-ik_0(ct + z)), \\ F_e(t, r_\perp, z = 0) = & \frac{1}{4\pi^2} \frac{\Delta_n}{1 - i\omega_{21}/\alpha c} \times 2a \sqrt{\frac{\pi}{c\delta\omega_{ph}}} \exp(i\omega_{32}(t_2 - t_1) + \varphi_{se}) \sin(\theta_2/2) \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv_z}{v_n} \tilde{F}_0(z = 0, k_0 v_z) \exp\left(i\omega_{31} \frac{v_z}{c} (t - t_{echo})\right) \\ & \times \left\{ \eta(-v_z) \frac{\exp(\alpha v_z t)}{a^2 + t^2 v_n^2 + i(\alpha^{-1} - v_z t)/k_0} \exp\left(-\frac{r_\perp^2}{2[a^2 + t^2 v_n^2 + i(\alpha^{-1} - v_z t)/k_0]}\right) \right. \\ & \left. + \eta(v_z) \frac{\exp(-\alpha v_z t)}{a^2 + t^2 v_n^2 + i(\alpha^{-1} + v_z t)/k_0} \exp\left(-\frac{r_\perp^2}{2[a^2 + t^2 v_n^2 + i(\alpha^{-1} + v_z t)/k_0]}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

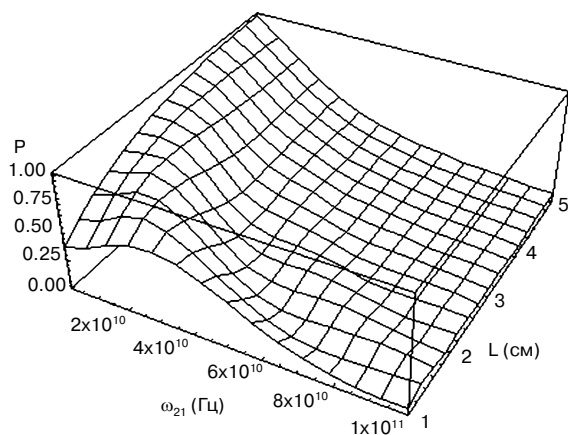


Рис. 1. Полная вероятность восстановления однофотонного поля как функция частоты ω_{21} и размеров среды L при следующих фиксированных параметрах: $\Delta_n = 10^9 \text{ с}^{-1}$, $\delta\omega_{ph} = 2 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$, $\alpha = 1 \text{ см}^{-1}$.

рис. 1 показана полная вероятность восстановления фотона как функция длины среды L и частоты ω_{21} . Видно, что вероятность близка к единице при $\alpha L \geq 3$. Отметим, что расщепление между двумя нижними уровнями атомов ω_{21} должно превосходить спектральную ширину фотона $\delta\omega_{ph}$ и величину неоднородного уширения Δ_n резонансного перехода $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$. Это позволяет осуществить спектральную селекцию слабых квантовых полей от вспомогательных лазерных импульсов большей интенсивности.

В заключение отметим, что полученные результаты позволили определить основные закономерности влияния дифракции света и пространственного движения атомов на параметры восстановленного излучения, которые проявляются в ослаблении излучаемого поля, уширении и искажении его поперечного профиля. Проведенный анализ показал, что путем выбора доступных пара-

метров светового поля можно контролировать влияние изученных факторов и добиваться достаточно высокого качества восстановления светового поля. Существенным преимуществом данной техники следует считать возможность записи и восстановления коротких импульсов света с длительностью в несколько десятков наносекунд, что имеет важное значение для практического использования. Развиваемый нами подход может быть использован в реализации квантовой памяти для Ξ -конфигурации атомных переходов [11]. Большой интерес представляло бы применение данной техники для изучения электрон-колебательной динамики молекул на основном и возбужденных электронных термах [12]. Отметим, что использование пучков света с малым поперечным радиусом может дать информацию о пространственном перемещении молекул в разряженных газах.

Литература

1. Lukin M.D., Yelin S.F., Fleischhauer M.: Phys. Rev. Lett. **84**, 4232–4235 (2000)
2. Phillips D.F., Fleischhauer M., Mair A., Walsworth R.L., Lukin M.D.: Phys. Rev. Lett. **86**, 783–786 (2001)
3. Liu C., Dutton Z., Behroozi C.H., Hau L.V.: Nature **409**, 490–493 (2001)
4. Turukhin A.V., Sudarshanam V.S., Shahriar M.S., Musser J.A., Ham B.S., Hemmer P.P.: Phys. Rev. Lett. **88**, 123602 (2002)
5. Abell J.D., Kurnit N.A., Hartmann S.R.: Phys. Rev. Lett. **19**, 567 (1964)
6. Moiseev S.A., Kröll S.: Phys. Rev. Lett. **87**, 173601 (2001)
7. Moiseev S.A., Tarasov V.F., Ham B.S.: J. Opt. B: Quant. and Semiclass. Opt. **5**, S497–S502 (2003)
8. Moiseev S.A., Noskov M.I.: Laser Phys. Lett. **1** (2004) in press; e-print: quant-ph/0210158.
9. Моисеев С.А., Носков М.И.: Опт. и спектр. **96** (2004) в печати.
10. Rostovtsev Y., Saryianni Z., Scully M.O.: Laser Physics **12**, 1148–1154 (2002)
11. Моисеев С.А.: Опт. и спектр. **94**, 847–852 (2003)
12. Моисеев С.А., Носков М.И.: Опт. и спектр. **96** (2004) в печати.

Двухчастотное облучение в ЯКР. Новые приложения

Д. Я. Осокин, Р. Р. Хуснутдинов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Предложена простая и эффективная методика расчета переходных сигналов в трехуровневой спиновой системе при двухчастотном облучении. Рассмотрены особенности двухчастотного ядерного квадрупольного резонанса в различных приложениях.

Впервые детальное исследование переходных сигналов в ЯКР при двухчастотном облучении на двух разных переходах было выполнено в конце шестидесятых – начале семидесятых годов XX века В. С. Гречишкиным с сотрудниками [1, 2]. Однако, как утверждают сами авторы, этот метод не нашел широкого применения [2]. Единственным его применением оказалось соотнесение линий сложных спектров ЯКР на разных переходах.

В последние годы этот метод снова привлёк внимание экспериментаторов [3, 4]. Предполагается, что с использованием двухчастотного облучения можно повысить чувствительность аппаратуры ЯКР при дистанционном обнаружении взрывчатых веществ и наркотиков. Как известно, одновременное облучение квадрупольной спиновой системы на двух переходах приводит к формированию сигнала эха на третьем (необлучаемом) переходе [5]. В этом случае уменьшаются время парализации приемного устройства и мешающий пьезоэлектрический “звон” (многие наркотики проявляют пьезо- или сегнетоэлектрические свойства) на этом переходе, что может привести к повышению чувствительности аппаратуры [3, 4]. Однако время парализации приемного устройства даже без принятия специальных мер по его подавлению составляет около 200 мкс (ЯКР ^{14}N , в диапазоне частот 1–10 МГц), в то время как длительность переходных сигналов T_2^* (обратная ширина линии ЯКР) порядка 1 мс, а время жизни сигналов эха T_2 в ЯКР ^{14}N лежит в пределах 10–20 мс, благодаря замораживанию взаимодействия целых спинов с постоянным магнитным полем [6, 7] (следствие теоремы Крамерса).

Пьезоэлектрический звон действительно препятствует измерению параметров спектров ЯКР и их релаксационных характеристик, т.к. его интенсивность на несколько порядков превышает интенсивность сигналов ЯКР. Однако при дистанционном обнаружении наркотиков очень часто регистрация сигналов ЯКР может быть заменена регистрацией сигналов пьезоэлектрического звона, и поэтому нет необходимости в его подавлении. В частности, эта методика вполне применима для обнаружения наркотиков в желудке наркокурьеров.

В тех же случаях, когда взрывчатые вещества или наркотики не изолированы от окружающей среды, наиболее эффективной методикой для их обнаружения яв-

ляется микроволновая спектроскопия, т.к. для регистрации микроволновых спектров и спектров их квадрупольного расщепления достаточно нескольких молекул [8].

Другое, более интересное приложение двухчастотная ЯКР спектроскопия может найти в новом научном направлении – разработке и исследовании моделей квантовых компьютеров. Это направление интенсивно развивалось в последние десятилетия, причем заметное место в этих исследованиях занимает спектроскопия ЯМР. Возможность использования для этих целей квадрупольных (многоуровневых) спиновых систем обсуждалась в работах [9, 10], однако двухчастотное облучение в них не затрагивалось.

Нами проведены расчеты переходных сигналов ЯКР, возникающих при одновременной подаче радиочастотных импульсов на два перехода в трехуровневой спиновой системе ($I = 1$) [11]. Наиболее просто эта задача решается при переходе в пространство Лиувилля (использование супероператоров Лиувилля) [12]. Применение этой методики для решения подобной задачи (двухчастотное облучение в спиновой системе с нулевым параметром асимметрии) предложено в [5]. Как ее дальнейшее развитие, в [11] рассчитаны матрицы супероператоров гамильтонианов взаимодействия спиновой системы с радиочастотным полем и гамильтонианов неоднородного уширения для всех переходов. С их помощью получены выражения для сигналов эха на всех переходах при одновременном и последовательном приложении радиочастотных импульсов (таблицы 1 и 2). В первом столбце этих таблиц помещены операторы, представляющие поперечные намагниченности на каждом из трех переходов, созданные первым (подготовительным) импульсом (или импульсами). Второй, третий и четвертый столбцы представляют результаты их эволюции под воздействием неоднородного уширения на том же переходе, преобразования двумя последовательными или одновременными импульсами на переходах pq и qr , приложенными в момент времени t после первого импульса, и дальнейшей эволюции под воздействием неоднородного уширения (время t отсчитывается после приложения двухчастотного импульса) на соответствующих переходах. Матрица плотности ρ_t , представляю-

Недиагональные элементы этих матриц описывают переходные процессы, соответствующие переносу когерентности:

$$\begin{aligned}\cos(\Delta\omega_{pq}t \pm \Delta\omega_{qr}\tau) &= \cos\Delta\omega_{pq}\left(t \pm (\Delta\omega_{qr}/\Delta\omega_{pq})\tau\right) \\ &\sim \cos\Delta\omega_{pq}(t \pm \tau)\cos\Delta\omega_{rp}\tau,\end{aligned}$$

где $\Delta\omega_{ij}$ – неоднородное уширение перехода ij . В этом случае расхождение изохромат спектра происходит на одной частоте, а схождение – на другой. В результате сигналы, подобные сигналам эха, могут быть сформированы только при условии, что расстройки на разных переходах коррелируют, т.е. $\Delta\omega_{qr}/\Delta\omega_{pq} = \text{const}$ для всех спинов. Эти сигналы можно рассматривать, как сигналы эха на фоне сигнала свободной прецессии на третьем переходе, т.е. как сигналы эха, затухающие за время $T_{2\text{гр}}^*$, а не T_2 . Временной интервал, соответствующий максимуму сигнала эха, сдвинут на величину $(1 \pm \Delta\omega_{qr}/\Delta\omega_{pq})\tau$, т.е. в зависимости от того больше или меньше нуля отношение $\Delta\omega_{qr}/\Delta\omega_{pq}$, сигнал эха может появляться раньше или позже интервала τ .

След тензора градиента электрического поля (ГЭП) равен нулю. Соответственно, величины неоднородного уширения на трех переходах определяются двумя независимыми величинами (например, разбросом величин константы квадрупольного взаимодействия и параметра асимметрии тензора ГЭП). Корреляция расстроек на разных переходах может возникнуть только в том случае, если они вызваны разбросом величины ГЭП в одном направлении главных осей тензора ГЭП. Этот факт может быть использован для исследования неоднородности (несовершенства) кристаллической решетки. Для этих целей наиболее подходит экспериментальное исследование трехимпульсного эха, что соответствует классической схеме двумерной спектроскопии (рис. 1).

Первый импульс $\pi/2$ создает на переходе pq поперечную намагниченность, которая затем расфокусируется под воздействием неоднородного уширения $\Delta\omega_{pq}$ этого перехода. Второй импульс π , приложенный на переходе qr , переносит когерентность на третий переход rp , где она развивается под воздействием неоднородного уширения $\Delta\omega_{rp}$. Третий импульс π , приложенный снова на переходе pq , переносит когерентность на переход qr . Та-

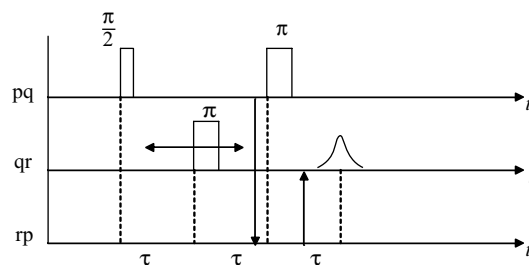


Рис. 1. Схема трехимпульсного эха.

ким образом, сигнал на этом переходе будет пропорционален $\cos(\Delta\omega_{pq} + \Delta\omega_{qr} + \Delta\omega_{rp})\tau = 1$, т.к. сумма относительных расстроек на трех переходах равна нулю по определению. Изменяя положение второго импульса можно получить двумерное изображение сигналов эха, которое должно определяться коэффициентом корреляции двух параметров тензора неоднородного уширения.

Экспериментальные работы в этом направлении и их интерпретацию планируется провести в следующем году.

Литература

1. Гречишкин В.С.: Ядерные квадрупольные взаимодействия в твердых телах. М.: Наука 1973. 263 с.
2. Анферов В.П., Гречишкин В.С., Синявский Н.Я.: Ядерный спиновый резонанс. Новые методы. Л.: Изд-во ЛГУ 1990. 159 с.
3. Mozjoukhine G.V.: Appl. Magn. Reson. **22**, 31 (2002)
4. Sauer K.L., Suits B.H., Garroway A.N., Miller Z.B.: Chem. Phys. Lett. **342**, 362–368 (2001)
5. Осокин Д.Я., Курбанов Р.Х., Ермаков В.Л., Шагало В.А.: ЖЭТФ **106**, № 2(8), 596 (1994)
6. Lepellmaier I.W., Hahn E.L.: Phys. Rev. **141**, 724 (1996)
7. Сафин И.А., Осокин Д.Я.: Ядерный квадрупольный резонанс в соединениях азота. М.: Наука 1977. 253 с.
8. Таунс Ч., Шавлов А.Л.: Радиоспектроскопия. М.: Изд-во иностр. лит. 1959. 640 с.
9. Кессель А.Р., Ермаков В.Л.: ЖЭТФ **117**, № 3, 517 (2000)
10. Зарецкий Д.Ф., Сазонов С.Б.: ЖЭТФ **121**, № 2, 521 (2000)
11. Osokin D.Ya., Husnutdinov R.R.: Appl. Magn. Reson. **24**, 145 (2003)
12. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А.: ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир 1990. 709 с.
13. Sancture B.C., Halstead T.K., Osmont P.A.: Mol. Phys. **47**, 753 (1983)
14. Сликтер Ч.: Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир 1981. 448 с.

3. Алемасов В.Е., Апросин Д.В., Бренерман М.Х., Кессель А.Р., Кравцов Я.И.: Журн. физ. химии **72**, № 3, 569–573 (1998)
4. Алемасов В.Е., Апросин Д.В., Бренерман М.Х., Кессель А.Р., Кравцов Я.И.: Изв. Акад. наук. Энергетика № 4, 65–77 (1998)
5. Glouber R.: J. Math. Phys. **4**, 469 (1963)
6. Kessel A.R., Berim G.O.: The VI UNITAR Int. Conf. on Heavy Crude and Tav Sands, p. 147. Houston, Texas 1995.
7. Берим Г.О., Кессель А.Р.: Изв. Акад. наук. Энергетика № 4, 52–64 (1998)

Дискретная модель акустического воздействия на фильтрацию в анизотропном пласте

М. Х. Бренерман

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Построена дискретная модель фильтрации в поперечном акустическом поле в случайно неоднородном анизотропном нефтяном пласте, учитывающая неоднородности структуры пласта на микроуровне. Показано, что изменение микрогеометрической структуры пласта при распространении в нем акустических волн может вносить существенный вклад в эффект увеличения фильтрационного потока.

Введение

Около половины запасов углеводородного сырья Республики Татарстан изначально являются трудноизвлекаемыми в силу своих физических и геофизических свойств. Кроме того, из-за изменения реологических свойств и обводненности, в категорию трудноизвлекаемых с течением времени переходят длительно разрабатываемые запасы. Поэтому проблема разработки трудноизвлекаемых запасов углеводородного сырья становится все более актуальной.

В целях поиска новых технологий извлечения высоковязких нефтей и природных битумов Отделом энергетики КазНЦ РАН с 1998 г. по настоящее время проводится эксперимент по термоакустическому воздействию на пласт на Мордово-Кармальском месторождении природных битумов. Результаты эксперимента свидетельствуют о существенном (в ряде случаев трехкратном) увеличении фильтрационного потока при воздействии на пласт звуком частотой 1–3 кГц (рис. 1). Полный анализ результатов приведен в работе [1].

Такие эксперименты имеют весьма высокую стоимость. Для их оптимального планирования необходимо выяснение физической картины процессов фильтрации в условиях действия внешних силовых, акустических и

тепловых полей и построения соответствующих математических моделей.

Существование нескольких конкурирующих механизмов изменения свойств пласта при внешнем акустическом воздействии препятствует построению полной теории влияния звукового поля на фильтрационные потоки. Поэтому в настоящее время актуальны задачи анализа различных механизмов в отдельности и оценки их вклада в эффект увеличения фильтрационных потоков. В работе [2] проанализирован механизм, связанный с упругим изменением микрогеометрической структуры трещиноватого скелета в акустическом поле плоской волны. Скелет предполагался однородным вплоть до масштаба, равного средней ширине трещин.

Ниже, в продолжение работы [2], строится модель акустического воздействия на пористый пласт, случайно-неоднородный на масштабах, равных среднему диаметру капилляров.

Течение флюида в пульсирующей трубке

Предварительно покажем, что имеет место следующий эффект. Рассмотрим течение жидкости в бесконечной трубке с постоянным градиентом внешнего давления вдоль оси трубки. Если стенка трубки пульсирует по закону

$$R = R_0 (1 + \alpha \sin \omega t), \quad \alpha < 1,$$

(R_0 – радиус трубки в состоянии покоя, α – относительная амплитуда), то поток через пульсирующую трубку больше, чем через трубку постоянной ширины.

Для стационарного режима течения при наличии постоянного градиента давления вдоль оси X эпюра скоростей дается известной формулой [3, с. 83]:

$$v(r) = -\frac{1}{4\eta} \frac{dp}{dx} (R^2 - r^2),$$

где R – радиус трубки, r – радиальная координата, η – вязкость.

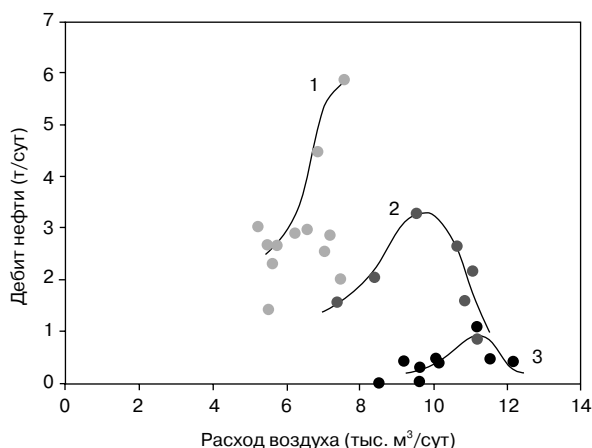


Рис. 1. Зависимость дебита скважин от режимов воздействия. 1 – частота звука 2 кГц, 2 – 1 кГц, 3 – тепловое воздействие.

Поперечное сечение реального “образца” L много больше длины волны λ , поэтому расход через образец единичной толщины по оси Z равен:

$$Q_L = \frac{1}{8\eta} \frac{dp}{dx} L n \left(1 + 13.5 \frac{\pi^2 \nu^2 a^2}{c^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} R_0^4 \varphi(R_0) dR_0,$$

откуда следует, что относительное увеличение расхода в фильтрационном потоке в условиях внешнего периодического воздействия равно

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{6.75\alpha^2}{2} = \frac{6.75}{2} \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 = \frac{6.75}{2} \left(\frac{\varepsilon L \omega}{c} \right)^2 \\ &= 13.5\pi^2 \left(\frac{\sigma L \nu}{Ec} \right)^2. \end{aligned}$$

При значениях звукового давления $\sigma = 10^6$ Па, модуля упругости скелета $E = 10^7$ Па, скорости звука $c = 10^3$ м/с, частоты $\nu = 10$ кГц, значение δ может достигать 0.8, что качественно согласуется с результатами описанных в [1] экспериментов.

Работа выполнена совместно с академиком РАН В. Е. Алемасовым и д.ф.-м.н. Я. И. Кравцовым (ОЭ КазНЦ РАН).

Литература

1. Муслимов Р.Х., Хавкин А.Я., Алемасов В.Е. и др.: Бурение и нефть № 1, 18–22 (2003)
2. Бренерман М.Х.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского 2002. Ежегодник, с. 108–110. Казань: ФизтехПресс 2003.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.: Гидродинамика. М.: Наука 1988. 736 с.
4. Николаевский В.Н.: Механика пористых и трещиноватых сред. М.: Недра 1984. 503 с.

Изучение *in situ* перемагничивания микроструктур во внешнем магнитном поле до 2000 Э с помощью магнитного силового микроскопа

А. А. Бухараев, Д. А. Бизяев, П. А. Бородин, Д. В. Овчинников

Отдел химической физики, лаборатория физики и химии поверхности

Эта работа посвящена исследованию перемагничивания магнитных микроструктур непосредственно в магнитном силовом микроскопе (МСМ), когда внешнее поле на образце создается с помощью электромагнита, установленного в микроскоп. Используя специальные образцы, содержащие ферромагнитные микрочастицы кобальта, было показано, что перемагничивание иглы микроскопа в высоких магнитных полях во многих случаях является причиной изменения МСМ-изображения планарных магнитных микроструктур. Компьютерное моделирование соответствующих МСМ-изображений подтвердило этот вывод. Полученные данные о магнитных свойствах игл и компьютерное моделирование дает возможность более корректно интерпретировать МСМ-изображение в высоких магнитных полях.

Введение

Магнитный силовой микроскоп (МСМ) широко используется для изучения структуры намагниченности планарных магнитных микро- и нанообъектов [1]. Особое внимание этой проблеме уделяется в связи с использованием подобных структур для сверхплотной записи информации в современных компьютерах. К наиболее актуальным задачам в этой области исследований относятся: 1) создание новых структур для записи информации на основе монокристаллических наночастиц [2]; 2) изучение доменной структуры в моно- и мультидоменных латеральных структурах [3]; 3) восстановление структуры намагниченности объектов по их магнитному силовому изображению [4]; 4) изучение перемагничивания объектов в МСМ, когда магнитное поле на образце создается электромагнитом, установленным непосредственно в микроскоп [5].

Эта работа посвящена четвертой из перечисленных проблем. Новые экспериментальные возможности нашего МСМ позволили изучать перемагничивание различных микроструктур *in situ* во внешнем поле величиной до 2000 Э. Особое внимание было уделено размагничиванию компьютерного диска долговременной памяти с

целью оценки его помехоустойчивости к воздействию внешних электромагнитных полей.

Другой целью данной работы является изучение изменений в МСМ-изображениях, вызванных перемагничиванием кончика магнитной иглы микрозонда МСМ. Обычно магнитная игла намагничивается вдоль своей оси перпендикулярно поверхности образца, чтобы получить максимальный контраст МСМ-изображения. Очевидно, что в достаточно высоких магнитных полях, направленных вдоль поверхности образца, возможно перемагничивание иглы так, что ее суммарный магнитный момент будет направлен параллельно поверхности образца. В этом случае видимые изменения в МСМ-изображениях, наблюдаемые при увеличении внешнего поля, могут быть обусловлены перемагничиванием магнитно-мягкой иглы, а не перемагничиванием изучаемого образца.

Модернизация сканирующего зондового микроскопа и приготовление тестовых образцов

В отличие от наших предыдущих исследований [5], в этой работе мы использовали сканер SMENA, создан-

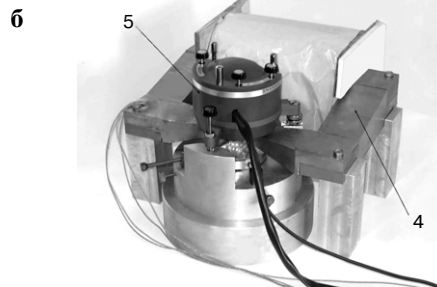
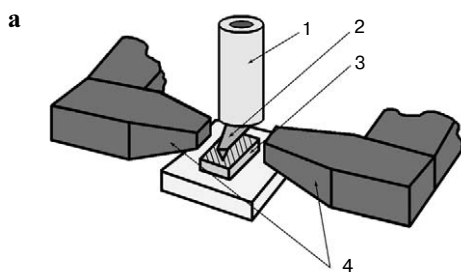


Рис. 1. а Схема совмещения сканера SMENA с электромагнитом: 1 – пьезотрубка (пьезодвигатель сканера), 2 – магнитный микрозонд (кантилевер), 3 – образец, 4 – полюса электромагнита. **б** Фотография магнитного силового микроскопа, совмещенного с электромагнитом: 4 – электромагнит, 5 – сканер SMENA.

Литература

1. Porthun S., Abelman L., Lodder C.: J. MMM **182**, 238–273 (1998)
2. Chou S.: Data Storage no. 9/10, 35–40 (1995)
3. Shrefl T., Fidler J., Kirk K., Chapman J.: J. Appl. Phys. **85**, 6169–6171 (1999)
4. Ovchinnikov D., Bukharaev A., Borodin P.: Phys. Low-Dim. Struct. no. 5/6, 1–6 (2002)
5. Ovchinnikov D., Bukharaev A., Borodin P., Biziaev D.: Phys. Low-Dim. Struct. no. 3/4, 103–108 (2001)

Влияние имплантации ионов бора на оптические и электрофизические свойства графеновых наноструктур

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

Лаборатория радиационной физики

Проведены исследования оптических свойств и низкотемпературной проводимости алмазоподобных пленок углерода, имплантированных ионами бора в широком интервале доз имплантации. Получены зависимости оптической щели Тауца E_{gt} и параметра прыжковой проводимости $T_0^{1/4}$ от дозы имплантации. Установлено, что основным процессом, определяющим существенные изменения электронных свойств углеродных пленок в области средних доз имплантации, является увеличение размеров графитоподобных нанокластеров. При этом влияние типа имплантированной примеси на оптические свойства и низкотемпературную проводимость углеродных пленок не обнаружено. Установлено, что в области больших доз имплантации наблюдаются специфические изменения параметров зависимости Тауца, обусловленные синтезом вторичной фазы в углеродной матрице и формированием нанокомпозитной пленки. Показано, что при синтезе углеродсодержащей фазы – карбида бора – происходит уменьшение размеров графитоподобных нанокластеров и, соответственно, увеличение оптической щели E_{gt} . Обнаружено, что оптическая щель синтезируемой фазы уменьшается с ростом дозы имплантации, приближаясь к табличному значению для карбида бора 1.64 эВ, что может быть объяснено в рамках квантово-размерного эффекта.

Введение

К числу наиболее актуальных фундаментальных и прикладных проблем в области физики наноструктур относятся разработка методов получения наноструктурированных материалов, методов контролируемого управления их свойствами, а также установление взаимосвязи между структурными параметрами и физическими свойствами этих материалов.

Ранее нами были проведены исследования влияния имплантации ионов углерода, азота и ксенона на концентрацию и средний размер графеновых наночастиц в алмазоподобных пленках углерода (DLC пленки). Было установлено, что доминирующим процессом при имплантации ионов углерода является увеличение размеров графеновых наночастиц. При имплантации ионов азота изменение электронных свойств DLC пленок имело более сложный характер, что было связано с синтезом углеродсодержащей фазы – газообразного циана, что вызывало уменьшение среднего размера наночастиц. Кроме того, часть имплантированного азота в форме молекулярного азота адсорбировалась на поверхности графеновых наночастиц и существенно влияла на их электронные свойства.

В данной работе мы исследовали изменения структурных параметров и электронных свойств DLC пленок при имплантации ионов бора. Бор является акцепторной примесью в полупроводниках со структурой типа алмаза. Кроме того, бор – карбидообразующий элемент. Легирующее влияние примеси проявляется в области концентраций, ниже предела растворимости примеси. При превышении этого предела происходит образование вторичных фаз. Представляет интерес установить допирующую

щее влияние бора на электронные свойства углеродных пленок, а также исследовать изменение этих свойств в области ионного синтеза, когда формируется композитный слой.

Техника экспериментов и методики

Приготовление образцов

Алмазоподобные пленки углерода толщиной 60–100 нм были синтезированы разработанным нами методом ионно-лучевого распыления графита с одновременным ионным стимулированием растущей пленки [1]. Для этого использовалась специально созданная нами установка [2]. Пленки наносились на подложку из стекла.

Ионная имплантация

Имплантация проводилась на ускорителе ИЛУ-3 ионами бора с энергией 20 и 40 кэВ дозами в интервале $3 \cdot 10^{14}$ – $3 \cdot 10^{17}$ ион/см². Плотность ионного тока не превышала 4 мкА/см².

Методики исследований

Толщина пленок определялась методом эллипсометрии.

Спектры отражения и пропускания DLC пленок снимались на спектрофотометре Hitachi-330. По спектрам отражения и пропускания пленок определялась спектральная зависимость коэффициента поглощения пленок

Исследования магнитных свойств тонких монокристаллических пленок CrO_2 методом ФМР

Б. З. Рамеев, Л. Р. Тагиров

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной физики
и отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Методом ферромагнитного резонанса (ФМР) исследованы магнитные свойства тонких эпитаксиальных пленок CrO_2 различной толщины. Образцы были приготовлены методом химического осаждения из газовой фазы на монокристаллические подложки TiO_2 ориентации (100) в диапазоне толщин 200–1500 и 350–1350 Å с использованием твердого (CrO_3) и жидкого (CrO_2Cl_2) реагентов, соответственно. Измерения ФМР выявили существенные различия в магнитных свойствах двух серий пленок. Было обнаружено сильное влияние упругих растягивающих напряжений, возникающих из-за несовпадения кристаллических решеток пленки и подложки, на параметры анизотропии в тонких пленках серии, приготовленной с использованием твердого реагента. В отличие от CrO_3 -серии, в пленках, синтезированных из жидкого реагента CrO_2Cl_2 , практически не наблюдалось каких-либо изменений анизотропии сигнала ФМР с толщиной эпитаксиальной пленки. Показано, что причиной этого являются разрывы в прилежащем к подложке слое CrO_2 , которые обеспечивают релаксацию напряжений из-за несовпадения решеток пленки и подложки.

Введение

Уникальной особенностью полуметаллических ферромагнетиков является полностью поляризованная по спину зона проводимости. Это свойство делает их идеальными материалами для использования в магнитотуннельных контактах и других устройствах спинтроники. Одним из таких материалов является диоксид хрома, хорошо известный своим применением в виде мелкодисперсного порошка в магнитных лентах для записи информации. Еще в 1986 году в расчетах зонной структуры было теоретически предсказано, что CrO_2 имеет очень высокую спиновую поляризацию зоны проводимости [1–3]. Со всем недавно этот факт был подтвержден в экспериментах по спин-поляризованной фотоэмиссии [4] и Андреевскому отражению в точечных контактах [5–8]. Однако известно, что диоксид хрома является метастабильным соединением в объемной форме и стабилен либо в мелкодисперсном виде, либо в виде тонких пленок, стабилизированных за счет структуры подложки. Эпитаксиальные тонкие пленки CrO_2 были получены совсем недавно [9], что привело к появлению нескольких работ по диоксиду хрома [6–13]. Однако, объем накопленной информации по их электрическим и магнитным свойствам явно недостаточен.

В настоящей работе ставилась задача исследования магнитных свойств (намагниченности, кристаллической и магнитоупругой анизотропии) эпитаксиальных пленок CrO_2 различной толщины методом ферромагнитного резонанса (ФМР), а также сравнения полученных результатов для серий пленок, приготовленных с использованием твердого (CrO_3) и жидкого (CrO_2Cl_2) реагентов.

Приготовление образцов и методика эксперимента

Эпитаксиальные тонкие пленки CrO_2 были приготовлены на подложках TiO_2 структуры рутила с ориентацией (100) методом химического осаждения из газовой фазы в атмосфере кислорода, как описано в [10]. Были приготовлены две серии пленок с использованием двух различных реагентов: твердого (CrO_3) и жидкого (CrO_2Cl_2) в диапазоне толщин 200–1500 и 350–1350 Å, соответственно. Для контроля ориентации образцов использовался рентгеновский дифрактометр Rigaku RINT 2000. Морфология поверхности образцов исследовалась на атомном силовом микроскопе Digital Instruments NanoScope IV. Измерения ФМР были выполнены на спектрометре ЭПР Bruker EMX и с модулями расширения в диапазоне частот 20–26 ГГц (К-зона) и 30–37 ГГц (Q-зона). Использовалась стандартная процедура исследования ФМР в тонких пленках, которая состоит из измерений в двух геометриях вращения внешнего магнитного поля относительно плоскости образца: 1) магнитное поле вращается в плоскости образца (параллельная геометрия), 2) магнитное поле вращается в плоскости, проходящей через легкую ось намагничивания и нормаль к плоскости образца (перпендикулярная геометрия).

Экспериментальные результаты

В перпендикулярной геометрии измерений наблюдается типичная для тонких пленок угловая зависимость сигнала ФМР, в которой преобладает эффект поля раз-

Исследование магнитных свойств нанокompозита частиц никеля во фториде магния

Б. З. Рамеев, А. Л. Степанов, Р. И. Хайбуллин

Лаборатория радиационной физики

Исследованы магнитные и структурные свойства нового композитного материала, представляющего собой нанодисперсную фазу металлического никеля в диамагнитной матрице фторида магния. Для получения композитного материала была использована высоковакуумная установка LUCAS, а его структурные и магнитные свойства изучены методами просвечивающей электронной микроскопии и ферромагнитного резонанса (ФМР). Данные электронной микроскопии показывают формирование сферических частиц никеля с узкой функцией распределения и средним диаметром 3.2 нм. Измерения магнитного резонанса на гранулярных магнитных пленках, приготовленных данным методом, обнаружили интенсивный сигнал ФМР. Наблюдаемая в спектрах ФМР магнитная анизотропия указывает на сильное взаимодействие между наночастицами никеля в композиционном материале.

Введение

Гранулярные магнитные пленки уже давно используются в системах хранения информации, например, в магнитных лентах для видео- и аудиозаписи. Бурное развитие с конца 80-х годов XX века новых методов приготовления тонких и ультратонких пленок, в том числе и композитного состава, вызвало новый всплеск интереса к гранулярным магнетикам. Например, эффект гигантского магнитного сопротивления был открыт практически в одно и то же время как в многослойных металлических пленках, так и в композитных системах, состоящих из наночастиц магнетика (кобальта), диспергированных в проводящей (медной) матрице. Открытие в 1995 году эффекта туннельного магнитосопротивления вновь обратило внимание исследователей на композиты, состоящие из магнитных наночастиц, диспергированных в диэлектрической матрице. Магнитные свойства таких композитов могут варьироваться в широких пределах за счет изменения размера магнитных частиц, функции распределения их по размерам, степени заполнения матрицы, а также фазового состава магнитных включений и окружающей их диамагнитной среды. Таким образом, актуальной является задача по поиску и развитию новых технологий для изготовления композитных материалов с контролируемыми структурными и магнитными параметрами.

В настоящей работе исследованы магнитные и структурные свойства тонкой пленки из наночастиц никеля в диамагнитной матрице фторида магния (MgF_2), синтезированной по оригинальной методике с использованием высоковакуумной установки LUCAS.

Эксперимент

Синтез наночастиц Ni в матрице MgF_2 был реализован при помощи высоковакуумной установки LUCAS, под-

робно описанной в работах [1, 2]. Вакуумная установка, изначально разработанная для формирования кластерных пучков металлов с низкой температурой плавления, таких, например, как серебро [3], была модернизирована и доукомплектована импульсным лазером LUMONICS JK 702H (Nd:YAG) с длиной волны 1.064 мкм для работы с тугоплавкими материалами. Использование мощного лазера позволило формировать атомарный пар никеля путем лазерной абляции химически чистой мишени металлического Ni в атмосфере газа Ar, подаваемого под давлением 0.6 бар в камеру абляции установки. Лазерное облучение металлической мишени никеля проводилось 500 эквивалентными импульсами с энергией ~ 4.7 Дж/см² и длительностью 1 мс при частоте 80 Гц. Генерируемый лазерными импульсами атомарный пар Ni смешивался с молекулами Ar и формируемая таким образом газовая смесь выбрасывалась через узкое сопло диаметром 1.2 мм в камеру осаждения за счет разницы давлений между камерами. Давление в камере осаждения поддерживалось $\sim 10^{-7}$ мбар, что позволило формировать стабильный поток газовой смеси через сопло. Адиабатическое расширение газовой смеси вызывает ее быстрое охлаждение и зарождение в ней наноразмерных кластеров Ni, пучок которых может быть направлен и осажден на любой подложке. В наших экспериментах использовалась кварцевая подложка, предварительно покрытая тонким 50 нм слоем MgF_2 . Осажденные на ней частицы Ni покрывались дополнительным защитным слоем MgF_2 , который наносился методом электронного испарения, что препятствовало последующему окислению наночастиц Ni в атмосфере воздуха.

Для проведения анализа синтезируемого материала на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) Philips EM 400T пучок наночастиц никеля осаждался на тонкую углеродную пленку, нанесенную на медную сеточку. Магнитные свойства композитной системы Ni: MgF_2 исследовались методами магнитной радиоспектроскопии при комнатной температуре. Регистра-

ция спектров ферромагнитного резонанса (ФМР) выполнялась на спектрометре ЭПР Bruker EMX в X-диапазоне частот (9.8 ГГц) при различных ориентациях плоскости образца по отношению к статическому магнитному полю $\mathbf{H}$.

Основные результаты и их обсуждение

На рис. 1а приведена микрофотография наночастиц Ni (темные пятна на светлом фоне), формируемых данным методом на установке LUCAS. Видно, что предложенная методика при заданных режимах позволяет получать и осаждать однородные по размерам и сферические по форме кристаллические наночастицы никеля. Как видно из гистограммы распределения частиц Ni по размерам (рис. 1б), средний диаметр частиц равен 3.2 нм, а функция размерного распределения близка к функции нормального распределения с параметром дисперсии $\sigma = 2.2$ нм. Разброс размеров наночастиц никеля, приготовленных по данной методике, значительно меньше, чем наблюдаемый для других способов синтеза наночастиц, например, золь-гель метода в стекле [4] или химического осаждения из раствора [5].

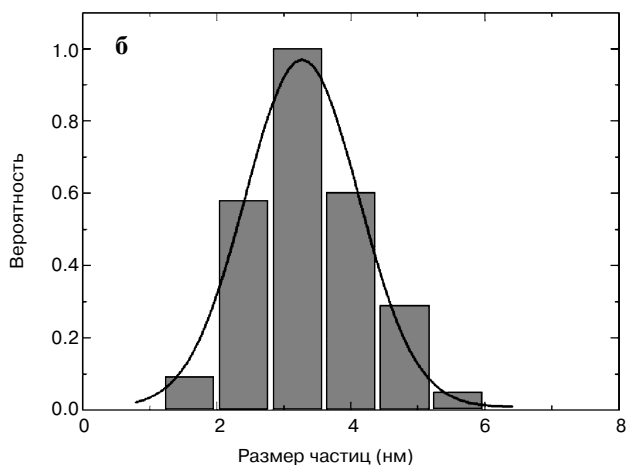
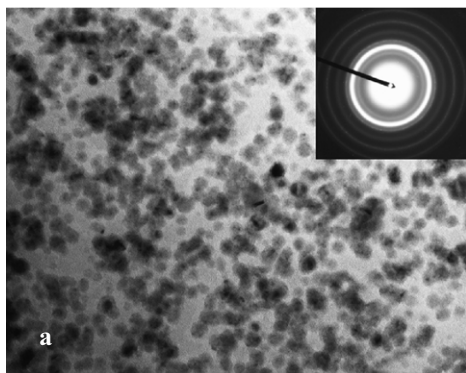


Рис. 1. а Электронная микрофотография и микродифрактограмма (на вставке) наночастиц никеля. б Гистограмма распределения наночастиц по размерам.

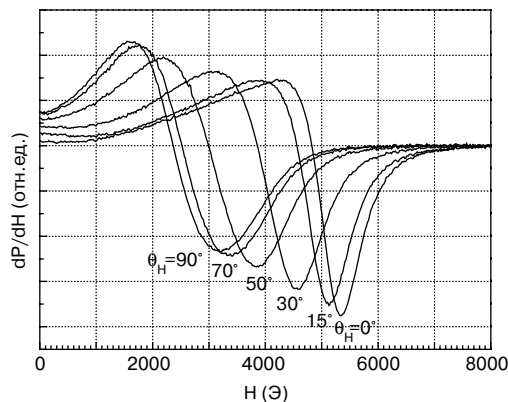


Рис. 2. Спектры ФМР композитной пленки Ni:MgF₂ при различных значениях полярного угла θ_H .

На рис. 2 представлены спектры магнитного резонанса композита Ni:MgF₂, регистрируемые при комнатной температуре для различных значений полярного угла θ_H . Угол θ_H характеризует направление приложенного магнитного поля по отношению к вектору нормали к плоскости образца. Из рисунка видна сильная анизотропия сигнала, которая проявляется как в зависимости резонансного магнитного поля от ориентации образца по отношению ко внешнему магнитному полю, так и в изменении ширины и формы линии сигнала ФМР для различных ориентаций. Как это и ожидалось из геометрии синтеза, какая-либо зависимость параметров регистрируемых сигналов от азимутального угла φ отсутствовала, то есть исследуемая тонкая пленка материала Ni:MgF₂ проявляет только анизотропию формы образца типа “легкая плоскость”.

Наблюдаемые спектры и угловые зависимости параметров сигнала магнитного резонанса (рис. 3) являются характерными для сигнала ФМР в тонких магнитных пленках [6]. Таким образом, наши измерения подтверждают факт формирования магнитных наноча-

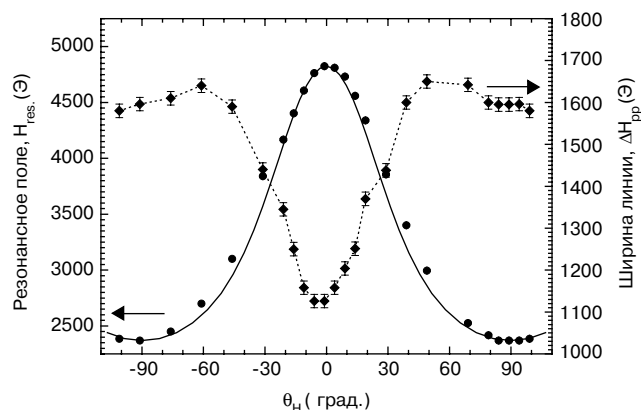


Рис. 3. Угловая зависимость резонансного поля (●) и ширины линии (◆) сигнала ФМР композитной пленки Ni:MgF₂. Сплошная линия является результатом моделирования с использованием уравнения из работы [7] с параметрами $M_{\text{eff}} = 136$ Гс и $g_{\text{eff}} = 2.25$. $T_{\text{экс}} = 300$ К, $\nu_{\text{res}} = 9.81$ ГГц.

Примечательно, что зависимость ширины линии от угла показывает минимум для перпендикулярной ориентации образца во внешнем магнитном поле (рис. 3). Данное наблюдение позволяет предположить типичное для гранулярных пленок образование агломератов удлиненной формы, причем длинная ось таких агломератов ориентирована случайным образом в плоскости образца. Именно в этом случае вклад анизотропии формы отдельных агломератов приводит к локальному разбросу значений внутреннего эффективного магнитного поля в объеме гранулярной пленки, который будет наибольшим при параллельной и наименьшим при перпендикулярной ориентациях образца. Это связано с тем, что в перпендикулярной ориентации ($\theta_H = 0^\circ$) фактор размагничивания для агломератов, удлиненных в плоскости образца (то есть перпендикулярно направлению магнитного поля) примерно одинаков, в то время как в параллельной ориентации ($\theta_H = 90^\circ$) он различен в зависимости от направления длинной оси агломерата относительно внешнего магнитного поля. Очевидно, этим же может быть обусловлено небольшое систематическое отклонение модельной кривой резонансного поля от экспериментальных значений в области промежуточных ориентаций (сплошная линия на рис. 3).

Работа выполнена при государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (грант № НШ 1904.2003.2), программы ОФН “Новые материалы и структуры”. А. Л. Степанов благодарит за финансирование научный фонд им. А. Гумбольдта (Германия).

Литература

1. Stepanov A.L., Bour G., Gartz M., et al.: Vacuum **64**, 9–14 (2001)
2. Stepanov A.L., Gartz M., Bour G., et al.: Vacuum **67**, 223–227 (2002)
3. Hilger A., Tenfelde M., Kreibitz U.: Appl. Phys. B **73**, 361–372 (2001)
4. Fonseca F.C., Goya G.F., Jardim R.F., et al.: Appl. Phys. A **76**, 621–624 (2003)
5. Wu S.H., Chen D.H.: J. Col. Int. Sci. **259**, 282–286 (2003)
6. Kakazei G.N., Kravets A.F., Lesnik N.A., et al.: J. Appl. Phys. **85**, 5654–5656 (1999)
7. Griscom D.L., Krebs J.J., Perez A., Treilleux M.: Nucl. Instr. Meth. B **32**, 272–278 (1988)
8. Kittel C.: Introduction to solid state physics. New York: Wiley 1996. 505 p.
9. Bhagat S.M., Lubitz P.: Phys. Rev. B **10**, 179–185 (1974)
10. Bean C.P.: J. Appl. Phys. **26**, 1381–1287 (1955)
11. Néel L.: Ann. Geophys. **5**, 99–105 (1949)

Особенности оптического поглощения композиционных слоев на основе полимера с металлическими наночастицами, синтезированными ионной имплантацией

А. Л. Степанов, И. А. Файзрахманов

Лаборатория радиационной физики

Методами электронной микроскопии и оптической спектроскопии исследованы слои полимера полиметилметакрилата (ПММА), имплантированного ионами Ag^+ с энергией 30 кэВ и дозой от $3.1 \cdot 10^{15}$ до $7.5 \cdot 10^{16}$ ион/см² при плотности тока в ионном пучке 4 мкА/см². Показано, что ионная имплантация позволяет синтезировать в приповерхностной области полимера наночастицы серебра. Характерной особенностью спектров оптической плотности полученных композиционных материалов является нетипично слабое проявление эффекта плазменного резонанса наночастицами серебра. Обсуждаются особенности образования частиц серебра в условиях карбонизированных слоев, формирующихся в облученном полимере.

Введение

В настоящее время поиск и создание новых композиционных материалов на основе полимеров, содержащих металлические наночастицы (МН), для приложений в области нелинейной оптики и магнитооптики являются актуальной задачей. Коллективное возбуждение электронов в МН под действием света, так называемый поверхностный плазменный резонанс (ППР) [1], ярко проявляется в линейном поглощении и стимулирует в том же спектральном диапазоне нелинейно-оптические эффекты. С целью повышения эффективности ППР на практике стремятся увеличить содержание МН в композиционном материале. Перспективным методом формирования МН в полимерной матрице является ионная имплантация (ИИ), позволяющая осуществлять контролируемый синтез МН на различных глубинах от поверхности облучаемой матрицы при неограниченной доле вводимой примеси в образец. Первые исследования по ионному синтезу МН в полимерах опубликованы в работе Куна с коллегами в 1984 г. [2].

С точки зрения эффективности реализации нелинейно-оптических свойств МН в диэлектриках, предпочтительными являются благородные металлы. Однако, как было установлено ранее в ряде работ по ионному синтезу [3, 4], наночастицы даже такого металла, как серебро с интенсивным линейным ППР поглощением [4], не проявляют характерных интенсивных спектров ППР в облученных полимерах. Поэтому цель настоящей работы заключается в исследовании особенностей линейных оптических ППР свойств МН, формируемых методом ионной имплантации в полимерной матрице. Задача решается путем сопоставления экспериментальных оптических спектров синтезированных наночастиц серебра в полиметилметакрилате (ПММА) и модельных расчетных спектров.

Методики эксперимента и анализа

Для синтеза композиционного материала в качестве подложек были использованы пластины ПММА, прозрачные в видимом диапазоне. ИИ проводилась на ускорителе ИЛУ-3 ионами Ag^+ с энергией 30 кэВ и дозой в интервале от $3.1 \cdot 10^{15}$ до $7.5 \cdot 10^{16}$ ион/см², плотностью тока в ионном пучке 4 мкА/см² при комнатной температуре мишени. Для сравнения подложки ПММА были имплантированы также ионами ксенона при прочих равных условиях. Исследования структуры и фазового состава полученных образцов проводились методами просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ) и микродифракции на электронном микроскопе Tesla BM-500. Измерение спектров оптической плотности (ОП) проводилось на двухлучевом спектрофотометре Hitachi 330.

Для моделирования оптических спектров сферических МН, диспергированных в различных диэлектрических средах, была использована электромагнитная теория Ми [5], позволяющая вычислить сечение экстинкции σ_{ext} МН. Данная величина может быть сопоставлена с ослаблением интенсивности света ΔI от начального значения I_0 после прохождения света через прозрачную диэлектрическую среду, содержащую частицы. Поглощение и рассеяние света частицами определяются сечением поглощения σ_{abs} и рассеяния σ_{sca} , при этом $\sigma_{\text{ext}} = \sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{sca}}$. В соответствии с законом Бугера-Ламберта-Бера

$$\Delta I = I_0(1 - \exp(-N_0 \sigma_{\text{ext}} l)),$$

где l – толщина оптического слоя; N_0 – плотность МН в образце. При этом сечение экстинкции пропорционально коэффициенту поглощения γ , поскольку $\gamma = N_0 \sigma_{\text{ext}}$.

Экспериментальные спектральные зависимости ОП определяются как

$$\text{ОП} = -\lg(I/I_0) = \gamma/l\lg(e)$$

и, следовательно, для образцов, в отсутствии взаимодействия между МН, ОП пропорциональна σ_{ext} . Поэтому в настоящей работе моделируемые спектральные зависимости σ_{ext} , которые рассчитываются по уравнениям теории Ми, сопоставляются с экспериментальными спектрами ОП.

Экспериментальные результаты

Исследования настоящей работы направлены на изучение композитных структур, состоящих из сепарированных друг от друга МН в объеме полимера. Такие структуры синтезируются в интервале ионных доз 10^{15} – 10^{17} ион/см². Как пример, на рис. 1 приведена микрофотография образца, имплантированного дозой $5 \cdot 10^{16}$ ион/см², на которой видны наночастицы сферической формы. Из анализа микродифракции следует, что они имеют гранцентрированную кубическую решетку с постоянной, соответствующей металлическому серебру.

Экспериментальные спектры ОП ПММА, имплантированного различными дозами ионов ксенона и серебра, представлены на рис. 2. Как следует из рис. 2а, ИИ ионами ксенона вызывает монотонное увеличение поглощательной способности полимера в видимой области спектра и особенно в области ближнего ультрафиолета, связанное с процессом радиационно-стимулированной карбонизации ПММА. При имплантации ионами серебра, помимо этих изменений поглощательной способности полимера, наблюдается появление селективной полосы, которая обусловлена ППР поглощением наночастиц серебра (рис. 2б). Для минимальной дозы имплантации максимум полосы поглощения расположен вблизи 420 нм, и с ростом дозы смещается в длинноволновую область до ~600 нм при заметном уширении полосы поглощения. Главная особенность наблюдаемых спектров – низкая интенсивность ППР поглощения, что не характерно для ППР поглощения наночастиц серебра. Так, например, в работе [6] частицы серебра были синтезированы в ПММА конвекционным методом и имели ин-

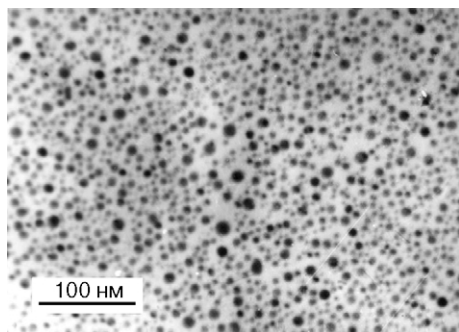


Рис. 1. Электронно-микроскопическая фотография наночастиц серебра для случая имплантации Ag^+ в ПММА дозой $5.0 \cdot 10^{16}$ ион/см².

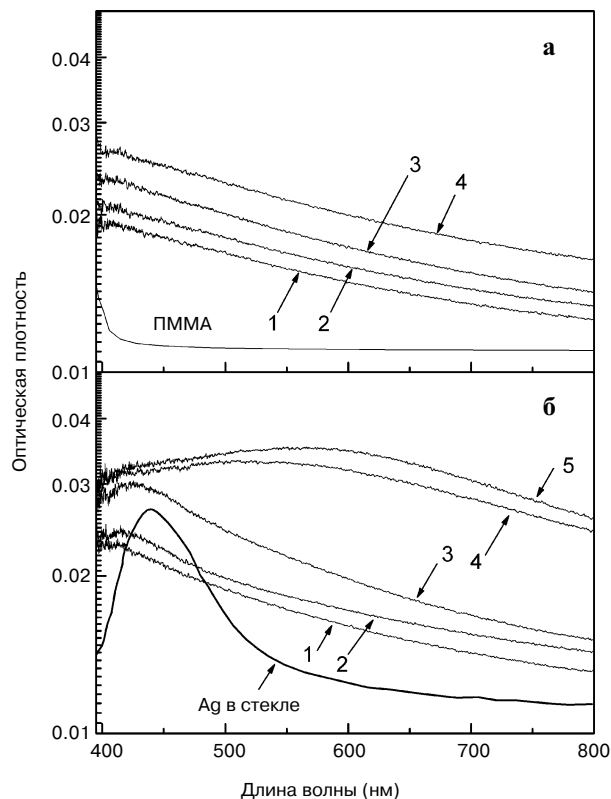


Рис. 2. Спектры оптической плотности ПММА, имплантированного ионами ксенона (а) и серебра (б) дозами: 1 – $0.3 \cdot 10^{16}$, 2 – $0.6 \cdot 10^{16}$, 3 – $2.5 \cdot 10^{16}$, 4 – $5.0 \cdot 10^{16}$, 5 – $7.5 \cdot 10^{16}$ ион/см². Для сравнения приведен спектр силикатного стекла, имплантированного ионами серебра дозой $5.0 \cdot 10^{16}$ ион/см² [8].

тенсивное ППР поглощение. Наблюдаемое слабое ППР поглощение также нельзя объяснить особенностями методики ИИ. На рис. 2б в качестве примера приведен спектр оптической плотности силикатного стекла (SiO_2), имплантированного ионами серебра в схожих условиях ионного синтеза [7]. Видно, что наночастицы серебра в стекле проявляют намного более интенсивное ППР поглощение по сравнению с наночастицами серебра в полимере (рис. 2б). При этом заметим, что размерные распределения МН в стекле [7] были подобными тем, что наблюдались в ПММА.

Моделирование оптических свойств

Экстинкция среды с МН зависит как от оптического поглощения частиц, так и от эффективности светорассеяния частицами. Определяющими факторами оказываются длина волны света, размерные параметры частиц и оптические свойства окружающей их среды. Точное решение задачи взаимодействия плоской электромагнитной волны с отдельной сферической частицей в рамках классической электродинамики было предложено Ми [5]. Поэтому воспользуемся уравнениями Ми для моделирования спектров экстинкции наночастиц серебра и сопо-

ставим их с экспериментальными зависимостями. В расчетах были использованы комплексные значения оптических постоянных серебра ε_{Ag} . Вычисления экстинкции были проведены для частиц различных радиусов от 1 до 10 нм, принимая во внимание размеры МН, наблюдаемых на микрофотографии (рис. 1).

На первом этапе моделирования нами были проведены расчеты спектров экстинкции наночастиц серебра в матрице ПММА в зависимости от размеров МН, которые приведены на рис. 3. Полученные спектры характеризуются широкой селективной полосой, охватывающей весь видимый диапазон. Положение максимума поглощения ППР практически не зависит от размера МН и находится вблизи 440 нм. Увеличение размеров частиц ведет только к повышению интенсивности полосы экстинкции при некотором ее сужении. Сравнивая расчетные спектры с экспериментальными, видим, что экстинкция, приведенная на рис. 3, в большей степени соответствует ПММА, облученному дозами ионов серебра в интервале от $0.3 \cdot 10^{16}$ до $2.5 \cdot 10^{16}$ ион/см² (кривые 1–3 на рис. 26). Этот интервал доз соответствует начальному этапу формирования МН, что проявляется в спектрах оптической плотности появлением селективной полосы в области 420–440 нм. Однако, спектры оптической плотности ПММА, имплантированного более высокими дозами ионов серебра, существенно отличаются от расчётных.

Причина подобного расхождения вполне очевидна. При высокодозной ионной имплантации происходит карбонизация имплантированного слоя полимера и, как следствие, значительно изменяются его оптические свойства. Поэтому нами были проведены расчеты спектров экстинкции частиц серебра в аморфной углеродной матрице (C-matrix). Моделирование спектров экстинкции для данной системы в зависимости от размера МН (рис. 4) было выполнено аналогично системе частиц серебра в ПММА, но с использованием комплексных оптических постоянных аморфного углерода ε_C . Для всех рассмотренных

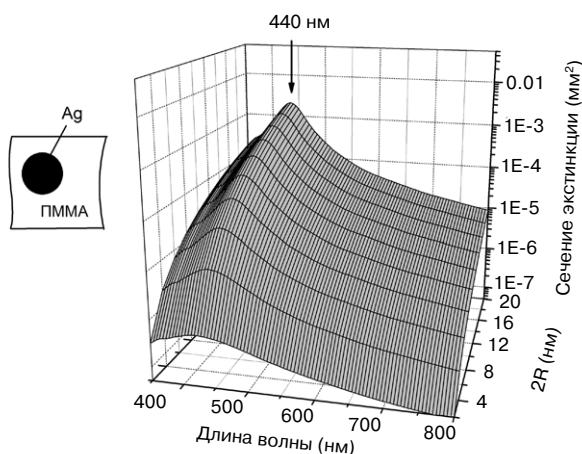


Рис. 3. Расчетные спектры оптической экстинкции наночастиц серебра, находящихся в ПММА, в зависимости от размера частиц.

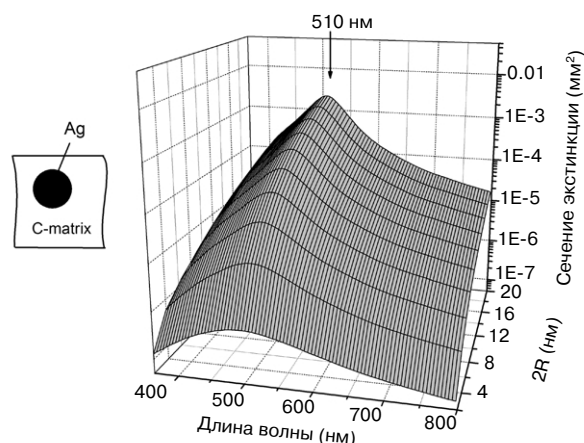


Рис. 4. Расчетные спектры оптической экстинкции наночастиц серебра, находящихся в аморфной углеродной матрице, в зависимости от размера частиц.

размеров МН спектры экстинкции характеризуются одной широкой полосой, охватывающей всю видимую область с неизменным спектральным положением максимума. Однако он расположен в более длинноволновой области около 510 нм. Наблюдаемое смещение максимума полосы в расчетах при смене матрицы можно соотнести с соответствующим смещением максимума в экспериментальных спектрах ПММА при превышении дозы имплантации серебром $2.5 \cdot 10^{16}$ ион/см² (кривые 3 и 4 рис. 26). Данное спектральное смещение можно трактовать как изменение в зависимости от дозы окружения серебряных частиц от чисто полимерного к углеродному.

Последняя модель учитывает в определенной степени не только процесс формирования и роста МН, но и изменение структуры и свойств полимерной матрицы. При этом предполагалось, что свойства углеродной матрицы однородны. Однако это не совсем так. При росте металлической наночастицы в прилегающей области матрицы создаются сжимающие напряжения, которые увеличивают плотность вещества в этой области. Этот эффект может быть существенным для аморфного углерода, который имеет весьма рыхлую структуру. Поэтому в области высоких доз имплантации возможно формирование сложных частиц типа ядро/оболочка. Тогда рассмотрим новую модель, основанную на оптических свойствах сложных частиц типа ядро/оболочка, которая, как мы полагаем, более точно описывает динамику изменения спектров экстинкции в зависимости от степени карбонизации полимерного слоя.

Для расчета спектров экстинкции наночастиц сложного состава серебряное ядро/углеродная оболочка, находящихся в диэлектрической матрице (ПММА), воспользуемся соотношениями теории Ми, модифицированной для случая сложных частиц [8]. Результаты расчета спектров оптической экстинкции с фиксированным размером ядра 4 нм при монотонно изменяющейся толщине углеродной оболочки от 0 до 5 нм приведены на рис. 5. Видно, что при увеличении толщины оболочки макси-

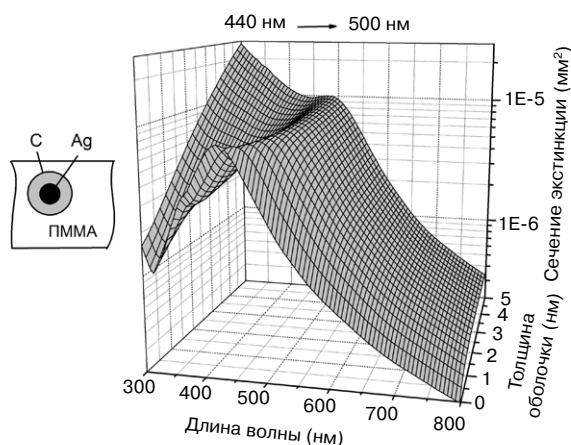


Рис. 5. Расчетные спектры оптической экстинкции наночастиц серебра размером 4 нм с углеродной оболочкой, находящихся в матрице ПММА, в зависимости от толщины оболочки.

мум спектральных полос ППР наночастиц серебра смещается от длины волны 410 нм, соответствующей частицам серебра без оболочки (рис. 3), до примерно 500 нм. При этом в спектрах наблюдается снижение интенсивности полос ППР, сопровождающееся усилением поглощения в ультрафиолетовой области спектра. При максимальной толщине оболочки плечо в спектре поглощения в области 300 нм по интенсивности превосходит поглощение ППР от МН. Отмеченные особенности расчетных спектров находятся в качественном согласии с наблюдаемыми изменениями в экспериментальных спектрах ОП (рис. 2б) при превышении дозы имплантации $2.5 \cdot 10^{16}$ ион/см². Таким образом, предположение о том, что увеличивающаяся доля карбонизированной фазы в полимере при увеличении дозы облучения, стимулирует соответствующие изменения в спектре ОП (рис. 2б), находит подтверждение в приведенных расчетах оптической экстинкции в модели сложных частиц ядро/оболочка. Однако, несмотря на качественное согласие в поведении модельных спектров в зависимости от толщины углеродной оболочки и экспериментальных зависимостей от дозы, все же имеются расхождения, в частности, более длинноволновое положение максимума полосы ППР в экспериментальном спектре ОП и в заметно большей ширине этого спектра.

Анализируя оптические свойства МН, находящихся в какой-либо матрице или среде, следует принимать во внимание эффекты, возникающие на границе интерфейса между МН и матрицей, не учитываемые в теории Ми [5]. К таким эффектам относятся статическое и динамическое перераспределение электронов МН и окружающей матрицы.

Статическое перераспределение электронов обусловлено выравниванием уровней Ферми металлических наночастиц и среды. Этот процесс существенно

зависит от структуры энергетических зон МН и матрицы, а также интерфейсной области. Например, при контакте металла и диэлектрика статическое перераспределение отсутствует. На контактах типа полупроводник-металл или металл-металл статическое перераспределение электронов может быть значительным в случае идеального контакта или при наличии небольшого туннельного барьера. Статическое перераспределение ведет к изменению концентрации электронов проводимости МН, что проявляется в спектральном положении ППР поглощения [9].

Как было показано ранее [10], внедрение наночастиц серебра в углеродную матрицу фуллерена C_{60} приводит к снижению плотности электронов в серебряной частице примерно на 20% вследствие их акцептирования молекулами матрицы. Согласно теории [9], такое снижение должно сопровождаться смещением спектра экстинкции МН в длинноволновую область спектра, как это и наблюдалось при сравнении экспериментальных спектров наночастиц в вакууме (без адсорбента) со спектрами частиц в матрице C_{60} [10]. Можно полагать, что формирующиеся в процессе ионной имплантации полимера локальные графитоподобные области также обладают акцепторными свойствами. Поэтому смещение максимума ППР поглощения в длинноволновую область с увеличением дозы имплантации может быть частично связано со статическим перераспределением электронов между наночастицами серебра и окружающими их графитоподобными структурами (рис. 4 и 5).

Помимо статического перераспределения электронов, между МН и матрицей может происходить и быстро изменяющееся во времени, т.е. динамическое, перераспределение зарядов на том же интерфейсе [9]. При поглощении света электроны МН могут туннелировать в окружающую матрицу и, после некоторой задержки, обратно. Такая флуктуация плотности электронов в МН оказывает непосредственное влияние на релаксационные времена резонансных электронных возбуждений и, соответственно, на ширину спектральных полос ППР, что было продемонстрировано ранее на примере системы, состоящей из серебряных наночастиц, помещенных в матрицу C_{60} [10]. Частицы серебра в матрице C_{60} имели более широкую полосу ППР по сравнению с теми же МН в вакууме. Данный результат дает основание полагать, что динамическое изменение плотности электронов может быть причиной уширения спектров ППР частиц серебра при увеличении дозы облучения, т.к. накопление дозы ведет к карбонизации имплантированного слоя и увеличению концентрации акцепторных уровней вблизи поверхности МН. Поскольку эффект динамического изменения плотности электронов не может быть учтен в классических расчетах Ми [5], то модельные спектры заведомо должны быть менее широкими, чем экспериментальные, что и наблюдается на практике.

Заключение

Таким образом в настоящей работе изучено формирование наночастиц серебра в ПММА методом ИИ и проанализированы особенности спектров ОП, обусловленные эффектом ППР. Рассмотрены особенности ИИ полимеров, в частности, образование карбонизированных слоев. Используя теорию Ми, смоделированы спектры оптической экстинкции серебряных частиц, находящихся в полимерной или углеродной матрице, а так же рассчитаны спектры МН сложного состава типа серебряное ядро/углеродная оболочка в зависимости от толщины оболочки. Получено качественное согласие между расчетными и экспериментальными спектрами. Рассмотрена динамика образования МН в зависимости от дозы ИИ, состоящая в последовательном переходе от простых частиц серебра к сложным наночастицам типа ядро/оболочка. Проанализированы причины количественного расхождения экспериментальных и расчетных спектров.

Работа выполнена при государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (грант № НШ 1904.2003.2). Мы благодарим Немецкий научный

фонд им. Александра Гумбольдта и выражаем признательность В. И. Нуждину и В. Ф. Валееву за помощь в проведении ИИ.

Литература

1. Kreibig U., Vollmer M.: Optical Properties of Metal Clusters. Berlin: Springer 1995. 533 p.
2. Koon N.C., Weber D., Pehrsson P., Shindler A.I.: Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **27**, 446–451 (1984)
3. Stepanov A.L., Abdullin S.N., Khaibullin R.I., et al.: Proc. Roy. Micr. Soc. **29**, 226–227 (1994)
4. Stepanov A.L., Abdullin S.N., Osin Yu.N., et al.: Phil. Mag. B **80**, 23–28 (2000)
5. Борен К., Хафмен Д.: Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир 1980. 532 с.
6. Scheunemann W., Jäger H.: Z. Physik. **265**, 441–458 (1973)
7. Stepanov A.L., Hole D.E.: Recent Res. Devel. Appl. Phys. **5**, 1–25 (2002)
8. Sinzig J., Quinten M.: Appl. Phys. A **58**, 157–162 (1994)
9. Kreibig U. in: Handbook of Optical Properties (Hummel R.E., Wissmann P., eds.), vol. II, p. 145. London: CRC Press 1997.
10. Kreibig U., Gartz M., Hilger A.: Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **101**, 1593–1602 (1997)

Импульсный лазерный отжиг слоев кремния, имплантированных ионами железа

Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория интенсивных радиационных воздействий

Исследованы процессы синтеза тонких пленок силицидов железа на кремнии, имплантированном ионами железа и подвергнутом воздействию наносекундными импульсами рубинового ($\lambda = 0.69$ мкм) и неодимового ($\lambda = 1.06$ мкм) лазеров. Методами рентгеновской дифракции, просвечивающей электронной микроскопии и Резерфордского обратного рассеяния изучены фазовый состав, кристаллическая структура синтезированных пленок, а также распределение по глубине имплантированных атомов железа. Обнаружено, что в зависимости от концентрации внедренных ионов наблюдается либо преимущественное вытеснение атомов железа к поверхности (сегрегация), либо диффузия вглубь кремния. Показано, что в зависимости от плотности энергии лазерного импульса, имеет место формирование поликристаллических и монокристаллических слоев силицидов железа.

Введение

В последние 10–15 лет существенно вырос интерес к полупроводниковому дисилициду железа (β -FeSi₂) благодаря возможному использованию этого материала в оптоэлектронике в качестве излучателя света в ближней инфракрасной (ИК) области (1–1.5 мкм). Поскольку β -FeSi₂ является соединением на основе кремния, он может быть легко интегрирован на одном кристалле с кремниевыми микроэлектронными приборами, что, в свою очередь, может привести к созданию нового поколения интегральных схем, сочетающих оптическую и электрическую обработку информации.

К настоящему времени опубликовано большое число работ, связанных с синтезом этого материала в виде объемных монокристаллов и тонких пленок на подложках Si [1]. Недавно появились сообщения об изготовлении первых светодиодов на основе гетероструктур Si/ β -FeSi₂/Si, работающих при прямом электрическом смещении и излучающих в области 1.5–1.6 мкм при 300 K [2, 3]. Указанные светодиодные структуры обладают пока низкой квантовой эффективностью ($\eta \sim 0.1\%$), недостаточной для практического применения, и требуют повышенных плотностей инжекционного тока ($j > 10$ А/см²). Кроме того, методы формирования слоев β -FeSi₂ (ионно-лучевой синтез и молекулярно-лучевая эпитаксия) включают длительные (до 20 ч) и высокотемпературные (свыше 900°C) обработки всего кристалла. Такие обработки нежелательны в современной микроэлектронной технологии, где тенденция к миниатюризации элементов требует уменьшения диффузионных длин примесных атомов, что, в свою очередь, накладывает ограничения на температуру и длительность тепловых воздействий на кристалл.

Альтернативой длительным термообработкам кристаллов кремния могут быть импульсные воздействия мощными наносекундными ионными, электронными и лазерными пучками. Кратковременность воздействия

(менее 1 мкс) и его локальность по глубине (менее 1 мкм) позволяют проводить отжиг имплантированных слоев кремния либо перемешивание тонких пленок осажденных на кремний без нагрева всего кристалла. Помимо указанных преимуществ, высокие скорости нагрева, плавления и затвердевания (~ 1 м/с), имеющие место в процессе действия наносекундного импульса, предотвращают образование протяженных (линейных) дефектов [4].

К настоящему времени в литературе имеется ограниченное число публикаций, связанных с импульсной модификацией тонкопленочной системы Fe-Si. Работы посвящены воздействию импульсного лазерного излучения либо на вакуумно-осажденные пленки (Fe, FeSi) [5, 6], либо на слои кремния, имплантированные сравнительно невысокими дозами ($\Phi < 10^{16}$ см⁻²) ионов железа (Fe⁺) [7]. В то же время нам не известны работы, связанные с импульсным лазерным отжигом (ИЛО) слоев кремния, имплантированных высокими дозами ($\Phi > 10^{17}$ см⁻²) ионов Fe⁺, соответствующими формированию стехиометрических соединений (FeSi₂ и FeSi). В работах нашей группы исследовалось формирование тонких пленок силицидов железа в слоях кремния, имплантированных различными дозами ($\Phi = 10^{16} - 2 \cdot 10^{17}$ см⁻²) ионов Fe⁺ и отожженных импульсными ионными и лазерными пучками [8–10]. В данной статье приведены основные результаты по воздействию импульсных лазеров (рубинового и неодимового) на имплантированные слои кремния.

Эксперимент

В работе использовались пластины монокристаллического кремния толщиной 380 мкм *n*-типа проводимости (КЭФ-4.5) с ориентацией (100). Имплантация кремниевых пластин ускоренными ионами Fe⁺ с энергией $E = 40$ кэВ проводилась двумя дозами $\Phi = 7 \cdot 10^{15}$ и $1.8 \cdot 10^{17}$ см⁻² при плотности ионного тока $j < 6$ мкА/см². После

имплантации образцы были подвергнуты ИЛО излучением рубинового ($\lambda = 0.69$ мкм, $\tau = 80$ нс, $W = 0.6\text{--}1.4$ Дж/см², $T = 300$ К) или неодимового ($\lambda = 1.06$ мкм, $\tau = 20$ нс, $W = 3.0$ Дж/см², $T = 77$ К) лазеров. Во втором случае образец кремния во время облучения находился при температуре жидкого азота с целью управления его прозрачностью для излучения неодимового лазера [11].

Фазовый состав, кристаллическая структура и морфология поверхности имплантированных и лазерно-отожженных слоев исследовались методами рентгеновской дифракции (РД) в скользящих лучах ($\varphi = 1\text{--}3^\circ$), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Распределение имплантированных атомов Fe по глубине в Si до и после ИЛО было изучено с использованием метода Резерфордского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия ($^4\text{He}^+$).

Результаты и обсуждение

На рис. 1 показан спектр РД имплантированного кремния после его облучения импульсами неодимового лазера с фронтальной стороны пластины. Виден интенсивный дифракционный пик $\beta(202)/(220)$ при $2\theta = 36.2^\circ$ и пик $\beta(422)$ при $2\theta = 63^\circ$ с интенсивностью на порядок меньшей. Указанные пики принадлежат полупроводниковой фазе дисилицида железа ($\beta\text{-FeSi}_2$). Пики других силицидных фаз (FeSi , α - и $\gamma\text{-FeSi}_2$) отсутствуют в приведенном спектре. Отметим, что соотношение интенсивностей пиков фазы $\beta\text{-FeSi}_2$ на данном спектре резко отличается от их соотношения в порошках, где интенсивность пика $\beta(422)$ составляет 80% от интенсивности основного пика $\beta(202)$. Этот факт, а также азимутальная зависимость данного пика (рис. 1, вставка) свидетель-

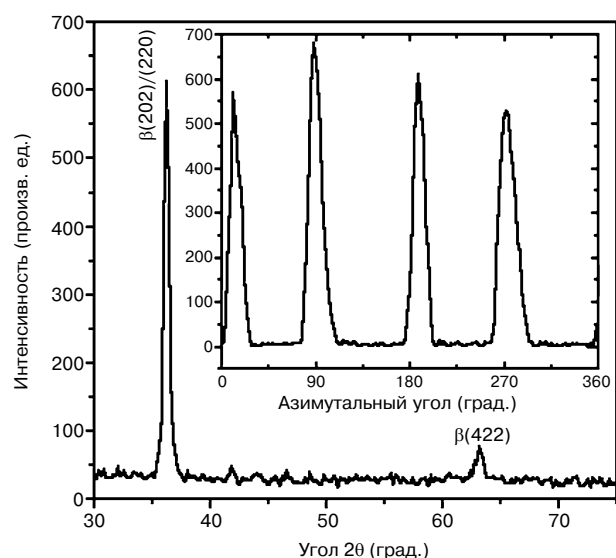


Рис. 1. Спектр РД имплантированного кремния ($E = 40$ кэВ, $\Phi = 1.8 \cdot 10^{17}$ Fe⁺/см²) после ИЛО ($\lambda = 1.06$ мкм, $W = 3$ Дж/см², $T = 77$ К) с фронтальной стороны пластины. Во вставке показана азимутальная зависимость дифракционного пика $\beta(202)/(220)$.

ствуют о формировании текстурированных и однофазных слоев $\beta\text{-FeSi}_2$ на Si.

Характерной особенностью отжига имплантированного кремния излучением неодимового лазера ($\lambda = 1.06$ мкм) является сильное нарушение поверхности кремния с образованием кратеров и волн расплава (рис. 2а) за счет сильного перегрева поверхности кремния. Наши расчеты показывают, что при плотности энергии 3 Дж/см² толщина расплава кремния достигает 0.7 мкм, температура на поверхности кремния превышает точку испарения кремния (3000°C против 2500°C), время существования расплава составляет около 200 нс.

Перегрев поверхности кремния под действием неодимового лазера можно существенно понизить путем облучения имплантированного слоя с обратной стороны пластины. Понижение температуры образца с 300 до 77 К позволяет увеличить прозрачность кремния к данному виду излучения за счет понижения коэффициента поглощения с 10 до 0.1 см⁻¹. При этом

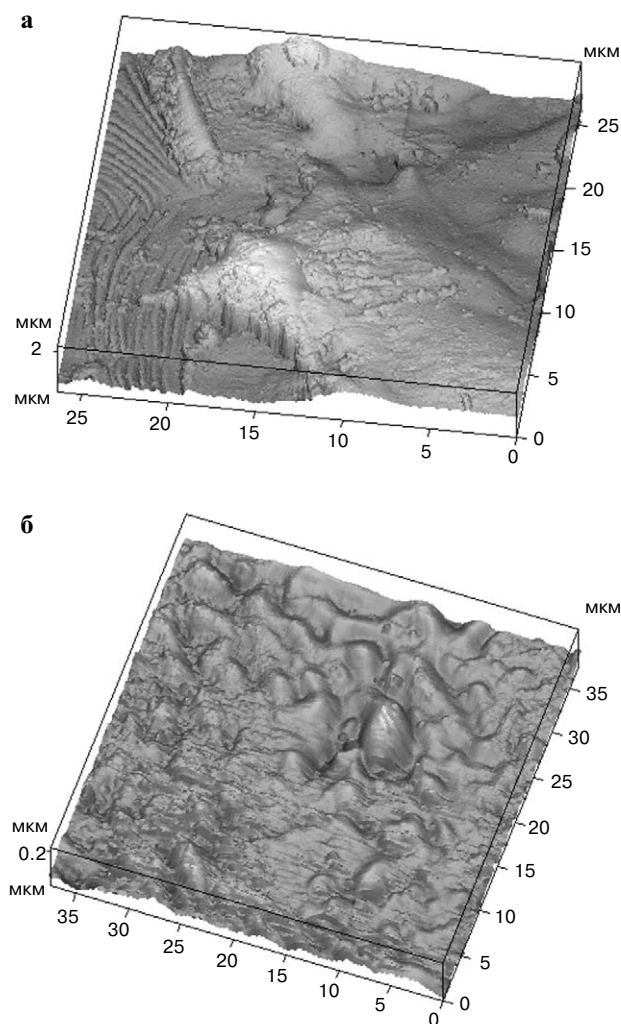


Рис. 2. АСМ изображения поверхности имплантированного кремния ($E = 40$ кэВ, $\Phi = 1.8 \cdot 10^{17}$ Fe⁺/см²) после ИЛО ($\lambda = 1.06$ мкм, $W = 3$ Дж/см², $T = 77$ К): а с фронтальной стороны, б с обратной стороны. Области сканирования 27×27 и 37×37 мкм, соответственно.

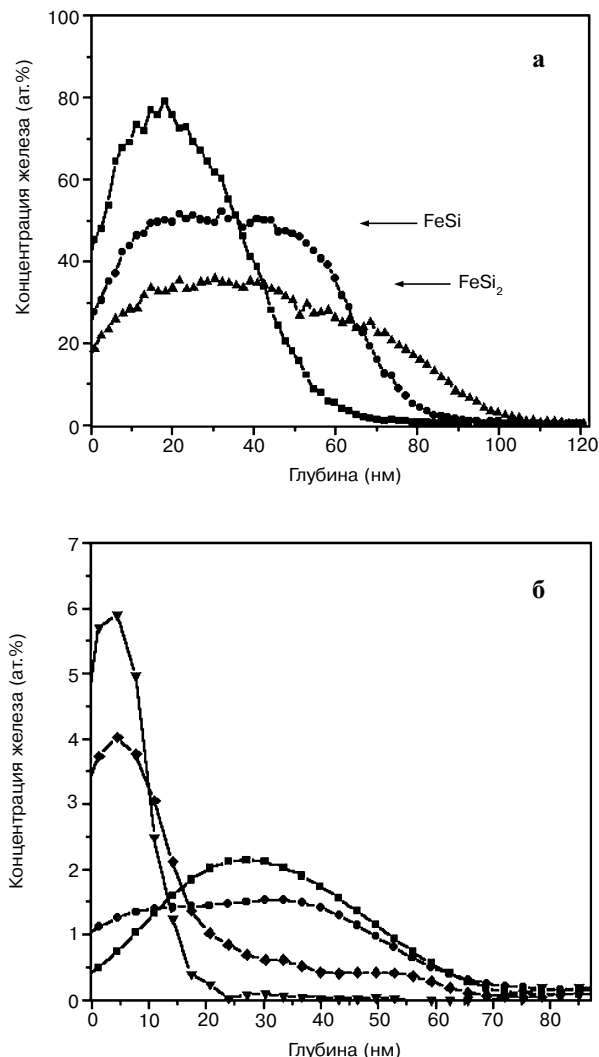


Рис. 5. Глубинные профили, полученные из спектров РОР, для атомов железа в кремнии до (■) и после ИЛО: **а** доза имплантации $\Phi = 1.8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$, ● $W = 1.1 \text{ Дж/см}^2$, ▲ $W = 1.4 \text{ Дж/см}^2$, **б** доза имплантации $\Phi = 7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, ● $W = 0.8 \text{ Дж/см}^2$, ◆ $W = 1.1 \text{ Дж/см}^2$, ▼ $W = 1.4 \text{ Дж/см}^2$. Стрелки указывают на стехиометрические составы, соответствующие моно- и дисилициду железа.

филь имеет гауссову форму. С увеличением энергии импульса наблюдается перераспределение атомов Fe к поверхности кремния (сегрегация), характерное для малорастворимых в кремнии примесей переходных металлов [4]. Таким образом, импульсный синтез полупроводниковой фазы $\beta\text{-FeSi}_2$ наблюдался нами лишь в тех случаях, когда имело место глубокое плавление приповерхностных слоев кремния (толщина расплава свыше 0.5 мкм), которое было реализовано в слу-

чае отжига имплантированных слоев кремния ($\Phi \sim 2 \cdot 10^{17} \text{ Fe}^+/\text{см}^2$) либо импульсными ионными пучками с плотностью энергии выше 1.2 Дж/см², либо излучением неодимового лазера с плотностью энергии около 3 Дж/см² [9].

Заключение

Исследованы процессы силицидообразования в слоях кремния, имплантированных ионами Fe⁺ при их обработке наносекундными импульсами рубинового ($\lambda = 0.69 \text{ мкм}$) и неодимового ($\lambda = 1.06 \text{ мкм}$) лазеров. Показано, что в зависимости от плотности энергии лазерного излучения имеет место формирование различных фаз силицидов железа (FeSi, α -, β - и $\gamma\text{-FeSi}_2$) с поли- и монокристаллической структурой. Установлено, что для синтеза полупроводниковой фазы $\beta\text{-FeSi}_2$ существует пороговая плотность энергии, своя для каждого вида импульсного излучения. Кроме того определено, что в зависимости от концентрации внедренных атомов Fe, наблюдается их вытеснение к поверхности, либо диффузия вглубь кремния.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 02-02-16838) и программы “Новые материалы и структуры” Отделения физических наук РАН.

Литература

1. Lange H.: Phys. Stat. Sol. (b) **201**, 3–65 (1997)
2. Suemasu T., Negishi Y., Takakura K., Hasegawa F.: Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L1013–L1015 (2000)
3. Lourenco M.A., Butler T.M., Kewell A.K., Gwilliam R.M., Kirkby K.J., Homewood K.P.: Jpn. J. Appl. Phys. **40**, 4041–4044 (2001)
4. Двуреченский А.В., Качурин Г.А., Нидаев Е.В., Смирнов Л.С.: Импульсный отжиг полупроводниковых материалов. М.: Наука 1982. 208 с.
5. Falepin A., Comrie C.M., Vantomme A., Langouche G.: Hyperfine Interactions **134**, 153–160 (2001)
6. Wagner S., Carpenne E., Schaaf P., Weisheit M.: Appl. Surf. Sci. **186**, 156–161 (2002)
7. Damgaard S., Oron M., Petersen J.W., Petrikin Yu.V., Weyer G.: Phys. Stat. Sol. (a) **59**, 63–67 (1980)
8. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х., Визер Г., Кюне Х.: ФТП **35**, 1320–1325 (2001)
9. Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Галаяутдинов М.Ф., Нурутдинов Р.М., Дулова М.И., Шустов В.А.: Модификация материалов пучками частиц и плазменными потоками. Тр. VI Вещдународной конф., с. 420–423. Томск: Изд-во ТПУ 2002.
10. Bayazitov R.M., Batalov R.I., Khaibullin I.B., Ivlev G.D., Dézsi I., Kótai E.: J. Phys. D: Appl. Phys. **37**, 468–471 (2004)
11. Bayazitov R.M., Galyautdinov M.F., Batalov R.I., Khaibullin I.B., Groetzchel R.: Nucl. Instr. Meth. B **148**, 317–321 (1999)

Влияние типа исходной мишени на ионный синтез силицидов кобальта в Si и SiGe

Г. Г. Гумаров, В. Ю. Петухов, И. Б. Хайбуллин, В. А. Шустов

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной химии и радиобиологии и группа роста кристаллов

Методом ионно-лучевого синтеза (ИЛС) при повышенных температурах получены тонкие пленки дисилицида кобальта CoSi_2 в Si и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ гетероструктурах. Исследовано влияние типа исходной мишени и ее температуры во время имплантации на фазовый состав и структуру синтезируемых слоев. Обнаружена немонотонная зависимость слоевого сопротивления синтезируемых пленок от плотности ионного тока. Методом ИЛС с последующим быстрым термическим отжигом синтезированы тонкие пленки CoSi_2 на структурах $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ со слоевым сопротивлением 17 Ом/□.

Введение

Эпитаксиально выращенные слои $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ на кремнии продолжают привлекать большое внимание исследователей и технологов. Это обусловлено, главным образом, тем, что ширина запрещенной зоны в таких слоях может варьироваться изменением концентрации германия (x). Такая инженерия ширины запрещенной зоны очень привлекательна для широко используемой кремниевой технологии и может использоваться для получения оптоэлектронных приборов, работающих в спектральном диапазоне 0.5–1.8 мкм [1–2] или в высокоскоростной электронике [3, 4]. Кроме того, формирование напряженных квантоворазмерных структур перспективно с точки зрения создания принципиально новых приборов нано- и оптоэлектроники [5].

Однако, во всех случаях получения элементов микроэлектроники на основе гетероструктур необходимо формирование к ним низкоомных невыпрямляющих контактов. В случае твердых растворов Si-Ge такими контактами, также как и в кремнии, могут быть силициды металлов.

В технологии производства интегральных схем силициды традиционно используются в качестве невыпрямляющих контактов, межсхемных соединений, электродов затворов, диодов Шоттки и т.п. [6]. Обычно силициды в таких структурах формируются путем нанесения тонкого слоя металла каким-либо способом с последующей химической твердофазной реакцией, стимулированной достаточно длительным энергетическим воздействием (обычным нагревом либо обработкой лазерным, электронным пучком и др.). Однако во всех этих случаях температура поверхности значительно повышается, что приводит к сильному размытию переходных областей и ухудшению характеристик приборов.

Среди различных силицидов металлов, используемых для формирования проводящих слоев в кремнии, силициды кобальта являются одними из самых популярных. Дисилицид кобальта характеризуется высокой электропроводностью, низкой температурой формирования и

малым различием в постоянной кристаллической решетки с базовым материалом. В ряде работ [7–9] были приведены результаты по формированию слоев дисилицида кобальта в слоях $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Однако, во всех указанных выше работах, синтез дисилицида проводился при достаточно высокой температуре нагрева (700°C и выше).

В то же время известно [10], что ионно-лучевой синтез (ИЛС) позволяет формировать тонкие пленки заданных химических соединений в различных матрицах. В ряде работ (см., например, [11–14]) было показано, что методом ИЛС в кремнии могут быть сформированы силициды переходных металлов. При этом оптимальным подбором режимов имплантации можно синтезировать соединения непосредственно в процессе имплантации без последующих длительных высокотемпературных обработок, причем в этих случаях дисилициды никеля [11] и кобальта [14] формируются в Si мезотаксиально.

Целью данной работы является синтез низкоомных слоев дисилицида кобальта в монокристаллическом кремнии и $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ гетероструктурах и исследование влияния типа исходной мишени, а также режимов имплантации и последующих импульсных воздействий на фазовый состав, структуру и проводимость синтезируемых силицидов.

Эксперимент

Для получения качественных слоев силицидов в кремнии обычно используется имплантация при повышенных температурах. Исходя из этого, нами предложено использовать подобные режимы для формирования проводящих слоев в твердом растворе $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Доза имплантации, необходимая для формирования сплошной пленки дисилицида кобальта в мишени $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ при энергии 40 кэВ, рассчитывалась по программе TRIM [15] и была выбрана равной $1.2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

Для установления степени влияния исходного материала на процесс ИЛС проводящих слоев нами использованы три типа образцов: 1) выращенные методом мо-

ное фазообразование наблюдается в случае ИЛС в SiGe структурах, выращенных на монокристаллическом кремнии, а также непосредственно в пластинах монокристаллического кремния Si (100). Содержание моносилицидной фазы в них значительно меньше, а при температуре около 450°C синтезированная пленка является практически однофазной, причем данные рентгеновской дифракции и электронографии указывают на мезотаксиальный характер формирования дисилицида.

Плотность ионного тока оказывает существенное влияние на кристаллическую структуру и слоевое сопротивление пленок, синтезированных в рассматриваемых подложках. При этом необходимо отметить подобный характер зависимости слоевого сопротивления от плотности ионного тока как для имплантированного монокристаллического Si, так SiGe слоев, выращенных на монокристаллическом Si.

При оптимальном режиме ИЛС применение лазерной обработки приводит к уменьшению слоевого сопротивления от 70 до 40 Ом/□. Энергетическая обработка однократными импульсами некогерентного света с длительностью около 2 с и с плотностью мощности 30 Вт/см² приводит к улучшению кристаллической структуры и электропроводности синтезированных слоев CoSi₂.

Воздействие лазерного отжига на дисилицидные слои в кремнии неоднозначно и зависит от плотности ионного тока, использованной при имплантации. Лазерный отжиг ($\lambda = 0.69$ мкм, $\tau = 50$ нс) приводит к уменьшению слоевого сопротивления ионносинтезированных образцов силицидов, полученных при плотности ионного тока до 10 мкА/см². В случае ионного синтеза при больших плотностях ионного тока лазерный отжиг образцов не приводит к уменьшению слоевого сопротивления. Быстрый термический отжиг силицидных пленок в кремнии при температурах до 1000°C приводит к стягиванию профиля распределения атомов Co, т.е. распределение становится более прямоугольным, а граница раздела – более плоской. Быстрый термический отжиг при 1100°C приводит к некоторому улучшению степени совершенства кристаллической структуры дисилицидного слоя (уменьшению $\chi_{\min}$ для слоя CoSi₂) и отжигу протяжен-

ных дефектов, формирующихся при имплантации в глущинной области.

Авторы благодарны Я. В. Фаттахову за проведение быстрого термического отжига, Н. В. Курбатовой за проведение лазерного отжига и Р. Гретчелу за ОРР измерения.

Работа поддержана Программой фундаментальных исследований Президиума РАН.

Литература

1. Kanaya H., Hasegawa F., Yamaka E., Moriyama T., Nakajima M.: Jpn. J. Appl. Phys. **28**, L544–L546 (1989)
2. Xiao X., Sturm C., Parihar S.R., Lyon S.A., Meyerhofer D., Palfrey S., Shallcross F.V.: IEEE Trans. Electron Device Lett. **EDL-14**, 199–202 (1993)
3. Patton G.L., Comfort J.H., Meyerson B.S., Crable E.F., Scilla G.J., DeFresart E., Stork J.M.C., Harame D.L., Burgatz J.M.: IEEE Trans. Electron. Device Lett. **EDL-11**, 171–173 (1990)
4. Schuppen A., Erben U., Gruhle A., Schumacher H.K.H., Konig U.: IEDM Tech. Dig. **1995**, 743–746.
5. Eberl K., Wegscheider W., Abstreiter G.: J. Cryst. Growth **111**, 882–888 (1991)
6. Murarka S.P.: Silicides for VLSI. New York: Academic Press 1983. 200 p.
7. Lin F., Sarcona G., Hatalis M.K., Cserhati A.F., Austin E., Greve D.W.: Thin Solid Films **250**, 20–25 (1994)
8. Gluck M., Schuppen A., Rosler M., Heinrich W., Hersener J., Konig U., Yam O., Cytermann C., Eizenberg M.: Thin Solid Films **270**, 549–554 (1995)
9. Li W.Q.B.Z., Huang W.H., Gu Z.G., Lu H.Q., Zhang X.J., Zhang M., Dong G.-S., Miller D.C., Atiken R.G.: J. Appl. Phys. **77**, 1086–1092 (1995)
10. Mantl S.: Nucl. Instr. and Meth. B **106**, 355–363 (1995)
11. Petukhov V.Yu., Khaibullin I.B., Zaripov M.M., Wieser E., Groetzschel R., Bartsch H.: Phys. Stat. Sol. A **117**, no. 2, 477–484 (1990)
12. White A.E., Short K.T., Dynes R.C., Gamo J.P., Gibson J.M.: Appl. Phys. Lett. **50**, no. 2, 95–97 (1987)
13. Lindner J.K.N., Kaat E.H.: J. Mater. Res. **3**, no. 6, 1238–1243 (1989)
14. Petukhov V.Yu., Khaibullin I.B., Gumarov G.G., Groetzschel R.: Abstr. of Int. Conf. on Ion Implantation and Ion Beam Equipment, p. 8. Elenite 1990.
15. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.: The stopping and ranges of ions in solids. New York: Pergamon Press 1985. 321 p.
16. Goldberg R.D., Williams J.S., Elliman R.G.: Nucl. Instr. and Meth. B **106**, 242–247 (1995)
17. Radermacher K., Mantl S., Kolhof K., Jager W.: J. Appl. Phys. **68**, 3001–3008 (1990)

Исследование методом *ex vivo* ЭПР метаболических изменений в крови и тканях органов мышей под действием растительного радиотоксина

М. И. Ибрагимова, В. Ю. Петухов, Е. П. Жеглов

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной химии и радиобиологии и лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Впервые методом *ex vivo* ЭПР исследовано последствие воздействия радиотоксина (РТ), полученного из клубней картофеля после γ -облучения, на живые организмы (белых мышей). Установлено, что течение 8 ч после внутрибрюшинного введения в мышей 0.2 мл 10%-го РТ происходит постепенное подавление активной формы фермента рибонуклеотидредуктазы в селезенке. Результатом воздействия концентрированного РТ является появление в спектрах ЭПР от крови дополнительной линии с $g \approx 2.005$, а в спектрах от печени и селезенки – сигналов от нитрозильных комплексов, интенсивность которых зависит от времени, прошедшего после инъекции препарата. Одной из причин летального исхода животных через 45–60 мин после инъекции концентрированного РТ может быть непрерывная генерация NO и нарастающее со временем количество нитрозильных комплексов, что приводит к срыву компенсаторно-восстановительных функций организма из-за усиления гипоксического состояния тканей в результате образования несовместимой с жизнью концентрации нитрозильных комплексов в печени и селезенке.

Введение

Проблема защиты животных и человека от ионизирующего излучения остается актуальной, поскольку до настоящего времени не разработаны достаточно эффективные методы и средства лечения, а также методы ранней диагностики радиационных поражений. Согласно одной из выдвинутых гипотез, механизм действия ионизирующего излучения на организм заключается в пострадиационной радиотоксинеми и аутоантигенемии, возникающих из-за радиолитического распада белков, полипептидов и аминокислот с последующим развитием радиопатологических процессов. Широкий класс токсических веществ, образующихся в результате воздействия ионизирующего излучения, получил название радиотоксинов (РТ) [1–3]. РТ можно выделить из облученных объектов растительного, животного или бактериального происхождения, и в дальнейшем их можно использовать как радиомиметики, то есть как вещества, имитирующие действие ионизирующего излучения. При этом эффект от воздействия РТ характеризуется теми же явлениями, что непосредственное действие радиации, и проявляется в угнетении митозов, задержке роста, появлении хромосомных аберраций и пикнотических ядер, возникновении стерильности, цитолитическом распаде клеток и др. [1, 3]. Поэтому изучение воздействия РТ на биологические объекты представляет интерес как с точки зрения установления механизмов действия ионизирующего излучения, так и с возможностью альтернативного использования РТ в медицине, сельском хозяйстве и других областях.

Ранее [4] нами было показано, что метод *in vitro* ЭПР позволяет однозначно регистрировать последствия воздействия на кровь радиотоксинов, полученных из клубней облученного картофеля.

В данной работе приведены результаты исследования метаболических изменений в крови и тканях органов мышей после внутрибрюшинной инъекции растительного РТ с использованием метода ЭПР *ex vivo*.

Методика эксперимента

Препараты

Радиотоксин был получен из клубней картофеля (сорт “Невский”) после воздействия γ -излучения ^{60}Co с дозой 400 Гр по методике, предложенной в работе [3]. После инкубации облученных клубней при температуре 20°C в течение 24 ч из них получали гомогенат, из смеси которого с этанолом экстрагировали радиотоксин. Полученный препарат центрифугировали и проводили его лиофилизацию. Затем радиотоксин разводили до необходимой концентрации в фосфатном буфере (рН 7.4). Биологическую активность РТ оценивали по тесту 50% гемолиза эритроцитов барана.

В качестве контрольного препарата использовался экстракт из необлученного картофеля, который получали по той же методике, что и образцы РТ.

Образцы и метод исследований

Эксперименты проводились на белых мышах (разведение вивария ВНИВИ), в которых внутрибрюшинно вводились растворы РТ, либо экстракта из необлученного картофеля. Параллельно исследовалась группа контрольных животных, не подвергнутых каким-либо воздействиям.

Количество вводимых препаратов составляло 0.2 мл, при этом процентное содержание РТ в физрастворе изменялось от 10 до 100%. Декапитацию животных производили через различные промежутки времени после введения препаратов: 30 мин, 1, 4 или 8 ч. Исследуемыми объектами являлись: кровь, в которую для предотвращения свертывания добавляли гепарин, часть печени, селезенка и одна почка целиком. Все образцы помещались в кварцевые ампулы и замораживались в жидком азоте.

ЭПР спектры записывались на радиоспектрометре Varian E-12 на частоте 9.3 ГГц в температурном диапазоне от 77 до 200 К.

Результаты исследований

С целью установления последствий воздействия РТ на биологические объекты были проведены эксперименты с инъекцией в мышей радиотоксина в различных разведениях.

Под действием разведенного 10%-го РТ наблюдаются изменения сигналов ЭПР от селезенки, тогда как изменения сигналов от печени, почек и крови незначительны. На рис. 1 приведены фрагменты спектров ЭПР в области $g \sim 2$ от селезенки мышей после инъекции 0.2 мл РТ, иллюстрирующие трансформацию спектров в зависимости от времени до декапитации животных. Как видно из рисунка, с увеличением времени, прошедшем после инъекции, происходит уменьшение интенсивности дублета с $g = 2.008$ и со сверхтонким расщеплением $a = 20$ Гс. Этот сигнал приписывают активной форме

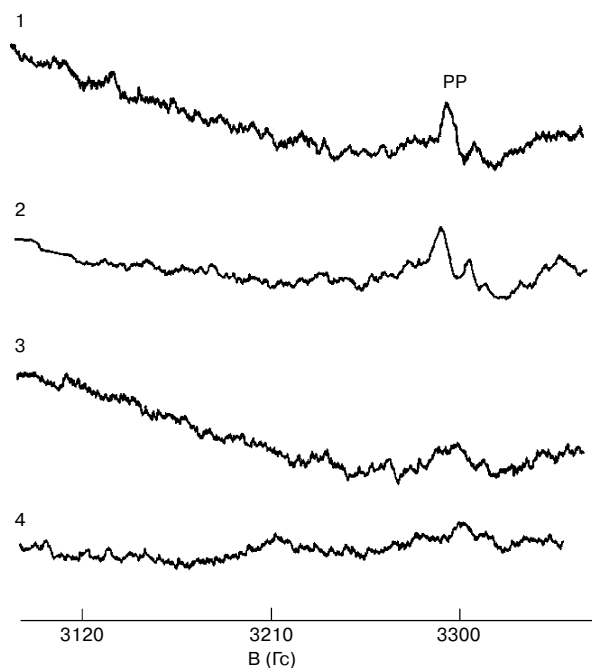


Рис. 1. Фрагменты спектров ЭПР селезенки от интактной мыши (1) и после внутрибрюшинного введения 0.2 мл 10%-го РТ в зависимости от времени до декапитации: 2 – 30 мин; 3 – 4 ч; 4 – 8 ч.

фермента рибонуклеотидредуктазы (РР), содержащего в каталитическом центре радикал тирозинового аминокислотного остатка [5, 6].

Следует отметить, что введение 10%-го раствора экстракта из необлученного картофеля не приводит к изменениям в спектрах ЭПР от крови и тканей исследованных органов.

Инъекция концентрированного РТ ведет к резкому ухудшению состояния мышей. Внутрибрюшинное введение 0.2 мл концентрированного РТ приводит к летальному исходу мышей уже через 45–60 мин. При этом спектры ЭПР кардинально изменяются. Обычно спектр крови интактных мышей состоит из известных линий с $g \approx 6, 4.3, 2.05$ и 2.01 от метгемоглобина, трансферрина, церулоплазмينا и свободных радикалов, соответственно [5]. Однако, в спектрах крови мышей после введения в них РТ появляется дополнительная неидентифицированная линия с $g \approx 2.005$ и шириной ~ 6 Гс, наблюдаемая в температурном интервале 80–150 К. На рис. 2а и б для сравнения приведены фрагменты спектров ЭПР в области $g \sim 2$ после инъекции РТ и экстракта из необлученного картофеля, соответственно. Как видно из рисунка, только после инъекции РТ появляется дополнительная линия с $g \approx 2.005$, причем ее интенсивность немонотонно изменяется с температурой.

Таким образом, появление этой дополнительной линии связано с действием РТ на мышей, и поэтому ее можно использовать как маркер для изучения последствий воздействия радиотоксинов на живые организмы.

Под действием введенного концентрированного РТ происходят также изменения в спектрах ЭПР от тканей органов, а именно, печени и селезенки. Основные изменения наблюдаются в области спектра с $g \sim 2$, причем форма и интенсивность сигнала зависят от степени интоксикации организма. На рис. 3 в качестве иллюстрации приведены фрагменты спектров ЭПР от селезенки (спектры 1 и 2) и печени (спектры 3 и 4) мышей, запи-

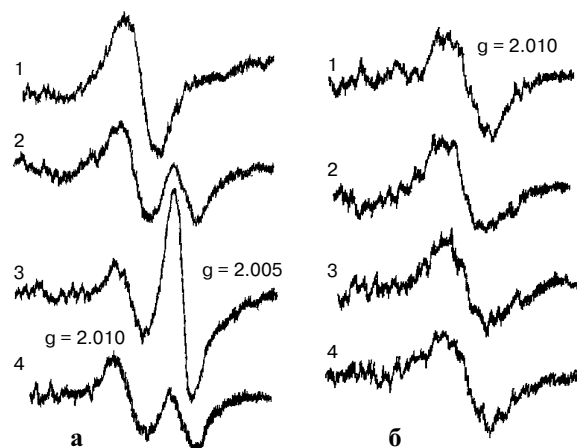


Рис. 2. Ex vivo ЭПР спектры крови, записанные через 30 мин после внутрибрюшинной инъекции 0.2 мл в мышей: а концентрированного РТ; б концентрированного экстракта из необлученного картофеля. Температура измерения: 1 – 77 К; 2 – 85 К; 3 – 110 К; 4 – 150 К.

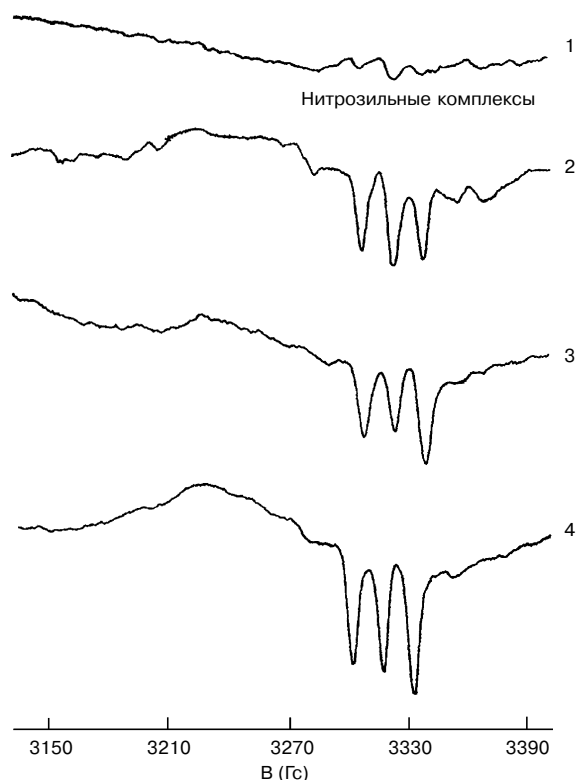


Рис. 3. *Ex vivo* ЭПР спектры от селезенки (1, 2) и печени (3, 4), соответственно, через 45 мин после внутрибрюшинной инъекции 0.2 мл концентрированного РТ в мышей. Спектры 1 и 3 записаны от органов мышей с признаками сильной интоксикации, а спектры 2 и 4 – от органов погибших особей. Температура регистрации ~90 К.

санные через 45 мин после инъекции РТ. Спектры 1 и 3 получены от живых мышей, но с признаками сильного отравления радиотоксином, а спектры 2 и 4 – записаны от органов мышей, погибших через 45 мин. Как видно из сопоставления спектров, эффективность действия концентрированного РТ сильнее проявляется в печени, и несколько в меньшей степени – в селезенке. При летальном исходе животных в спектрах как от селезенки, так и от печени наблюдаются весьма интенсивные линии, тогда как в случае сильной интоксикации в спектре от селезенки еще живой мыши таких линий нет (спектр 1, рис. 3). Спектры ЭПР (2–4), состоящие из интенсивной широкой линии с $g \sim 2.03$ и характерного триплета с $g \sim 2.01$ и расщеплением 17 Гс, хорошо известны (см., например, монографию [7]). Эти сигналы приписывают нитрозильным комплексам, образующимся при взаимодействии железосодержащих белков с монооксидом азота: триплет – нитрозильным комплексам гемового железа, а широкая линия – нитрозильным комплексам негемового железа [7].

Следует отметить, что в спектрах ЭПР от образцов почек мышей, подвергшихся действию концентрированного РТ, столь явных изменений не обнаружено. Изменений в спектрах ЭПР от крови и исследованных тканей органов мышей после введения экстракта из необлученного картофеля также не наблюдается.

Обсуждение результатов

Проведенные исследования показывают, что метод ЭПР позволяет изучать последствия воздействия радиотоксинов на живые организмы, поскольку происходящие под действием РТ метаболические процессы в организме приводят к изменениям спектров ЭПР. А именно, в результате инъекции 10%-го РТ в спектрах от селезенки в течение 8 ч наблюдается уменьшение интенсивности сигнала от фермента рибонуклеотидредуктазы практически до нуля. Из литературы известно [5, 6], что этот фермент играет важнейшую роль в репликации ДНК, и для него существует линейная зависимость между интенсивностью сигнала ЭПР и уровнем его активности. Снижение уровня активности РР, сохраняющейся в клетках длительное время, приводит к возникновению дефицита и дисбаланса дезоксирибонуклеотидов, что будет сказываться на эффективности как репарации, так и репликации. Аналогичный характер снижения интенсивности сигнала от РР в течение 12 ч наблюдался в спектрах от селезенки мышей, подвергнутых γ -облучению с дозой 6 Гр [6, 8]. Этот факт может служить доказательством участия РТ в эффекте лучевого поражения биологических объектов.

Увеличение концентрации РТ в препарате, вводимом в мышей, сопровождается не только подавлением активности РР в селезенке, но и более существенными изменениями в организме, что и определяется из спектров ЭПР как от образцов печени и селезенки, так и от проб крови. Данные исследования показали, что одно из проявлений действия концентрированного РТ, введенного в живой организм, заключается в резком усилении генерации оксида азота, поскольку в спектрах ЭПР от печени и селезенки обнаружены интенсивные линии от нитрозильных комплексов. Изучение временных изменений в спектрах селезенки показало, что сначала зафиксировано появление новых неидентифицированных парамагнитных центров, а после летального исхода животных в спектрах зарегистрированы интенсивные линии от нитрозильных комплексов.

В спектрах от образцов крови мышей после введения в них концентрированного РТ через 30 мин наблюдается появление нового сигнала с $g \approx 2.005$, идентифицировать который на данном этапе не представляется возможным. Следует отметить, что изучить реакцию крови на воздействие РТ методом *ex vivo* ЭПР по мере усиления отравления мышей нельзя, поскольку становится невозможным получить пробы крови после их декапитации.

В настоящее время образование нитрозильных комплексов гемового и негемового железа считается ответной неспецифической реакцией клеток животных, растений и микроорганизмов на определенные типы воздействий. К таким воздействиям относятся не только интоксикация рядом токсических и физиологически активных соединений, образование некоторых злокачественных опухолей различного происхождения, сердеч-

$$\omega_{11}^2(T_{12}) \cong \gamma_{\perp}^2 a_2 B(1 + \chi(T_{12})) < \omega_{21}^2. \quad (5)$$

Поскольку $d\chi/dT < 0$ [1], то частота АФМР ω_{11}^2 является убывающей функцией температуры. В соответствии с выражением (5) ветвь спиновых колебаний с частотой АФМР $\omega_{11}(E_1)$ является низколежащей и, следовательно, наиболее эффективно взаимодействующей с упругими колебаниями (в длинноволновой области спектра спиновых волн $\mathbf{q} \rightarrow 0$). Известно [5], что МУ взаимодействие приводит к изменению, вследствие расталкивания, закона дисперсии звуковых волн с линейного на квадратичный (при $\mathbf{q} \rightarrow 0$), т.е. к уменьшению скорости звука. Увеличение скорости звука с ростом температуры после ОФП в фазу 2 объясняется тем, что энергия ветви E_1 (частота ω_{11} в точке T_{12} скачкообразно переходит на частоту $\omega_{12}(T_{12})$) начинает быстро расти с температурой ($a_1(T) \rightarrow 0$) и низколежащей модой спиновых колебаний в фазе 2 становится в соответствии с формулами (2а) и (2б) ветвь с частотой АФМР ω_{22} . Однако, при использо-

емых в эксперименте значениях магнитного поля $H > 5$ кЭ МУ взаимодействие очень мало [6], и закон дисперсии вновь становится квазилинейным. Аналогично можно объяснить экспериментально наблюдаемую температурную зависимость скорости звука при ОФП из фазы 2 в фазу 1 при понижении температуры. Тот факт, что обратный переход происходит при более высоких температурах, согласуется с тем, что при одной и той же температуре поле перехода $H_{12} < H_{21}$ [7].

Литература

1. Ожогин В.И., Шапиро В.Г.: ЖЭТФ **55**, 1737–1751 (1968)
2. Чепурных Г.К.: ФТТ **15**, 3125–3127 (1973)
3. Ахмадуллин И.Ш., Мигачев С.А.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского 2001. Ежегодник, с. 88–90. Казань: ФизтехПресс 2002.
4. Чепурных Г.К.: ФТТ **17**, 2335–2339 (1973)
5. Туров Е.А., Шавров В.Г.: УФН **140**, 429–462 (1983)
6. Seaveg M.N.: Solid State Commun. **10**, 219–224 (1972)
7. Левитин Р.З., Щуров В.А.: Письма в ЖЭТФ **7**, 142–147 (1968)

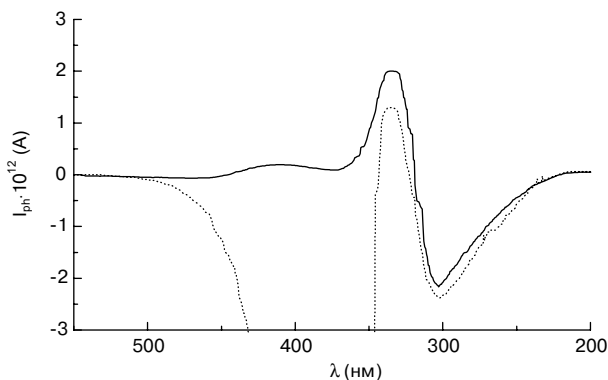


Рис. 3. Спектральная зависимость фототоков. Сплошная линия – исходная кривая, точечная – после облучения.

записывалось фотоэлектретное состояние [5]. Длительность облучения выбиралась такой, что эффект достигал насыщения. Исходная кривая, полученная до облучения (сплошная линия на рис. 3), и итоговая кривая, полученная после облучения с внешним напряжением смещения 100 В (пунктирная линия), регистрировались при отсутствии внешнего напряжения. При указанных условиях максимальная величина фототока (на рис. 3 это минимум, находящийся за границами нижнего края рисунка) достигала величины $12 \cdot 10^{-12}$ А. Нагревание образца до температур 400–450 К с последующим выдерживанием при этих температурах в течение 30 мин и остывание до комнатной температуры в течение часа приводило к полному исчезновению возникающего дополнительно фототока. Облучение кристалла светом с длиной волны вблизи 430 нм и при отсутствии напряжения смещения также приводило к постепенному уменьшению наведенного фототока. Фототок, обусловленный продольным эффектом Дембера, присутствует и для полосы 430 нм. Это можно отметить на рис. 3, где он обуславливает некоторое увеличение фототока вблизи $\lambda = 430$ нм (сплошная кривая).

Была исследована температурная зависимость фототока. Результаты представлены на рис. 4, где приведена максимальная величина фототока (для $\lambda = 435$ нм) в за-

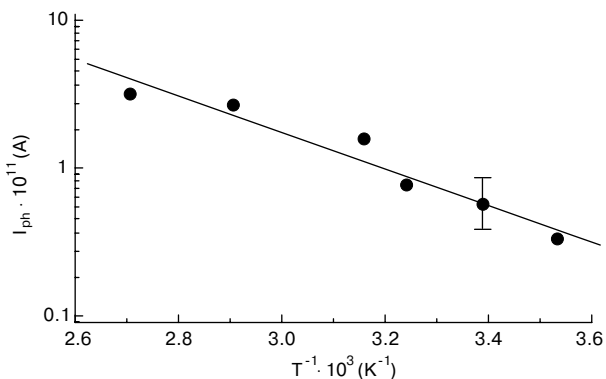


Рис. 4. Температурная зависимость фототока. Точки – эксперимент, линия – аппроксимация результатов по закону Аррениуса.

висимости от обратной температуры. Линия соответствует закону Аррениуса с энергией активации $U_1 = 0.23$ эВ. Отметим также, что величина фототока при освещении УФ области спектра в температурном диапазоне 270–370 К не обнаруживает температурной зависимости в пределах погрешности эксперимента. На рис. 5 показана кинетика изменения фотостимулированных токов при включении и выключении облучения различной длины волны, полученных при отключенном источнике напряжения. Экспозиция везде была 600 с. Последовательность измерений была следующей: сначала записывалась кинетика при ступенчатом уменьшении длины волны с шагом 5 нм от 360 до 300 нм (рис. 5а), а затем – с увеличением длины волны с тем же шагом от 300 до 360 нм (рис. 5б).

Исследования динамики фотостимулированных токов показали, что не только величина, но и направление токов зависит от предыстории образца – спектральной истории облучения светом различного спектрального состава, длительности облучения и от наличия внешнего электрического поля при облучении. Сложность картины кинетических процессов при включении/выключении освещения свидетельствует об участии в них двух видов фотовозбужденных носителей, различающихся по величине подвижности. На основе всей совокупности спектроскопических данных и данных по фотопроводимости можно сделать вывод, что имеется достаточно широкое распределение плотности состояний дефектных уровней по энергиям вблизи дна зоны проводимости. Возможность участия этих состояний в формировании размытого фазового перехода в релаксаторах и способы светового воздействия на релаксаторы выявлены в ходе дальнейших исследований диэлектрических свойств.

Проведены исследования диэлектрических свойств при различных температурах и частотах до и после

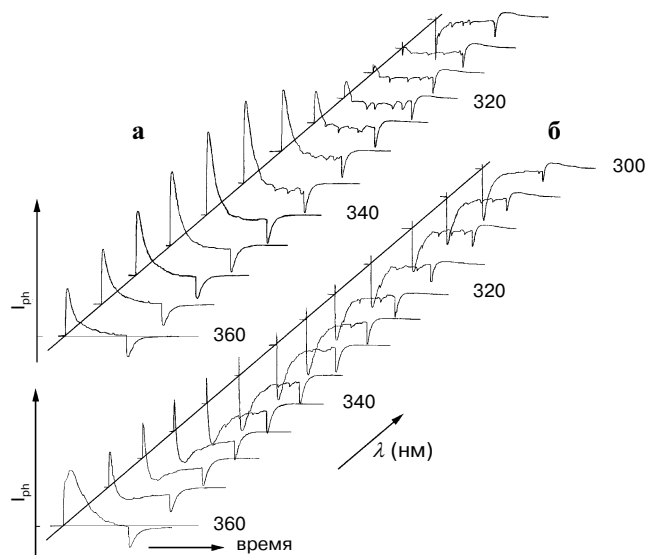


Рис. 5. Кинетика фотостимулированных токов при включении/выключении облучения (см. текст).

воздействия освещения. Во всех случаях измерения проводились при выключенном освещении, чтобы исключить воздействие светового нагрева образца. После отжига образца в течение одного часа при высокой температуре ($T \approx 600$ K) образец охлаждался до температуры измерений. Диэлектрические данные проявляют характерное релаксорное поведение (смотрите вставку на рис. 6а) и аналогичны данным, полученным другими авторами [3] – размытый температурный максимум и сильная частотная зависимость на низких частотах. Воздействие освещения существенно изменяет значения диэлектрических постоянных. На рис. 6 приведена частотная зависимость реальной, ϵ' и мнимой, ϵ'' частей диэлектрической проницаемости для монокристаллов PMN, измеренных при температуре 270 K. После отжига образца и охлаждения до температуры 270 K проведены измерения диэлектрической проницаемости для различных частот. После этого образец подвергался воздействию света, широкой поло-

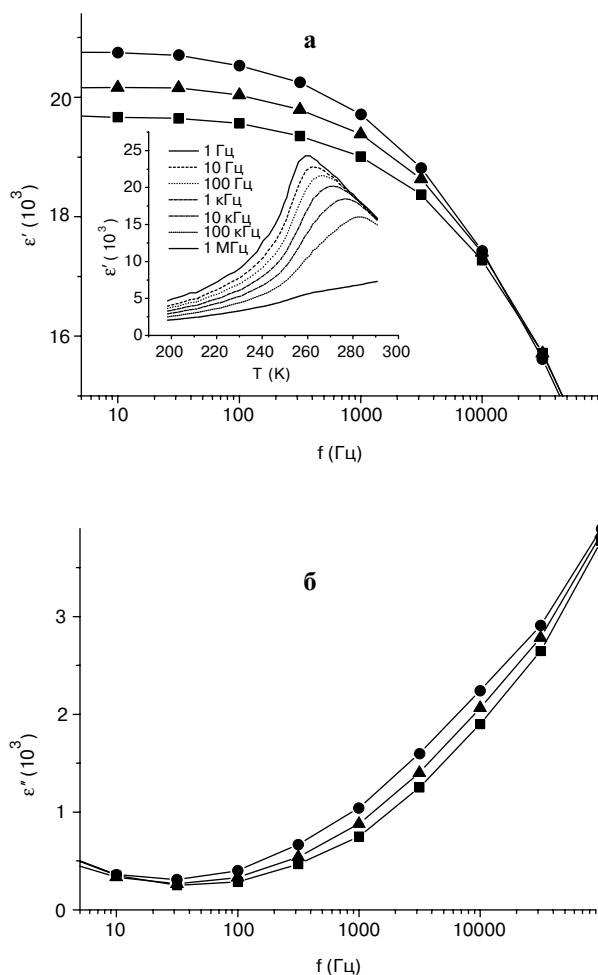


Рис. 6. Частотная зависимость реальной, $\epsilon'(f)$ (а), и мнимой, $\epsilon''(f)$ (б), частей диэлектрической проницаемости для монокристаллов PMN свинца при температуре 270 K: ● до освещения, ■ после освещения УФ светом, ▲ после ИК облучения. На вставке в а приведена температурная зависимость реальной, $\epsilon'(f)$, части диэлектрической проницаемости для частот 1, 10, ..., 10^6 Гц.

сы длин волн в УФ области ($\lambda \approx 350\text{--}450$ нм). После снятия освещения и стабилизации температуры при 270 K снова измерялась диэлектрическая проницаемость при различных частотах (рис. 6б). После этого проводилось повторное освещение образца, но теперь уже широким световым спектром в ИК области вблизи длины волны 1 мкм (рис. 6б). Из полученных результатов видно, что УФ свет приводит к существенному понижению как реальной, так и мнимой частей диэлектрической проницаемости, а ИК свет оказывает частичное восстанавливающее воздействие. Существенным является тот факт, что воздействие освещения приводит не к увеличению, а к уменьшению мнимой части диэлектрической проницаемости. Это означает, что наблюдаемые эффекты нельзя отнести к возрастанию проводимости образцов. Аналогичные результаты были получены и для других температур, при этом процедура измерений всегда повторялась, начиная с отжига при высокой температуре. Наибольший эффект достигается в области максимума реальной части диэлектрической проницаемости. Эффект сохраняется достаточно долго (как минимум в течение дня), а также проявляется и при более низких температурах по сравнению с температурой освещения. На рис. 7 приведено температурное поведение реальной части диэлектрической проницаемости для различных частот после освещения УФ светом при температуре 263.5 K и последующего охлаждения. Для сравнения приведены значения диэлектрической проницаемости для неосвещенного образца. При последующем нагреве образца до температуры освещения мы получили те же значения диэлектрических постоянных, которые были получены непосредственно после освещения. При нагреве образца выше комнатной температуры ($T \approx 400$ K) эффект достаточно быстро исчезает.

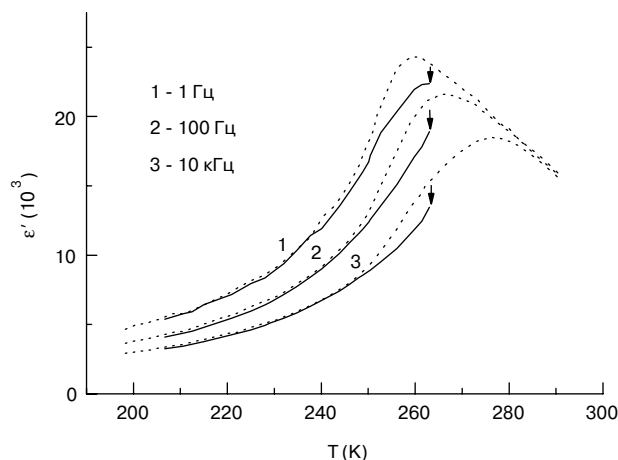


Рис. 7. Температурная зависимость реальной части, $\epsilon'(f)$, диэлектрической проницаемости для различных частот до освещения (пунктирная линия) и после освещения (сплошная линия) УФ светом при температуре 263.5 K. Для сравнения пунктирными линиями приведены значения диэлектрической проницаемости для этих же частот, измеренных до взаимодействия освещения.

Обсудим электронные свойства дефектной подсистемы, которые могут проявиться в релаксорном поведении. Значение энергии активации и энергетический интервал между областью локализации носителей заряда на дефектах и зоной проводимости хорошо согласуются между собой. Эти же значения дают хороший результат при получении температурной зависимости функции распределения времен релаксации [8], которая часто обсуждается при интерпретации экспериментов в релаксорах. Из спектров фотопроводимости следует, что мы имеем систему уровней с достаточно широким распределением по энергиям. Это также коррелирует с представлениями о связи широкого распределения времен релаксации с широким распределением плотности дефектных состояний по энергиям. Из данных работы [8] по люминесценции в PMN можно сделать вывод, что температурная область локализации носителей находится вблизи температуры фазового перехода. Еще одним косвенным фактом в пользу связи дефектной подсистемы с релаксорным поведением является плотность дефектов в образцах. Из наших данных по релаксации фотоэлектрических состояний в PMN и из данных для других образцов ее можно оценить как 10^{18} – 10^{19} см⁻³. Это соответствует расстоянию между дефектами 3–10 нм, что хорошо совпадает с размерами нанобластей неоднородности поляризации, наблюдаемых в экспериментах других авторов. Поэтому можно предположить, что неоднородности поляризации возникают за счет закрепления направления вектора поляризации на дефектах.

Важнейшими результатами, проявляющими взаимосвязь поведения релаксоров с дефектной подсистемой, являются данные по фотостимулированному изменению диэлектрических свойств. Обнаружение значительного фотостимулированного изменения диэлектрической проницаемости свидетельствует в пользу важности учета динамики перезарядки дефектов при обсуждении природы релаксоров. Влияние освещения на фазовые переходы в сегнетоэлектриках наблюдалось и ранее [9]. Однако это проявлялось в виде сдвига температуры фазового перехода и наблюдалось только в условиях освещения образца. В нашем случае отличительной чертой является то, что мы наблюдаем эффект влияния освещения после выключения освещения и он проявляется в существенном изменении значения диэлектрических параметров.

В последние годы особый интерес в различных областях науки проявляется к исследованию сложных систем, состоящих из нескольких подсистем. Появился

новый раздел науки – синергетика. В нашем случае, воздействуя на одну из подсистем – электронную подсистему дефектов, удастся изменять свойства другой подсистемы – решеточной, причем эти изменения записываются системой в целом. Таким образом, релаксоры являются примером синергетического поведения, связанного с возникновением пространственно неоднородных состояний.

Настоящие исследования не претендуют на окончательное решение вопроса о природе релаксорного поведения, тем не менее, дают конкретные ориентиры для дальнейших исследований с целью как определения физических основ релаксорного поведения, так и обнаружения новых свойств этих материалов. Одно из таких свойств, фотостимулированное изменение диэлектрической проницаемости, обнаружено нами и представлено в данной работе.

Таким образом, проведены исследования спектральной зависимости фотопроводимости, фотостимулированных токов, возникающих в отсутствие внешнего напряжения, и фотостимулированного изменения диэлектрических свойств на монокристаллах PMN. На основе полученных данных выявлена структура плотности состояний дефектных уровней и обсуждена возможность участия этих состояний в формировании размытого фазового перехода в релаксорах. Показано, что путем светового воздействия на электронные свойства дефектной подсистемы можно изменять диэлектрические свойства релаксоров.

Авторы благодарны Г. Б. Тейтельбауму за полезные обсуждения результатов работы. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 01-02-16350).

Литература

1. Смоленский Г.А., Исупов В.А., Аграновская А.И., Попов С.Н.: ФТТ **3**, 895 (1961)
2. Blinc R., Dolinsek J., Gregorovic A., Zalar B., Filipic C., Kutnjak Z., Levstik A., Pirc R.: Phys. Rev. Lett. **83**, 424 (1999)
3. Glazounov A.E., Tagantsev A.K.: Phys. Rev. Lett. **85**, 2192 (2000)
4. Westphal V., Kleemann W., Glinchuk M.D.: Phys. Rev. Lett. **68**, 847 (1992)
5. Трепаков В.А., Крайник Н.Н., Олифир А.В.: ФТТ **18**, 1751 (1978)
6. Гладкий В.В., Кириков В.А., Нехлюдов С.В., Волк Т.Р., Ивлева Л.И.: Письма в ЖЭТФ **71**, 38 (2000)
7. Мамин Р.Ф.: Письма в ЖЭТФ **58**, 534 (1993)
8. Mamin R.F., Migachev S.A., Nikitin S.I., Sadykov M.F., Zverev D.G.: Ferroelectrics **296**, 157–167 (2003)
9. Фридкин В.М.: Фотосегнетоэлектрики. М.: Наука 1979. 287 с.

Исследование фазового расслоения манганита $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ по изменению упругих свойств

Х. Г. Богданова, А. Р. Булатов, В. А. Голенищев-Кутузов, А. В. Капралов

Лаборатория магнитоакустики

Исследованы температурные зависимости амплитуды и скорости ультразвуковых волн на частоте 770 МГц в монокристалле манганита $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$). Обнаружена генерация магнитоупругой волны вблизи магнитного фазового перехода. Сопоставимость зависимостей намагнитченности и магнитострикции от температуры с характером изменения амплитуды и скорости магнитоупругой волны позволяет полагать, что генерация когерентных магнитоупругих колебаний происходит на микронеоднородностях (магнитоупругих доменах), присущих манганиту данного состава.

Введение

В последние годы большое внимание было обращено на различного вида нано- и микроразмерные неоднородные состояния, связанные со спиновым, зарядовым или орбитальным упорядочением. По-видимому, наибольшее разнообразие таких неоднородностей, и особенно микроскопического размера, может существовать в манганитах лантана с содержанием ионов Sr в пределах 0.12–0.18. Причиной этого может быть конкуренция различных магнитных и структурных состояний. На возможность существования микроструктур в данном диапазоне концентраций ионов Sr было указано в работе Т. В. Дарлинга с соавторами [1], в которой было предположено, что микроструктуры возникают в ромбоэдрической фазе, где образуются малые области с одинаковым ромбоэдрическим искажением, отличным от исходной кубической структуры. На границах структурных неоднородностей возникают упругие напряжения, что позволяет отнести их к структурным упругим доменам [2]. Существование неоднородных состояний в манганитах было подтверждено в экспериментах по спектрам ЯМР ^{55}Mn [3], ферромагнитного резонанса [4], нейтронной дифракции [5]. В последнее время наиболее распространенной является модель, в которой ответственным за неоднородные состояния является фазовое расслоение, связанное с возникновением области сосуществования различных магнитных или структурных фаз в определенных концентрационных или температурных диапазонах.

Дополнительные возможности по изучению различных неоднородностей спинового и зарядового упорядочения имеют ультразвуковые (УЗ) исследования. Во-первых, скорости УЗ волн зависят от характера упругих и магнитоупругих (МУ) взаимодействий, которые значительно изменяются при фазовых переходах. Во-вторых, использование высокочастотных УЗ колебаний, когда размеры неоднородностей соответствуют длине УЗ волны, дает возможность изучения неоднородных и многофазных образований в манганитах.

Результаты и обсуждение

Мы исследовали скорость и затухание продольных УЗ волн в зависимости от температуры в диапазоне $T = 260$ – 340 К на частоте 770 МГц. Для эксперимента был выбран $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$, поскольку этот состав обладает наиболее богатой фазовой диаграммой, для него наблюдалось наибольшее значение колоссального магнетосопротивления (КМС) и температура Кюри для данного состава близка комнатной ($T_c = 282$ К), что дает возможность его практического использования.

На основании экспериментальных данных, представленных на рис. 1 и 2, следует выделить два температурных интервала, в которых происходят значительные изменения затухания и скорости продольных УЗ волн. Изменения в интервале $T = 295$ – 310 К связаны с частичным переходом кристаллической решетки от ромбоэдрической к орторомбической фазе. Изменения амплитуды и скорости в районе $T < 282$ К вызваны магнитным фазовым переходом в ферромагнитную фазу, что подтверждается и магнитными измерениями [6].

Также с $T = 305$ К, помимо импульса квазипродольной волны, регистрируется новый УЗ импульс. Фазовая скорость его распространения, определенная по времени прохождения через образец, варьирует в пределах $V_t = 2.5$ – 2.9 км/с и зависит от температуры (рис. 2б). По влиянию температуры и магнитного поля на значение скорости данной моды ее можно отнести к магнитоупругой волне, распространяющейся со скоростью, близкой к квазипоперечной волне.

Обнаруженная модовая трансформация, как следует из работы [7], наиболее эффективно может возникать за счет смещения доменных границ магнитоупругих доменов или изменения их размеров (механизм магнитострикции). Для частоты $f = 7.7 \cdot 10^8$ Гц длина акустических волн укладывается в диапазон нескольких мкм, т.е. эффективное преобразование акустических волн в МУ волну, в принципе, может происходить на наноструктурах порядка сотен и тысяч ангстрем при распространении акустических волн с различной поляризацией вдоль раз-

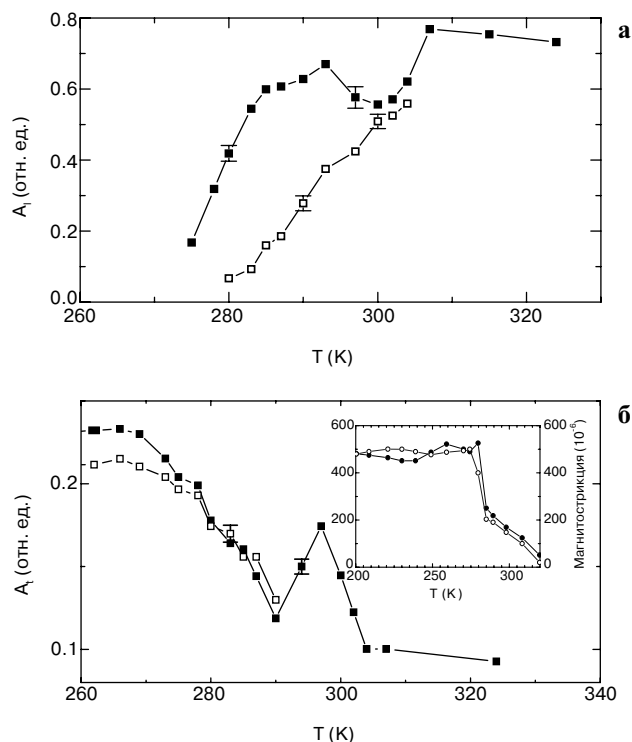


Рис. 1. Температурные зависимости амплитуды продольной A_l (а) и поперечной A_t (б) мод ультразвуковых колебаний, полученные в нулевом магнитном поле (■) и поле 1 Тл (□). На вставке приведена температурная зависимость магнитострикции, полученная в образце $\text{La}_{0.83}\text{Sr}_{0.17}\text{MnO}_3$ в нулевом магнитном поле (●) и поле 1 Тл (○) [8].

личных направлений в кристалле. Если предположить, что в образце при определенных концентрационных и температурных условиях возникают микроскопические неоднородности, попадающие по размерам в спектр магнитоакустических колебаний, то на выходе образца возможно распространение двух видов акустических волн, испытывающих трансформацию вследствие магнитоупругого взаимодействия. Дополнительное доказательство предложенной модели можно найти в температурном процессе магнитострикции, поскольку МУ взаимодействие пропорционально магнитострикции, температурное поведение которой было изучено в работе [8]. Можно полагать, что обнаруженное возрастание магнитострикции в этой работе от нулевых значений при $T \geq 300$ К до $5 \cdot 10^{-4}$ при $T \leq 260$ К для образца аналогичного состава ($x = 0.17$), вызванное увеличением объема ферромагнитной фазы, может приводить к эффективной генерации МУ волн на неоднородностях. Такому возрастанию магнитострикции соответствует изменение ско-

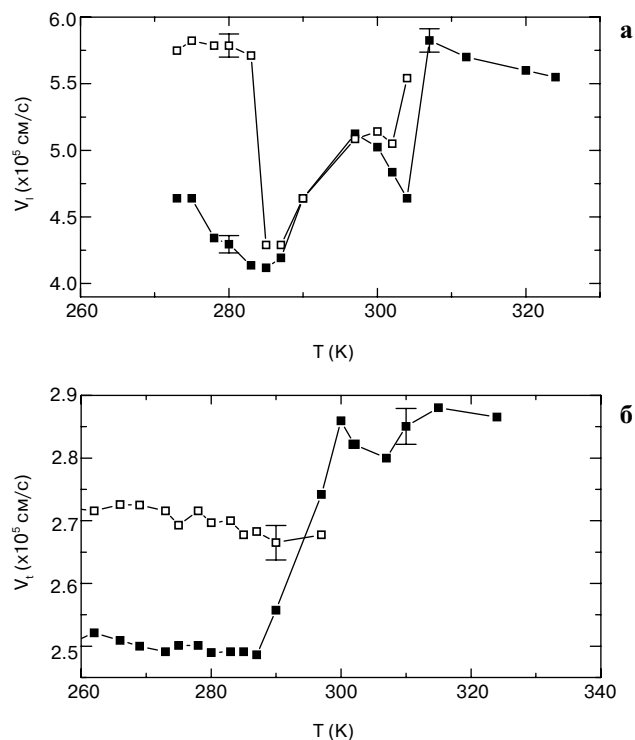


Рис. 2. Температурные зависимости скорости продольной V_l (а) и поперечной V_t (б) мод ультразвуковых колебаний, полученные в нулевом магнитном поле (■) и поле 1 Тл (□).

ростей ультразвуковых волн, которые также пропорциональны величине МУ взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-02-16440) и фонда НИОКР Республики Татарстан (проект № 06-6.1-146).

Литература

1. Darling T.W., Migliori A., Moshopoulou E.Y., Traugman S.A., Neumeier I.I., Sarra J.L., Bishop A.R., Thompson J.D.: Phys. Rev. B **57**, 5093–5097 (1998)
2. Dagotto E.: Nanoscale phase separation and colossal magnetoresistance. Berlin: Springer 2003. 448 p.
3. Dagotto E., Hotta T., Moreo A.: Phys. Rep. **344**, 1 (2001)
4. Виглин Н.А., Наумов С.В., Муковский Я.М.: ФТТ **43**, 1855–1863 (2001)
5. Yamada Y., Hino O., Nohdo S.: Phys. Rev. Lett. **77**, 904 (1996)
6. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Елохина Л.В., Капралов А.В., Королев А.В., Нейфельд Э.А., Шакирзянов М.М.: ФТТ **45**, 284 (2003)
7. Туров Е.А., Луговой А.А.: ФММ **50**, 903 (1980)
8. Asamitsu A., Moritomo Y., Kutai R.: Phys. Rev. B **54**, 1716 (1996)

Времяразрешенная фононная регистрация оптических спектров поглощения в примесных кристаллах

А. М. Шегеда, В. Н. Лисин

Лаборатория магнитоакустики и лаборатория нелинейной оптики

Изучена временная эволюция спектров возбуждения фононов, которые генерируются за счет безызлучательных переходов из состояний, возбужденных лазерным импульсом в $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$. Впервые зарегистрированы линии поглощения, “скрытые” в неоднородной ширине R_1 - и R_2 -линий. Кроме того, предлагаемым нами методом были получены предварительные результаты по исследованию спектров оптического поглощения в системах $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$ и $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Ho}^{3+}$.

Введение

Известно, что система может переходить из возбужденного состояния в энергетически более низкие состояния как с излучением фотонов (излучательные переходы), так и с излучением фононов (безызлучательные переходы). Таким образом, частоты переходов, на которых происходит резонансное поглощение света (оптические спектры поглощения), можно регистрировать, наблюдая или за фотонами (измеряя пропускание или люминесценцию), или наблюдая за излученными фононами. В частности, фононы можно детектировать по изменению температуры сверхпроводящего болометра, напыленного на одну из граней образца. Пройдя через образец, данные фононы, попадая в болометр, быстро приходят в равновесие с электронной подсистемой и нагревают болометр. Время нагрева, т. е. инерционность болометра, определяется теплоемкостями электронной и фононной подсистем и временем пролета фононов через болометр и составляет в наших экспериментах 30 нс для индиевого болометра и 20 нс для болометра из олова. В предыдущем году нами было показано [2], что в рубине спектры возбуждения фононов, зарегистрированные болометром, хорошо совпадают с известными оптическими спектрами как одиночных ионов хрома, так и пар ближайших соседей. Кроме того, в [2] также наблюдалась резонансная передача энергии от одиночных ионов к парам четвертых ближайших соседей. В настоящей работе учтена малая инерционность болометра и изучена временная эволюция спектров возбуждения фононов в режиме реального времени после действия лазерного импульса в рубине.

Эксперимент

Схема эксперимента приведена на рис. 1. На одну из боковых граней образца напылялся сверхпроводниковый болометр из In или Sn в форме меандра площадью $S = 3 \text{ мм}^2$, с помощью которого регистрировался поток неравновесных тепловых фононов, возникающих при

прохождении лазерного излучения через образец. Измерения проводились при температуре 2 К. С помощью внешнего магнитного поля рабочая точка болометра устанавливалась в нижней части линейного участка сверхпроводящего перехода. Перестраиваемый лазер на красителе работал с частотой 12.5 Гц при длительности импульсов $\tau \sim 8 \text{ нс}$ с полушириной $\Delta\lambda \sim 0.1 \text{ Å}$. В качестве красителей в диапазоне длин волн от 6900 до 7100 Å использовался оксазин 1, в диапазоне длин волн от 6300 до 6800 Å – оксазин 17, в диапазоне длин волн от 5700 до 6100 Å – смесь красителей родамин 6Ж и родамин С. Калибровка длины волны излучения лазера осуществлялась по известным спектрам поглощения примесных центров [3]. Весь процесс измерений (регистрация сигнала, его накопление и обработка, изменение длины волны лазера) был автоматизирован.

Спектры возбуждения фононов в рубине

Спектры возбуждения фононов вблизи R_2 - и R_1 -линий, измеренные при различных временных задержках после действия лазерного импульса, приведены на рис. 2 и 3, соответственно. При возбуждении в окрестности R_2 -линии (рис. 2) при коротких временах задержки, совпадающих с приходом баллистических продольных и попе-

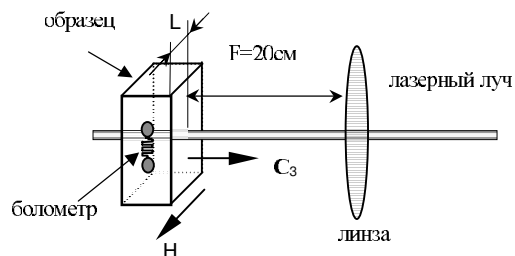


Рис. 1. Геометрия эксперимента. L – расстояние между лазерным лучом и болометром, H – направление внешнего постоянного магнитного поля, C_3 – оптическая ось кристалла (для образцов рубина и трифторида лантана).

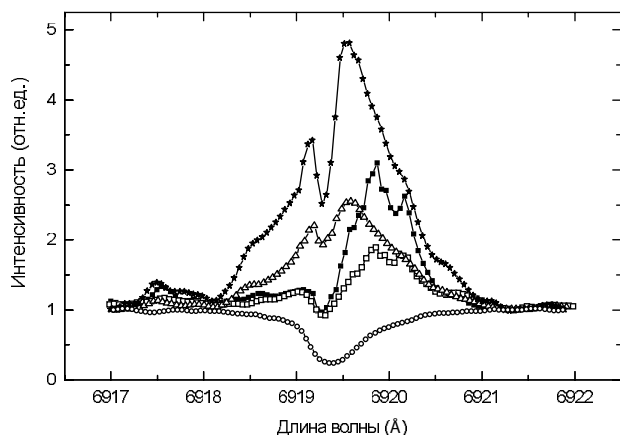


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания лазерного импульса и спектра возбуждения фоонов от длины волны в рубине (0.16 ат.% Cr^{3+}) вблизи R_2 -линии при $L = 2.5$ мм и различных временах задержки после действия лазерного импульса: ■ – 3 мкс; □ – 2 мкс; Δ – 0.5 мкс; ★ – 0.25 мкс; ○ – проходящий свет.

речных фоонов, регистрируется интенсивная генерация фоонов частотой 29 см^{-1} . При этом максимум фоновой частоты ($\lambda = 6919.54 \text{ Å}$) смещен в сторону больших длин волн относительно “провала” ($\lambda = 6919.26 \text{ Å}$), связанного с поглощением лазерного импульса в образце. При увеличении времени задержки, этот максимум исчезает, но появляются два новых пика с $\lambda = 6919.85 \text{ Å}$ и $\lambda = 6920.17 \text{ Å}$. Эти линии расположены в длинноволновом крыле R_2 -линии.

Еще более любопытная картина наблюдается в области R_1 -линии (рис. 3). Уже при небольшой задержке 0.5 мкс возникает [1] хорошо разрешенная линия четвертых ближайших соседей $^4\text{H}_3$, отстоящая от R_1 -линии на 1.1 Å . При увеличении задержки в спектре появляются две новые линии, о которых нет никаких данных в

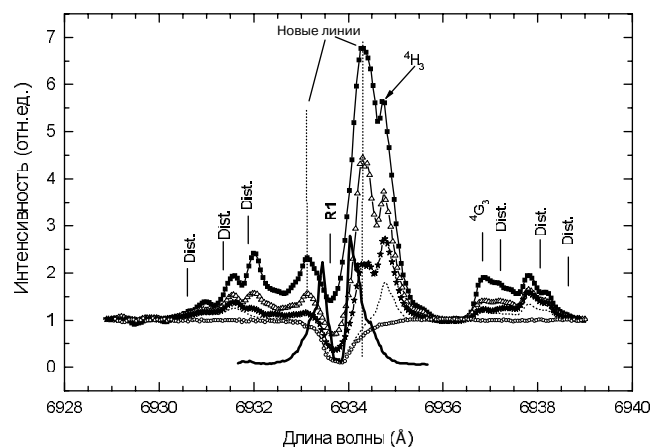


Рис. 3. Зависимость коэффициента пропускания лазерного импульса и спектра возбуждения фоонов от длины волны в рубине (0.16 ат.% Cr^{3+}) вблизи R_1 -линии при $L = 2.5$ мм и различных временах задержки после действия лазерного импульса: ○ – проходящий свет; ■ – 4 мкс; Δ – 3 мкс; ★ – 2 мкс; пунктир – 0.5 мкс. Сплошная линия показывает интенсивность обращенного двухимпульсного светового эха (время задержки между импульсами 30 нс). Остальные обозначения – из [4].

литературе. Одна из них с $\lambda = 6933.13 \text{ Å}$ находится на графике левее R_1 -линии, а другая, очень интенсивная, с $\lambda = 6934.3 \text{ Å}$ – правее. Из разных литературных данных следует, что уровень $^4\text{I}_3$ либо практически совпадает с $\bar{E}$ [4], либо лежит выше на 0.5 см^{-1} [5, 6]. У нас разница в энергии между линией с $\lambda = 6933.13 \text{ Å}$ и R_1 -линией составляет почти 1 см^{-1} . Кроме того, в отличие от $^4\text{G}_3$ - и $^4\text{H}_3$ -линий, эта линия не наблюдается при задержке 0.5 мкс. Поэтому для утверждения, что $\lambda = 6933.13 \text{ Å}$ есть линия пар $^4\text{I}_3$, нет больших оснований. Самым непонятным является появление фоновой линии с $\lambda = 6934.3 \text{ Å}$. При задержке меньшей, чем 1 мкс, эта линия вообще не наблюдается, а затем очень быстро растет с увеличением задержки, т.е. на этой длине волны происходит эффективная фоновая генерация, задержанная по времени. Поскольку R_1 -линия является бесфононной, а временная зависимость интенсивности фоновой линии при $\lambda = 6934.3 \text{ Å}$ резко отличается от аналогичных пиков находящихся рядом линий четвертых соседей $^4\text{G}_3$ и $^4\text{H}_3$ (а также третьих и удаленных соседей), мы считаем, что нами обнаружена новая линия, скрытая в неоднородной ширине R_1 -линии. Косвенным подтверждением того, что эта линия принадлежит одиночным ионам хрома, служит тот факт, что почти на таком же расстоянии от R_2 -линии также наблюдается фоновый пик (см. рис. 2). На рис. 3 также приведена зависимость от длины волны сигнала обращенного светового эха (СЭ) при задержке между лазерными импульсами $t_{12} = 30 \text{ нс}$. Провал в сигнале СЭ связан с сильным резонансным поглощением второго импульса, дважды прошедшего через образец. Видно, что четвертые ближайшие соседи ($^4\text{H}_3$) не оказывают практически никакого влияния на сигнал СЭ. В тоже время заметно некоторое влияние новых центров с $\lambda = 6933.13$ и 6934.3 Å , сказывающееся на форме подъема и спада зависимости от длины волны сигнала СЭ. Это, на наш взгляд, опять-таки свидетельствует в пользу того, что эти две линии принадлежат одиночным ионам хрома. Спектры возбуждения флуоресценции, качественно подобные нашим спектрам возбуждения фоонов, наблюдались в работе [7] при задержке 5 мкс в рубине с 0.51 ат.% Cr^{3+} при 6 К в области R_1 – R_2 линий. Было предположено [7], что новые линии возбуждения флуоресценции в окрестности R-линий связаны с R' -ионами. Эти ионы [7] не являются ни хорошо изолированными, ни сильно связанными в триплет. Они сильно связаны с парами и слабо связаны с изолированными R-ионами. В [7] линии, подобные наблюдаемым у нас линиям с $\lambda = 6920.17$ и 6934.3 Å , являлись линиями возбуждения N_2 -флуоресценции (четвертые ближайшие соседи), а аналогичные линии с $\lambda = 6933.13 \text{ Å}$ – N_1 -флуоресценции (третьи ближайшие соседи).

Спектры возбуждения фоонов в $\text{LaF}_3:\text{Pr}^{3+}$

Аналогичные измерения были проведены в кристалле LaF_3 с примесями Pr^{3+} вблизи области частот $^1\text{D}_2$. На

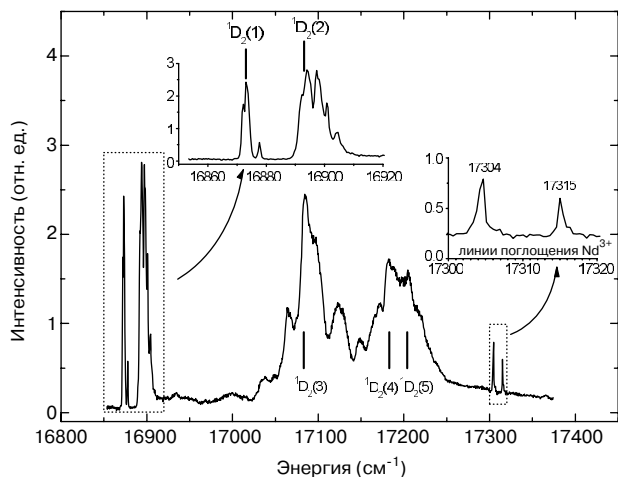


Рис. 4. Зависимость спектра возбуждения фононов от длины волны в трифториде лантана (1 ат.% Pr^{3+}) при $L = 2$ мм. Время задержки после действия лазерного импульса равно 2 мкс. Прямые отрезки показывают положение всех ${}^1\text{D}_2$ -линий, приведенное в работе [8]. На правой вставке показаны линии неконтролируемых примесей Nd^{3+} , хорошо совпадающие с данными [3].

наблюдаемых спектрах возбуждения фононов (см. рис. 4) наряду с линиями поглощения ${}^1\text{D}_2$ хорошо видны две линии (17304 и 17315 cm^{-1}) из многообразия ${}^4\text{G}_{5/2} + {}^2\text{G}_{7/2}$ неконтролируемых примесей Nd^{3+} . О высокой чувствительности используемого метода говорит и то, что вместе с пятью основными линиями ${}^1\text{D}_2$ хорошо разрешены и сателлитные линии. Природа сателлитных линий (принадлежат они одиночным ионам или парам ближайших соседей, или связаны с антистоксовыми переходами) выясняется.

Спектры возбуждения фононов в $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Ho}^{3+}$

Метод фононной регистрации оптических спектров блестяще проявил себя при изучении образцов форстерита с примесями Ho^{3+} (рис. 5). Многие линии поглощения, практически “потерянные” в шуме в спектре пропускания, прекрасно видны на спектре возбуждения фононов. В литературе отсутствуют данные о спектре оптического поглощения ионов Ho^{3+} в форстерите. Можно надеяться, что измерения, проведенные при различных ориентациях поляризации лазерного импульса относительно кристаллографических осей, помогут установить штарковскую структуру мультиплета ${}^5\text{F}_5$ иона Ho^{3+} в форстерите.

Выводы

Измерение спектров поглощения с помощью импульсного перестраиваемого лазера имеет ряд очевидных преимуществ по сравнению с традиционными методами. Во-первых, отпадает необходимость в светосиль-

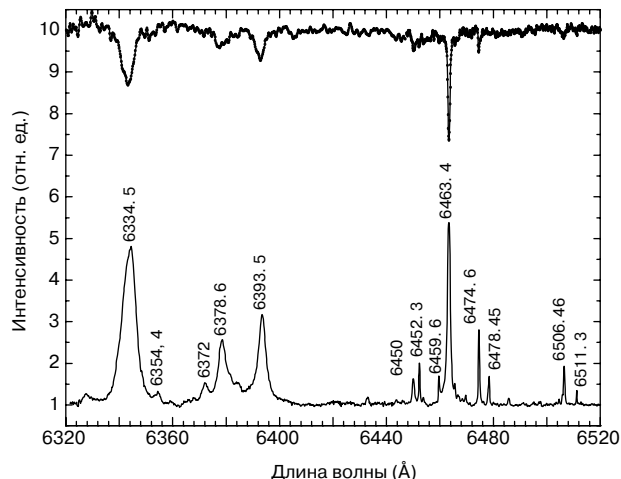


Рис. 5. Зависимость пропускания лазерного импульса (верхний спектр) и спектра возбуждения фононов (нижний спектр) от длины волны в образце $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Ho}^{3+}$ при $L = 1$ мм. Время задержки после действия лазерного импульса равно 1.5 мкс. Поляризация лазерного импульса параллельна a -оси кристалла.

ном монохроматоре. Во-вторых, большая мощность P лазерного импульса позволяет существенно расширить динамический диапазон измеряемых сигналов, а небольшая спектральная ширина импульса обеспечивает высокое разрешение спектров поглощения (у нас $P \sim 7$ кВт, $\Delta\lambda \sim 0.1$ Å). Однако существенным недостатком является нестабильность амплитуды лазерных импульсов. В какой-то мере эта проблема решается накоплением исследуемых сигналов. Однако увеличение числа накоплений приводит к соответствующему росту времени записи спектров, что в ряде случаев нежелательно, особенно при работе при гелиевых температурах. Поэтому в наших измерениях обычно $n = 30$, что являлось разумным компромиссом, если спектральный диапазон исследуемых сигналов составлял 100–200 Å, а шаг стробирования был 0.05–0.2 Å. Тем не менее, повышенный уровень шума в импульсной методике приводит к тому, что слабые линии поглощения могут “утонуть” в шуме, если интенсивность сигнала меняется меньше, чем на 1%, например, при низкой концентрации примесей. В этих условиях становятся очевидными преимущества фононной регистрации спектров поглощения. Измерения, проведенные нами в различных образцах показывают, что, как правило, при слабом поглощении относительное изменение фононного сигнала существенно превышает относительное изменение сигнала пропускания. Например, в кристалле $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Ho}^{3+}$ на линиях с коэффициентом пропускания ~ 0.98 фононный сигнал возрастал почти в два раза, поэтому все зарегистрированные таким образом “слабые” линии поглощения легко выделялись из шума.

Данный метод позволяет регистрировать эволюцию спектров возбуждения фононов на наносекундной временной шкале. Как было продемонстрировано выше, это

позволяет выделять примесные центры, линии поглощения которых замаскированы неоднородной шириной основных линий.

Благодарности

Авторы благодарят В. Ф. Тарасова за предоставленный образец форстерита. Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ (№ 00-02-16510, № 01-02-17730, № 02-02-17622), МНТЦ № 2121.

Литература

1. Шереда А.М., Лисин В.Н.: Письма в ЖЭТФ **78**, № 11-12, 1247–1250 (2003)
2. Шереда А.М., Лисин В.Н.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского 2002. Ежегодник, с. 111. Казань: ФизтехПресс 2003.
3. Каминский А.А.: Лазерные кристаллы. М.: Наука 1975. 256 с.
4. Kisliuk P., Chang N.C., Scott P.L., Pryce M.H L.: Phys. Rev. **184**, no. 2, 367–374 (1969)
5. Канская Л.М., Дружинин В.В., Пржевуский А.К.: ФТТ **11**, № 9, 2595–2607 (1969)
6. Montagna M., Nardon G., Pilla O., Viliani G.: J. Phys. C: Solid State Phys. **20**, no. 10, 1563–1571 (1987)
7. Selzer P.M., Huber D.L., Barnett D.D., Yen W.M.: Phys. Rev. B **17**, no. 12, 4979–4996 (1978)
8. Carnall W.T., Fields P.R., Sarup R.: J. Chem. Phys. **51**, no. 6, 2587–2591 (1969)

Субмиллиметровая ЭПР спектроскопия димерных центров Ho^{3+} в синтетическом форстерите

А. А. Коновалов, В. Ф. Тарасов

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом субмиллиметровой ЭПР спектроскопии исследованы парамагнитные центры, образованные примесными ионами Ho^{3+} в синтетическом форстерите. Обнаружено 4 типа примесных центров, образованных ионами Ho^{3+} в форстерите. Для всех центров определены ориентации главных магнитных осей и параметры эффективного спинового гамильтониана. Обсуждается вероятная структура центров.

Данная работа является продолжением исследований парамагнитных центров, образованных примесными ионами Ho^{3+} в монокристаллах синтетического форстерита (Mg_2SiO_4). Мотивация работы и экспериментальная методика изложены в работах [1, 2], где сообщалось об обнаружении 4-х различных центров. Результаты исследования двух центров, которые наблюдались во всех исследованных образцах, приведены в [1, 2]. Эти центры были идентифицированы нами как одиночный ион Ho^{3+} в кристаллографической позиции М2 (1-й центр, спектр рис. 1а), и симметричный димер, состоящий из двух ионов Ho^{3+} , занимающих две позиции М2, лежащие в одной плоскости bc , и магниевой вакансии в по-

зиции М1 между ними (второй центр, спектр рис. 1б). Неожданным результатом оказалось то, что концентрация димеров значительно превышала концентрацию одиночных ионов. Параметры исследованных образцов приведены в [2]. Экспериментальные исследования выполнены на спектрометре, описанном в [3].

В 2003 г. основное внимание уделялось изучению третьего и четвертого центров. Третий тип центров наблюдался только в образцах 1 и 2, выращенных без примеси алюминия, а четвертый – в образцах 3 и 4, содержащих примесные ионы алюминия. Резонансные линии, принадлежащие третьему центру, видны в левой части спектра, представленного на рис. 1в. В правой части этого спектра видны помеченные звездочками узкие линии, принадлежащие одиночному иону Ho^{3+} . Ориентационные зависимости, представленные на рис. 2 и 3, показы-

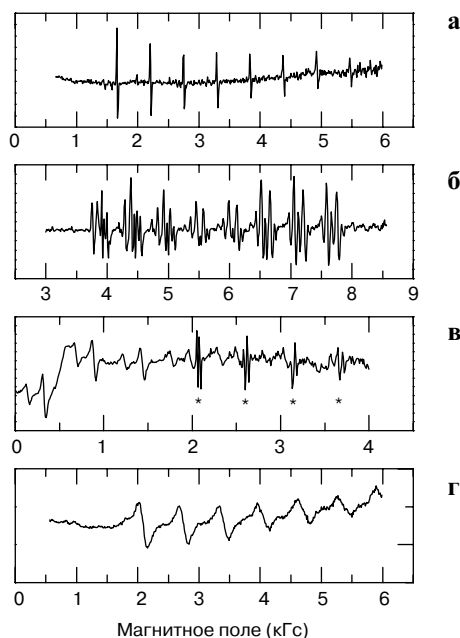


Рис. 1. Спектры ЭПР ионов Ho^{3+} в форстерите при $\mathbf{B}_1 \parallel \mathbf{B}_0$: а первый центр (образец 4, частота $\nu = 80$ ГГц, $\mathbf{B}_0 \parallel b$), б второй центр (образец 2, $\nu = 170$ ГГц, $\mathbf{B}_0 \parallel b$), в третий центр (образец 1, $\nu = 89.5$ ГГц, $\mathbf{B}_0 \parallel b$), г четвертый центр (образец 4, $\nu = 138$ ГГц, $\mathbf{B}_0 \parallel c$). Звездочками на спектре в отмечены линии, принадлежащие одиночному иону Ho^{3+} .

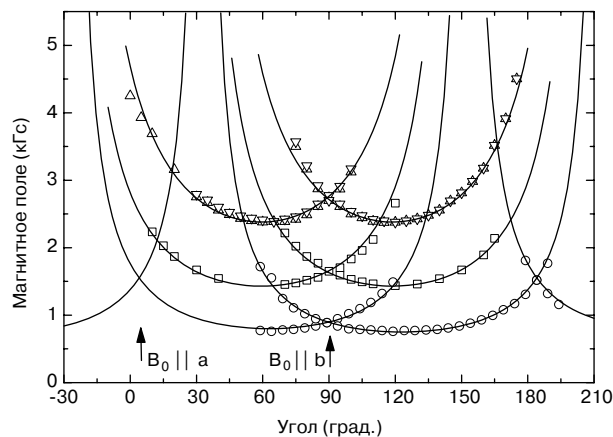


Рис. 2. Ориентационные зависимости резонансных значений магнитного поля для $\mathbf{B}_0$ в плоскости ab для отдельных компонент сверхтонкой структуры $\text{Ho}^{3+}:\text{Mg}_2\text{SiO}_4$. □ – Эксперимент для образца 4 на частоте 80 ГГц для первого центра (одиночный ион Ho^{3+}), Δ – эксперимент для образца 4 на частоте 138 ГГц для второго центра (первый димер), ○ – эксперимент для образца 2 на частоте 89.5 ГГц для третьего центра. Сплошные линии – зависимости вида $B_{\text{ext}}/\cos\theta$, где θ – отклонение текущего направления $\mathbf{B}_0$ от направления, соответствующего эксперименту ориентационной зависимости.

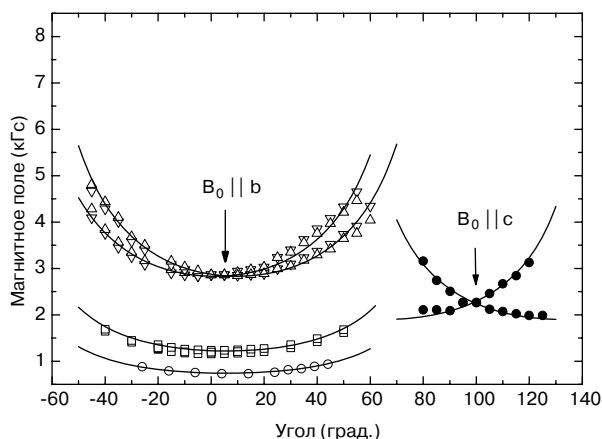


Рис. 3. Ориентационные зависимости резонансных значений магнитного поля для B_0 в плоскости bc для отдельных компонент сверхтонкой структуры $\text{Ho}^{3+}:\text{Mg}_2\text{SiO}_4$. □ Эксперимент для образца 4 на частоте 80 ГГц для первого центра (одиночный ион Ho^{3+}), Δ эксперимент для образца 4 на частоте 138 ГГц для второго центра (первый димер), ○ эксперимент для образца 2 на частоте 89.5 ГГц для третьего центра, ● эксперимент для образца 5 на частоте 140 ГГц для четвертого центра. Сплошные линии – зависимости вида $B_{\text{ext}}/\cos\theta$.

вают, что для этого центра наблюдались две магнитно неэквивалентные позиции. Направления главных магнитных осей этих центров совпадают с соответствующими ориентациями одиночного иона в позиции M2. Поэтому мы полагаем, что данный центр образован примесными ионами гольмия, замещающими ионы магния в кристаллографической позиции M2. Однако ширина и число резонансных линий третьего центра существенно отличаются от соответствующих данных для одиночного иона, что говорит о принадлежности этих резонансных линий другому центру.

Пример экспериментального спектра, принадлежащего четвертому центру, приведен на рис. 1г. Для него наблюдались четыре магнитно неэквивалентные позиции. Экспериментальные ориентационные зависимости резонансных значений магнитного поля для этого центра, представленные кружками на рис. 3 и 4, показывают, что проекции главных магнитных осей этого центра на плоскости bc и ac отклонены от оси c на углы $\pm 33 \pm 5^\circ$ и $\pm 38.5 \pm 1^\circ$, соответственно.

Экспериментальные зависимости резонансных частот от магнитного поля для отдельных сверхтонких компонент спектра, принадлежащего третьему центру, представлены кружками на рис. 5, где приведены также частотно-полевые зависимости для изученных ранее одиночного иона и первого димерного центра. Интенсивность резонансных линий, принадлежащих третьему центру, была значительно меньше интенсивности линий первых двух центров. Поэтому его спектр надежно идентифицируется только на небольшом участке зависимости частота – поле, в той ее части, где не регистрируются сигналы первых двух центров. Видно, что для третьего центра, как и для одиночного иона, наблюдались восемь резонансных переходов. Принципиальное отличие меж-

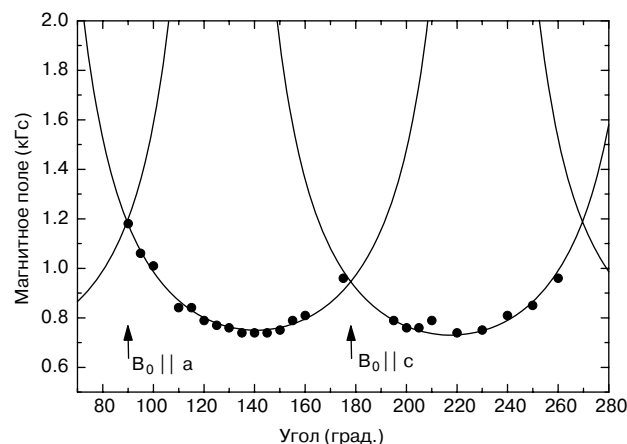


Рис. 4. Ориентационные зависимости низкополевых компонент сверхтонкой структуры четвертого центра $\text{Ho}^{3+}:\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ для B_0 в плоскости ac на частоте 126 ГГц для образца 4. Точки – эксперимент, сплошные линии – зависимости вида $B_{\text{ext}}/\cos\theta$.

ду этими спектрами состоит в том, что расстояния между сверхтонкими компонентами одиночного иона равны между собой, в то время как для третьего центра расстояния между линиями разные. В нем можно выделить две группы из четырех линий с равными расстояниями между линиями в каждой группе. Это дает основание полагать, что разные группы принадлежат разным переходам, так как это наблюдалось нами для ранее исследованного димерного центра. Полагая, что третий центр является еще одним димерным центром, мы использовали для теоретического описания полевых зависимостей резонансных частот эффективный спиновый гамильтониан

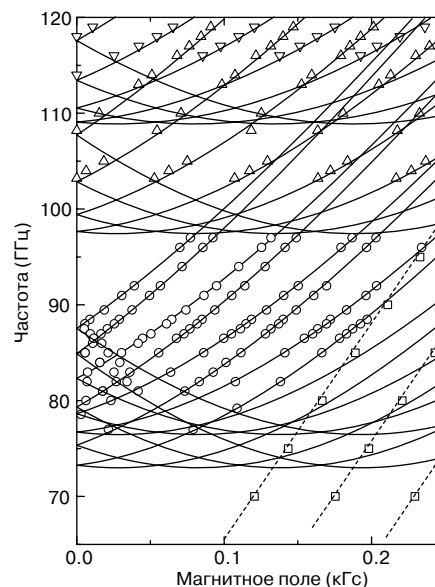


Рис. 5. Зависимость резонансных частот от магнитного поля для сверхтонких компонент спектров трех центров, образованных Ho^{3+} в форстерите при $B_0 \parallel b$. Эксперимент: □ одиночный ион, Δ 1-й димер, ○ третий центр. Сплошные линии – расчет с использованием эффективного спин-гамильтониана (2).

ниан димера, состоящего из двух одинаковых ионов гольмия [4]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 - 2JS_{z1}S_{z2}. \quad (1)$$

Здесь третий член соответствует энергии взаимодействия между ионами в димере, а $\mathcal{H}_i$ ($i = 1, 2$) – эффективный гамильтониан отдельных ионов [5]:

$$\mathcal{H}_i = \Delta S_x + g_z \mu_B B_z S_z + AS_z I_z \quad (2)$$

для эффективного электронного спина $S = 1/2$ и ядерного спина $I = 7/2$. Здесь первый член соответствует начальному расщеплению между электронными уровнями в нулевом магнитном поле, второй – зеемановской энергии электронных уровней, третий – сверхтонкому взаимодействию между электронным и ядерным спинами.

Параметры эффективного спинового гамильтониана (1), полученные для третьего центра, приведены в таблице 1. Для того, чтобы не загромождать рисунок, на рис. 5 сплошными линиями показаны теоретические зависимости, рассчитанные с этими параметрами для части сверхтонких компонент спектра, соответствующих одинаковым значениям I_z для обоих ионов в димере. В этой же таблице приведены для сравнения параметры других центров, образуемых примесными ионами гольмия в форстерите.

При анализе возможных структур второго димерного центра мы должны учитывать следующие обстоятельства:

1. Во втором димере величина спин-спиновой взаимодействия существенно меньше, чем в первом димере. Поэтому можно ожидать, что для него расстояние между ионами Ho^{3+} больше, чем в первом димере. Важно отметить, что второй димер нельзя представить в виде двух одиночных ионов в позиции M2, случайно оказавшихся недалеко друг от друга и связанных спин-спиновым взаимодействием. Для одиночного иона параметр спинового гамильтониана, описывающий расщепление в кристаллическом поле, $\Delta \sim 0$, в то время как для второго димерного центра $\Delta \sim 75$ ГГц, что сравнимо с величиной $\Delta \sim 103$ ГГц для первого димерного центра. Это говорит о том, что параметры кристаллического поля, действующего на примесные ионы второго димера, отличаются от соответствующих параметров для одиночного иона. Мы полагаем, что это

отличие вызвано присутствием локального компенсатора заряда, которым, как и для первого димера, может служить магниевая вакансия.

2. Димер образуют два одинаковых магнитно-эквивалентных иона в позициях M2. В противном случае, количество магнитно-неэквивалентных центров димера отличалось бы от двух. В элементарной ячейке форстерита имеются два магнитно-эквивалентных иона, однако, они расположены в одной плоскости bc . Димер, образованный двумя ионами в позициях M2, находящихся в плоскости bc , изучен ранее [1, 2], его структура представлена на рис. 6 пунктирными линиями. Таким образом, второй димер образован двумя ионами гольмия, расположенными в разных элементарных ячейках.

3. Зарядовый компенсатор, искажающий кристаллическое поле на ионах второго димера, не нарушает зеркальную симметрию в позиции M2, занимаемой примесным ионом. В противном случае, количество магнитно-неэквивалентных центров увеличилось бы до четырех, как это имеет место для первого димера. Сохранение зеркальной симметрии возможно в случае, если компенсатор расположен в плоскости bc , проходящей через позицию M2, которая является зеркальной плоскостью симметрии кристалла.

Расчет энергии диполь-дипольного взаимодействия для возможных структур второго димерного центра, удовлетворяющих вышеперечисленным условиям, показал, что димер состоит из расположенных в одной плоскости ab двух ионов гольмия с магниевой вакансией в позиции M2 между ними. Схематически эта структура показана на рис. 6 сплошной линией.

Для четвертого центра наблюдались спектры от 4-х магнитно-неэквивалентных позиций примесного иона Ho^{3+} в форстерите. Ориентационные зависимости, пред-

Таблица 1. Параметры эффективного спинового гамильтониана для примесных центров Ho^{3+} в форстерите.

Тип центра	Δ (ГГц)	g_z	A (ГГц)	J (ГГц)
Первый центр	0	18.5 ± 0.2	12.3 ± 0.2	
Второй центр	103 ± 1	17.9 ± 0.2	11.8 ± 0.2	11.4 ± 0.5
Третий центр	75 ± 1	18.7 ± 0.2	12.7 ± 0.2	3.5 ± 0.5
Четвертый центр	110 ± 1	18.8 ± 0.5	12.5 ± 0.2	

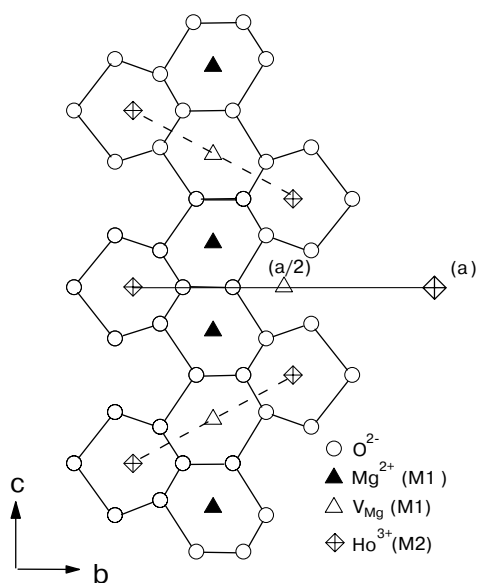


Рис. 6. Структура димеров $\text{Ho}^{3+}\text{-V}_{\text{Mg}}\text{-Ho}^{3+}$ в форстерите. Пунктирная линия – первый димер, сплошная линия – второй димер, числа в скобках указывают расстояние от плоскости рисунка.

ставленные на рис. 3 и 4, показывают, что симметрия кристаллического поля для этого центра принципиально отличается от симметрии поля для первых трех центров, структура которых обсуждалась выше. Поскольку количество магнитно-неэквивалентных позиций в данном случае равно четырем, логично предположить, что четвертый центр образован ионом гольмия, замещающим ион магния в позиции М1.

Изучение частотно-полевых зависимостей сверхтонких компонент спектра показало, что они могут быть описаны эффективным спиновым гамильтонианом для одиночного иона (2). Параметры спинового гамильтониана, наилучшим образом описывающие экспериментальные данные, приведены в таблице 1. На рис. 7 кружками показаны экспериментальные частотно-полевые зависимости для восьми сверхтонких компонент этого центра, полученные при ориентации магнитного поля вдоль кристаллографической оси *c*. Принципиальным отличием частотно-полевых зависимостей, полученных для иона Ho^{3+} в позиции М1 от соответствующих зависимостей, характеризующих одиночный ион Ho^{3+} позиции М2, является наличие начального расщепления между электронными уровнями в нулевом магнитном поле.

Резонансные переходы, связанные с четвертым центром, наблюдались только в двух образцах, дополнительно содержащих примесные ионы Al^{3+} . Ранее в форстерите уже наблюдались димеры, состоящие из примесных ионов Cr^{3+} , замещающих Mg^{2+} , и Al^{3+} , замещающих Si^{4+} [6, 7]. При этом концентрация димеров превышала статистическую для данных концентраций при-

месных ионов. Образованию подобных димеров Cr^{3+} - Al^{3+} благоприятствует то обстоятельство, что при подобном замещении суммарный заряд примесных ионов равен заряду замещаемых ионов, и дополнительной компенсации заряда не требуется. Мы полагаем, что подобный механизм действует и в нашем случае. Примесные ионы Ho^{3+} могут замещать магний в позиции М1 только в случае, если в ближайшей тетраэдрической позиции ион кремния замещается ионом алюминия. Таким образом, наиболее вероятной структурой четвертого центра является димер Ho^{3+} - Al^{3+} , состоящий из ионов гольмия, замещающего Mg^{2+} в позиции М1, и алюминия, замещающего Si^{4+} .

В выполнении данной работы принимали участие А. В. Гайстер, К. А. Субботин и Е. В. Жариков (Научный центр лазерных материалов и технологий Института общей физики РАН, г. Москва и Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, г. Москва).

Авторы благодарят В. А. Шустова за проведение рентгенографических работ. Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 03-02-16374) и фонда НИОКР РТ (№ 06-6.1-143 /2003).

Литература

1. Гайстер А.В., Жариков Е.В., Коновалов А.А., Субботин К.А., Тарасов В.Ф.: Письма в ЖЭТФ 77, № 11, 753–758 (2003)
2. Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Казанский физико-технический институт 2002. Ежегодник, с. 116–119. Казань: ФизтехПресс 2003.
3. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Appl. Magn. Reson. 2, no. 3, 571–576 (1991)
4. Baker J. M., Hutchison Jr. C.A., Martineau P.M.: Proc. Roy. Soc. A 403, 221 (1986)
5. Forrester P.A., Hempstead C.F.: Phys. Rev. 126, 923 (1962)
6. Бершов Л.В., Минеева Р.М., Сперанский А.В., Хафнер С.: ДАН 260, № 1, 191–194 (1981)
7. Bershov L.V., Gaite J.-M., Rager H.: Phys. Chem. Minerals 9, 95–101 (1983)

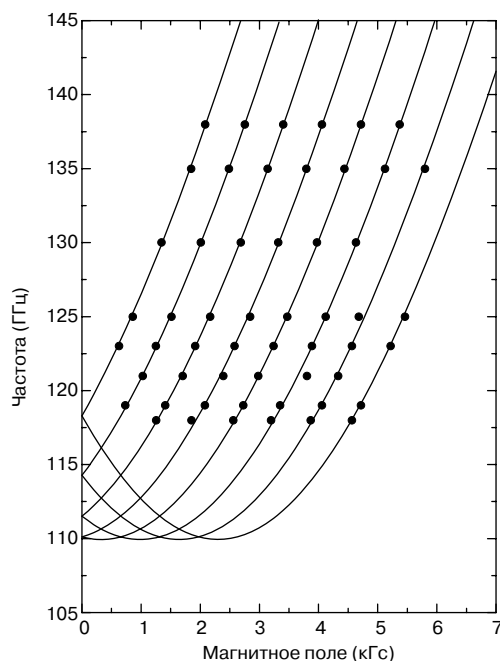


Рис. 7. Зависимость резонансных частот от магнитного поля для сверхтонких компонент спектров одиночного иона Ho^{3+} в позиции М1 в форстерите при $\mathbf{B}_0 \parallel c$. $\circ$ – Эксперимент, сплошные линии – расчет с использованием эффективного спинового гамильтониана (2) и параметров, приведенных в таблице 1.

Низкосимметричные центры Tb^{3+} в двойном хлориде калия-свинца

Г. С. Шакуров

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом широкополосной ЭПР спектроскопии исследовался кристалл двойного хлорида калия-свинца (KPb_2Cl_5), допированный ионами тербия. На основе полученных экспериментальных данных, а также теоретического анализа параметров кристаллического поля установлено, что ион тербия занимает низкосимметричную позицию с семикратной координацией. Сделан вывод, что зарядовая компенсация находится в позиции иона калия на расстоянии $4.35 \text{ \AA}$ от иона тербия. Расчетные величины g -факторов и расщеплений электронных уровней в нулевом магнитном поле находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Обнаружены также дополнительные линии, которые с большой вероятностью можно приписать парному центру. Это обстоятельство позволяет лучше понять процесс лазерной генерации в данном кристалле. В частности, объясняет причину быстрого распада возбужденного состояния 7F_5 через ап-конверсию.

Введение

Одним из перспективных кристаллов для создания лазеров среднего ИК диапазона является двойной хлорид калия-свинца KPb_2Cl_5 с примесями редкоземельных ионов. Кристаллы KPb_2Cl_5 синтезированы в последние годы и на них получены обнадеживающие результаты. В частности, спектроскопическое изучение $KPb_2Cl_5:Dy^{3+}$ выявило, что лазерное излучение при комнатной температуре возможно в широком диапазоне, вплоть до 8 мкм [1]. Кристаллы с примесью неодима и празеодима рассматриваются не только как перспективные лазерные среды ИК диапазона, но и как ап-конверсионные лазеры видимого диапазона [2, 3]. Все это диктует необходимость подробного изучения спектроскопических свойств этих материалов. К настоящему времени, однако, отсутствуют надежные данные о типе кристаллографической позиции, занимаемой активным ионом в кристалле, нет сведений о механизме зарядовой компенсации, симметрии ближайшего окружения. Более того, в разных работах приводятся взаимоисключающие сведения. Для дальнейшего изучения этих кристаллов необходимо привлекать всю совокупность физических методов.

Целью работы являлось исследование кристаллов $KPb_2Cl_5:Tb$ методом ЭПР. Образцы, допированные ионами тербия, проявляют интенсивную люминесценцию в диапазоне $4.4\text{--}5.7 \text{ мкм}$ благодаря переходу из низшего возбужденного состояния 7F_5 в основное состояние 7F_6 [4]. Кроме того, имеется интенсивный канал распада возбужденного состояния 7F_5 через ап-конверсию, причем коэффициент ап-конверсии высок для имеющейся низкой концентрации тербия [5]. Это могло свидетельствовать о наличии парных центров в кристалле, поиск которых осуществлялся в ходе выполнения работы.

Эксперимент

Изучение парамагнитных центров, образованных примесными ионами Tb^{3+} в двойном хлориде калия-свинца, проводилось методом субмиллиметровой ЭПР спектроскопии в диапазоне частот $65\text{--}250 \text{ ГГц}$ на квазиоптическом спектрометре [6]. Эксперименты проводились при температуре образца 4.2 К в геометрии Фогта, соответствующей ортогональной ориентации волнового вектора микроволнового излучения относительно направления внешнего магнитного поля $\mathbf{B}$, создаваемого резистивным электромагнитом в диапазоне $0\text{--}9 \text{ кГс}$. При измерениях угловой зависимости спектров ЭПР образец мог вращаться только в одной плоскости, поэтому вращение проводилось в кристаллографических плоскостях. Вектор микроволнового магнитного поля $\mathbf{B}_1$ во всех случаях был направлен параллельно $\mathbf{B}$. Кристалл был выращен методом Бриджмена с 1% содержанием примесных ионов в шихте. Образец имел форму, близкую к цилиндрической, с диаметром около 8 мм и длиной 15 мм . Оптически прозрачный кристалл желтоватого цвета имел многочисленные трещины. Это обстоятельство свидетельствовало о сильных механических напряжениях в образце.

Результаты

В процессе изучения двойного хлорида калия-свинца было обнаружено три типа спектров ЭПР. Один из них, состоящий из четырех линий разрешенной сверхтонкой структуры ^{159}Tb , изучен подробно. Два других спектра, представляющие собой слабые узкие линии по бокам от первого спектра и широкую линию с малым отношением сигнал/шум, будут предметом дальнейшего исследования. Спектр ЭПР, состоящий из четырех линий, на-

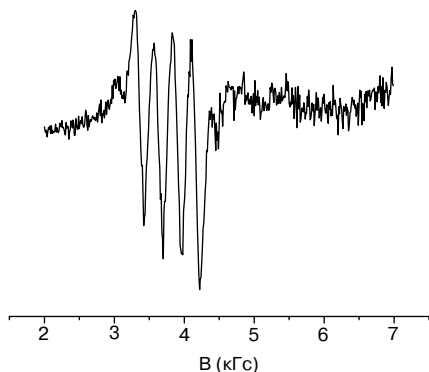


Рис. 1. Вид спектра ЭПР в кристалле $\text{KPr}_2\text{Cl}_5:\text{Tb}$ (1%). Частота 92.4 ГГц. Угол отклонения оси b от направления магнитного поля 20° при вращении в плоскости ab .

блюдался в частотном интервале 74–200 ГГц и магнитных полях 3–9 кГс. На рис. 1 приведен вид спектра, записанный в ориентации, когда ось кристалла b составляла угол примерно 20° с направлением постоянного магнитного поля при вращении в плоскости ab . Для этой же ориентации измерена зависимость частоты резонансных переходов от магнитного поля. Вид зависимости приведен на рис. 2. Полевая зависимость аппроксимируется к расщеплению в нулевом поле около 50 ГГц. Величина g -фактора, равная 16.2, полученная из эксперимента, близка к максимальной величине g -фактора для мультиплета 7F_6 ($g_{\text{max}} = 18$). Можно сделать заключение, что волновые функции двух нижних подуровней состоят, в основном, из следующих собственных векторов $|J = 6, J_z = \pm 6\rangle$ углового момента. Константа сверхтонкого взаимодействия $A_J = (g_J/g)A = 565$ МГц, где фактор Ланде $g_J = 3/2$, близка к сверхтонкой константе свободного иона Tb^{3+} , $A_J = 530$ МГц, что дает прямое подтверждение того, что наблюдаемый спектр принадлежит тербию. На частотах 96.7 и 92.4 ГГц были измерены угловые зависимости спектров ЭПР. Причем спектры регистрировались

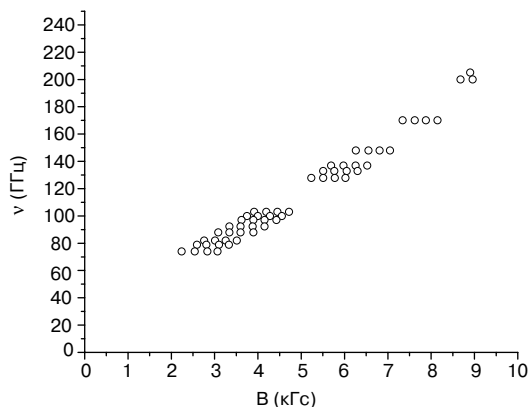


Рис. 2. Зависимость величины резонансных переходов от магнитного поля слабополевой линии сверхтонкой структуры. Ориентация кристалла соответствует отклонению оси b от магнитного поля на 20° при вращении в плоскости ab .

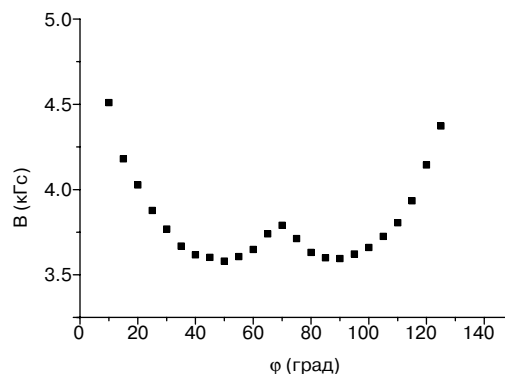


Рис. 3. Угловая зависимость линий ЭПР при вращении кристалла в плоскости ab . Частота 96.7 ГГц, $\mathbf{B} \parallel b$.

только в кристаллографических плоскостях ab и bc (рис. 3 и 4, соответственно). В плоскости ac , являющейся плоскостью симметрии скольжения кристалла, сигналы ЭПР не обнаружены. Из угловых зависимостей видно, что в кристалле существуют магнитно-неэквивалентные центры. Угол между направлением магнитного поля и направлением максимального значения проекции магнитного момента в обоих случаях составляет около 20° . При таком отклонении от магнитного поля линии ЭПР были наиболее интенсивные и узкие, поэтому полевая зависимость спектров измерена именно при этой ориентации. Необходимо отметить, что при небольшом отклонении плоскости вращения от кристаллографических плоскостей вместо четырех линий сверхтонкой структуры тербия появлялось большее количество линий разной интенсивности (см. рис. 5 и 6). Это дало основание предположить, что каждая из линий сверхтонкой структуры является наложением двух линий ЭПР, вызванных ионами симметрично расположенными относительно плоскости вращения. Таким образом, на первый взгляд кажется, что в кристалле существует 4 магнитно-неэквивалентных центра, что находится в противоречии со свойствами симметрии кристалла. Однако дальнейший ана-

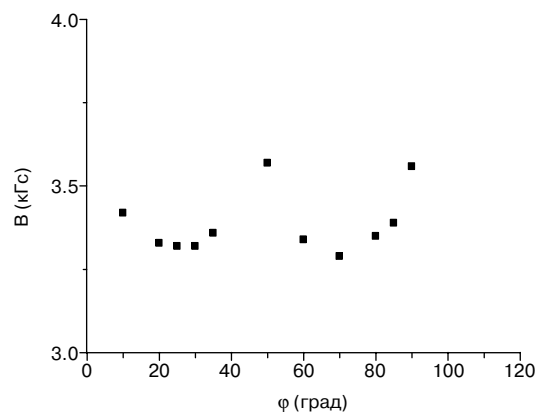


Рис. 4. Угловая зависимость линий ЭПР при вращении кристалла в плоскости bc . Частота 92.4 ГГц, $\mathbf{B} \parallel b$.

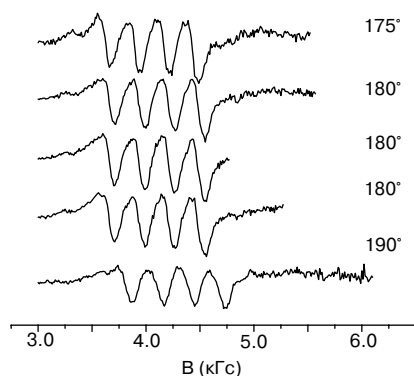


Рис. 5. Вид спектров ЭПР при вращении кристалла в плоскости ab . Частота 96.7 ГГц.

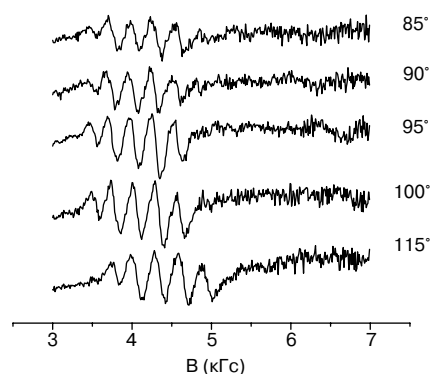


Рис. 6. Вид спектров ЭПР при вращении кристалла в плоскости, близкой к ab . Частота 96.7 ГГц.

лиз литературных данных позволил устранить это противоречие.

Как уже отмечалось, в кристалле наблюдались дополнительные линии, которые, как мы полагаем, принадлежат другим парамагнитным центрам. На рис. 1 и 5 можно заметить по бокам от основного спектра слабые линии. На рис. 5 для одной из ориентаций (относительная шкала лимба 180°) спектр записан три раза и слабые линии воспроизводятся. Кроме этих спутников основного спектра, в диапазоне частот 200–230 Гц наблюдалась слабая широкая линия с малым отношением сигнал/шум. Это обстоятельство не позволило провести подробное изучение этого спектра, хотя полевая зависимость дала возможность оценить величину расщепления около 180 ГГц.

Обсуждение результатов

Моноклинный кристалл KPb_2Cl_5 имеет группу симметрии $P2_1/c$, постоянные решетки равны $a = 0.8854$ нм, $b = 0.7927$ нм, $c = 1.2485$ нм, $\alpha = 90^\circ 05'$ [7]. Ионы свинца, которые могут замещаться редкоземельным ионом, находятся в двух кристаллографически разных позициях. Одна из них имеет координационное число 9 и представляет собой трехшапочную призму, подобную позиции свинца в PbCl_2 . Ее обычно обозначают Pb1. Другая позиция (Pb2) – искаженный октаэдр с одной раздвоенной вершиной, т.е. семикратное окружение ионами хлора, причем один из ионов хлора отстоит от свинца на более дальнее расстояние, чем другие. Эту позицию в литературе часто называют октаэдрической. Обе кристаллографические позиции имеют локальную симметрию C_1 . Для такой симметрии в моноклинном кристалле возможно существование двух магнитно-неэквивалентных спектров. Поскольку в эксперименте наблюдались четыре магнитно-неэквивалентных центра, необходимо было объяснить происхождение дополнительных линий ЭПР. Из недавних публикаций, посвященных рассеянию рентгеновских лучей на этом кристалле, следует, что из-за близости моноклинного угла к 90° кристалл двойникует-

ся с матрицей двойникования $(-100/010/001)$ [7]. Таким образом, спектры, полученные при исследовании угловой зависимости, можно легко объяснить как принадлежащие разным магнитно-неэквивалентным центрам, причем каждая наблюдаемая линия ЭПР является результатом наложения сигналов от истинного и двойникового центра. По оптическим данным замещение редкоземельными ионами происходит, в основном, в октаэдрической позиции [2]. Рассмотрим модель внедрения ионов тербия в позицию Pb2. Из-за неизоморфного замещения Pb^{2+} на Tb^{3+} необходима зарядовая компенсация. Наиболее вероятной представляется ближайшая калиевая вакансия, расположенная на расстоянии 0.435 нм. Образование центра сопровождается смещением примесного иона Tb^{3+} к вакансии и заметным смещением ближайших ионов Cl^- . Поскольку величины смещений ожидаются значительными (до 0.025 нм, как следует из разницы ионных радиусов ионов Tb^{3+} и Pb^{2+}), расчет параметров кристаллического поля может быть выполнен только приближенно. Используя грубую модель деформации решетки, мы рассмотрели смещение иона Tb^{3+} к вакансии на 0.013 нм и радиальные смещения ионов Cl^- на величины порядка 0.015 нм. Параметры гамильтониана кристаллического поля (в декартовой системе координат с $x \parallel a$, $y \parallel b$ и осью z перпендикулярной плоскости ab) для иона Tb^{3+} в позиции Pb2

$$\mathcal{H}_{\text{CF}} = \sum_{p=2,4,6} \sum_{k=-p}^p B_p^k O_p^k,$$

где O_p^k – операторы Стивенса, были рассчитаны в рамках модели обменных зарядов. Используя данные по оптическим измерениям ионов Er^{3+} в KPb_2Cl_5 [8], мы получили следующие параметры (в см^{-1}): $B_2^0 = -66$, $B_2^1 = -46$, $B_2^{-1} = -26$, $B_2^2 = -36$, $B_2^{-2} = -152$, $B_4^0 = 2.75$, $B_4^1 = 20$, $B_4^{-1} = -623$, $B_4^2 = -148$, $B_4^{-2} = -45$, $B_4^3 = -169$, $B_4^{-3} = 1548$, $B_4^4 = -63$, $B_4^{-4} = -160$, $B_6^0 = 11.2$, $B_6^1 = -43$, $B_6^{-1} = 20$, $B_6^2 = -197$, $B_6^{-2} = 35$, $B_6^3 = 4$, $B_6^{-3} = -87$, $B_6^4 = -15$, $B_6^{-4} = 35$, $B_6^5 = 266$, $B_6^{-5} = 53$, $B_6^6 = -48$ и $B_6^{-6} = 6.4$. Вычисленные с этими параметрами подуровни энергии основного мультиплета 7F_6 равны (в см^{-1}):

0, 2.05, 59, 67, 79, 91, 108, 147, 169, 222, 230, 245 и 253. Таким образом, интервал между двумя нижними подуровнями иона Tb^{3+} близок к экспериментальной величине, и этот квазидублет значительно отделен от остальных возбужденных уровней. Расчетные величины g -факторов вдоль кристаллографических осей $g_a = 9.584$, $g_b = 13.17$, $g_c \approx g_z = 4.76$ находятся в согласии с результатами измерений. В частности, максимальная величина вычисленного магнитного момента в плоскости ab ($8.15\mu_B$) близка к экспериментальной ($7.9\mu_B$). Различие может быть обусловлено пренебрежением эффектом ковалентности. Однако направление этого момента (36° от оси b) заметно отличается от полученной из угловой зависимости спектра (20° от оси b). Более точное согласие с теорией возможно получить при наличии экспериментальных данных о штарковской структуре тербия в кристалле.

Дополнительные линии, наблюдаемые в спектрах ЭПР, в частности, с начальным расщеплением порядка 180 ГГц, можно сопоставить другим центрам с вакансией по калию в более удаленной от редкоземельного иона позиции. Однако этот анализ является предметом отдельного исследования. Узкие линии, являющиеся спутниками основного спектра, качественно можно приписать существованию в кристалле слабосвязанных пар. В пользу этого обстоятельства свидетельствует, например, известный случай наблюдения пар кобальта в туттоновых солях, когда константы обменного взаимодействия не превышали 0.1 см^{-1} [9]. В этой работе вид приводимого спектра также представлял собой разрешенную сверхтонкую структуру, по бокам от которой имелись слабые спутники. Кроме того, из оптических измерений $KPb_2Cl_5:Tb$ было установлено, что возбужденное состояние 7F_5 быстро распадается через механизм ап-конверсии, причем коэффициент ап-конверсии был слишком высок для изолированного центра. Был сделан вывод, что в кристалле существуют парные центры. Таким образом, наше предположение о существовании слабо связанных пар имеет косвенное подтверждение.

Выводы

В результате экспериментального изучения кристалла $KPb_2Cl_5:Tb$ методом широкополосной высокочастотной ЭПР спектроскопии обнаружены три типа парамагнитных центров. Один из них, имеющий характерную сверх-

тонкую структуру, идентифицирован как принадлежащий изолированному иону тербия в низкосимметричной позиции с семикратным окружением. Экспериментально определены величины g -факторов, константа сверхтонкой структуры и расщепление в нулевом магнитном поле. Измеренные угловые зависимости позволили определить направление магнитного момента. Анализ экспериментальных результатов производился на основе модели, предполагающей зарядовую компенсацию редкоземельного иона с наиболее близко расположенной калиевой вакансией. Расчеты параметров кристаллического поля в рамках теории обменных зарядов позволили вычислить систему штарковских уровней, оценить величину g -факторов в разных кристаллографических направлениях, а также направление магнитного момента. Второй центр ЭПР представлял собой спутанные сигналы, расположенные по бокам от первого. С большой долей вероятности можно приписать эти линии слабосвязанным парам. Природа третьего центра пока не известна.

Настоящая работа выполнена в сотрудничестве с Б. З. Малкиным и А. Р. Закировым (Казанский государственный университет), А. Г. Охримчуком и Л. Н. Бутвиной (Институт общей физики РАН, г. Москва), Н. В. Личковой и В. Н. Завгородневым (Институт микроэлектронной технологии, г. Черноголовка).

Литература

1. Isaenko L., Yeliseyev A., Nadolinny V., Pashkov V., Pane S., Solarz R., Dirnstorfer I., Meyer B. in: Modern Problems of Laser Physics, Abstr. of II Int. Symp., PII-10. Novosibirsk 1997.
2. Ткачук А.М., Иванова С.Э., Исаенко Л.И., Елисеев А.П., Payne S., Solarz R., Page R., Nostrand M.: Оптика и спектроскопия **92**, № 1, 89–101 (2002)
3. Balda R., Voda M., Al-Saleh M., Fernandez J.: J. Luminescence **97**, 190–197 (2002)
4. Butvina L.N., Dianov E.M., Okhchimchuk A.G., Lichkova N.V., Zavgorodnev V.N. in: Spectroscopy of Crystals Activated by Rare Earth and Transition Metal Ions, Abstr. of XI Feofilov symp., PF-61. Kazan 2001.
5. Okhchimchuk A.G., Butvina L.N., Dianov E.M., Lichkova N.V., Zavgorodnev V.N., Sorokin E. in: Abstr. of Conf. IQEL/LAT 2002, p. 15. Moscow 2002.
6. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Appl. Magn. Reson. **2**, 571–576 (1991)
7. Вировец А.В., Наумов Д.Ю., Меркулов А.А., Исаенко Л.И., Пашков В.М. в: Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, тр. V Международ. конф., т. 1, с. 83–86. Александров 2001.
8. Jenkins N.W., Bowman S.R., O'Connor S., Searles S.K., Ganem J.: Opt. Mat. **22**, 311–320 (2003)
9. Жеглов Е.П., Зарипов М.М., Рыжманов Ю.М.: ФТТ **34**, 2487–2492 (1992)

ЭПР и оптическая спектроскопия Yb^{3+} тетрагональной симметрии в CaF_2

К. И. Герасимов, В. А. Латыпов, М. Л. Фалин

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методами ЭПР и оптической спектроскопии проведено исследование парамагнитного центра тетрагональной симметрии, образуемого ионом Yb^{3+} в кристалле CaF_2 . Установлена эмпирическая схема уровней энергии и определен потенциал кристаллического поля. Параметры кристаллического поля в рамках суперпозиционной модели использованы для анализа искажений кристаллической решетки в окрестности Yb^{3+} .

Введение

Кристаллы флюорита CaF_2 , активированные редкоземельными ионами (РЗИ), привлекательны тем, что, с одной стороны, они находят широкое практическое применение, с другой, являются удобными модельными системами для изучения магнитно-оптических свойств примесных парамагнитных ионов. Оптические исследования трехвалентных РЗИ в этом кристалле усложнены большим количеством парамагнитных центров (ПЦ), появление которых обусловлено различными механизмами компенсации избыточного заряда. Yb^{3+} в этом смысле не является исключением, образуя в CaF_2 до 14 ПЦ [1]. Ситуация усугубляется еще и тем, что в оптических спектрах Yb^{3+} присутствуют достаточно интенсивные электронно-колебательные линии. Поэтому, несмотря на то, что Yb^{3+} имеет наиболее простую структуру уровней энергии, состоящую для свободного иона только из двух мультиплетов $^2F_{7/2}$ и $^2F_{5/2}$, и ему посвящено большое количество исследований разными методами (ЭПР, ДЭЯР, оптическая спектроскопия, включая зееман-спектроскопию) до настоящего времени нет однозначной интерпретации сложных оптических спектров и, соответственно, штарковских структур многочисленных ПЦ, образующихся в данном кристалле. Однозначно идентифицированы только по одной спектральной линии для каждого ПЦ [2, 3]. Исключением является ПЦ кубической симметрии (T_c), для которого установлены уровни энергии и найдены параметры кристаллического поля (КП) [4, 5]. Для ПЦ тетрагональной симметрии (T_{tet}) на основе параметров сверхтонкого взаимодействия, полученных методом двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) вычислены потенциал кристаллического поля (КП) и схема энергетических уровней [6]. Экспериментальное подтверждение данных расчетов отсутствует.

Ранее нами были проведены исследования ПЦ Yb^{3+} различной симметрии в кристаллах гомологического ряда флюорита CaF_2 , SrF_2 , PbF_2 и BaF_2 [7–10]. Настоящая работа представляет результаты экспериментального исследования методами ЭПР и оптической спектроскопии Yb^{3+} , образующего T_{tet} в CaF_2 .

Экспериментальные результаты

$\text{CaF}_2:\text{Yb}$ были выращены методом Бриджмена-Стокбаргера в графитовых тиглях в атмосфере фтора. Для оптических исследований использовались образцы, в которых наблюдался спектр ЭПР T_{tet} и количество ПЦ других симметрий было минимальным. Измерения ЭПР проводились на модифицированном спектрометре ERS-231 (Центр научного приборостроения, Берлин, ГДР) [11] при $T = 4.2$ К. Оптические спектры регистрировались на самодельном многофункциональном спектрометре [12] при $T = 2, 77$ и 300 К. Люминесценция кристаллов возбуждалась светом ксеноновой лампы мощностью 1 кВт. Для регистрации спектров возбуждения люминесценции (ВЛ) свет ксеноновой лампы пропусклся через монохроматор. Спектры ВЛ корректировались на спектр излучения лампы. В качестве источника селективного лазерного возбуждения люминесценции (СЛВЛ) использовался полупроводниковый лазерный диод АТС-С1000-100-TMF-965 (Санкт-Петербург) мощностью 1 Вт и шириной линии излучения порядка 2 нм с возможностью перестройки длины волны излучения от 963 нм (10381 см^{-1}) до 969 нм (10317 см^{-1}).

Для всех исследуемых кристаллов угловые зависимости спектров ЭПР в плоскости вращения магнитного поля ($1\bar{1}0$) показали наличие двух ПЦ Yb^{3+} различной симметрии: T_c и T_{tet} (рис. 1). На рис. 2а и 2б представлены, соответственно, спектры ВЛ и люминесценции $\text{CaF}_2:\text{Yb}^{3+}$ ($c = 0.01\%$, $T = 2$ К). Стрелками с соответствующими обозначениями показаны спектральные линии, принадлежащие T_c , T_{tet} и T_1 , идентификация которых проведена в [2–5], где T_1 – ПЦ тригональной симметрии, который образуется при трансформации комплекса $\text{Ca}^{2+}\text{F}_8^-$ в $\text{Yb}^{3+}\text{F}-\text{O}_4^{2-}$ [13]. Для выделения оптических линий, принадлежащих T_{tet} , использовались такие методы, как метод модуляционной фазовой флуориметрии [14, 15], т.е. метод группировки линий по общности времен затухания люминесценции и метод СЛВЛ. На рис. 3а представлен спектр люминесценции $\text{CaF}_2:\text{Yb}^{3+}$ ($c = 0.01\%$) при СЛВЛ T_{tet} . Длина волны диодного лазера настраивалась в резонанс с линией поглощения, принадлежащей T_{tet} . Как видно из спектров

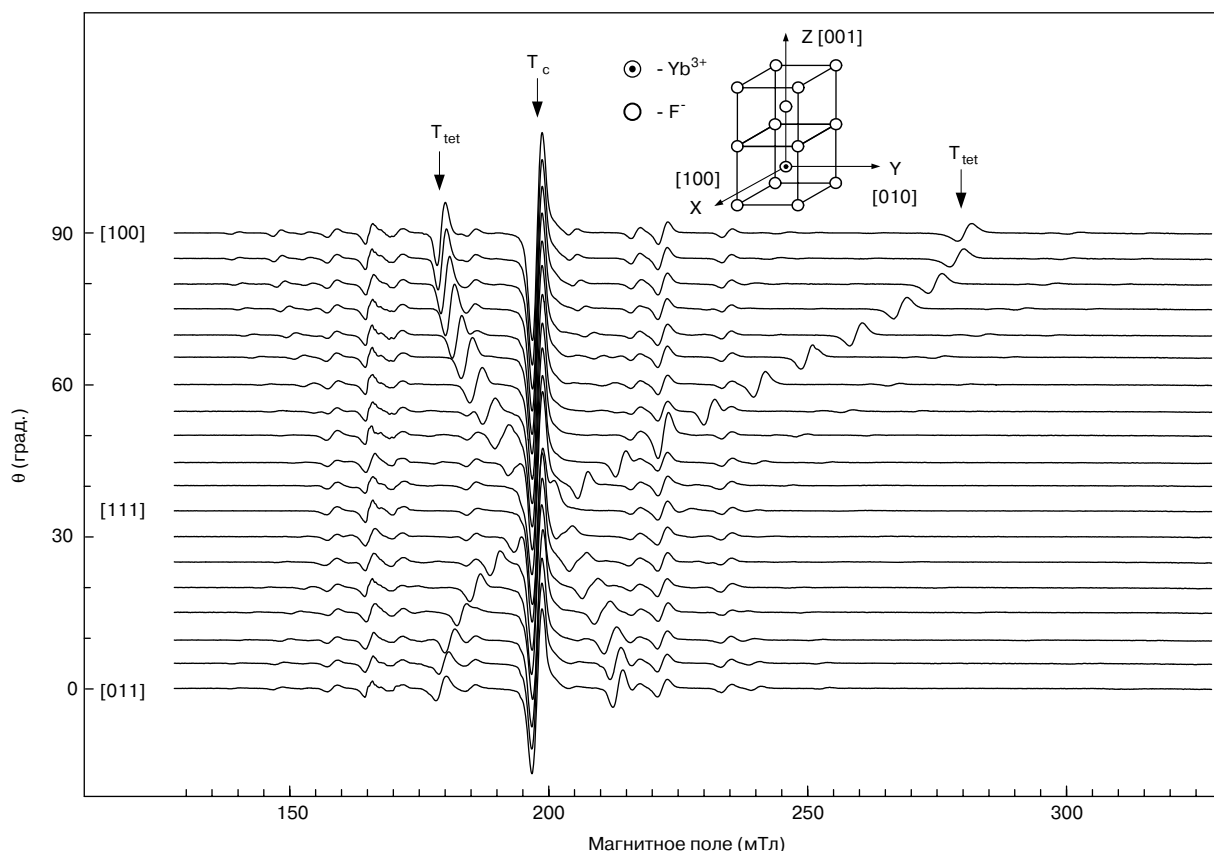


Рис. 1. Экспериментальная угловая зависимость линий ЭПР Yb^{3+} в CaF_2 ($c = 0.2\%$) при вращении магнитного поля $\mathbf{H}$ в плоскости $(\bar{1}\bar{1}0)$. $T = 4.2$ К, $\nu = 9.35$ ГГц. Стрелками показаны линии ЭПР четных изотопов Yb^{3+} , соответствующих T_c и T_{tet} . Остальные линии ЭПР соответствуют нечетным изотопам Yb^{3+} тех же ПЦ. Вставка показывает структурную модель T_{tet} .

ВЛ (рис. 2), данная линия перекрывается со слабыми линиями возбуждения, принадлежащими короткоживущим примесным центрам. Поэтому при СЛВЛ на переходе T_{tet} , хотя и в меньшей степени, но происходит возбуждение люминесценции короткоживущих примесных центров. Для выделения линий люминесценции,

принадлежащих более долгоживущему T_{tet} , был использован фазовый метод. В спектре на рис. 3а интенсивности линий, принадлежащих короткоживущим примес-

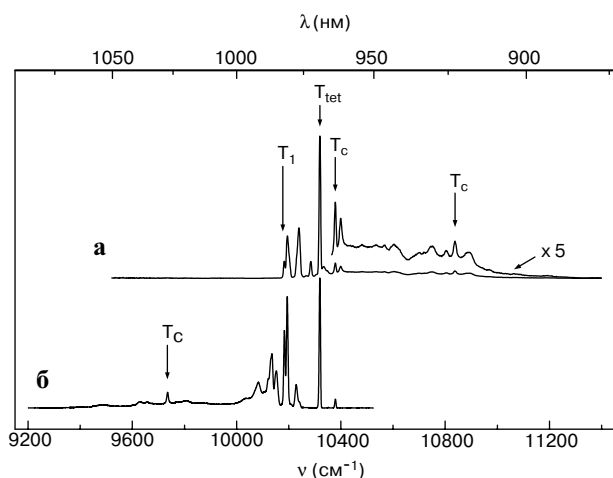


Рис. 2. Спектры ВЛ (а) и люминесценции (б) кристалла $\text{CaF}_2:\text{Yb}^{3+}$, $c = 0.01\%$, $T = 2$ К. Стрелками с соответствующим обозначением показаны линии, принадлежащие T_c , T_1 и T_{tet} .

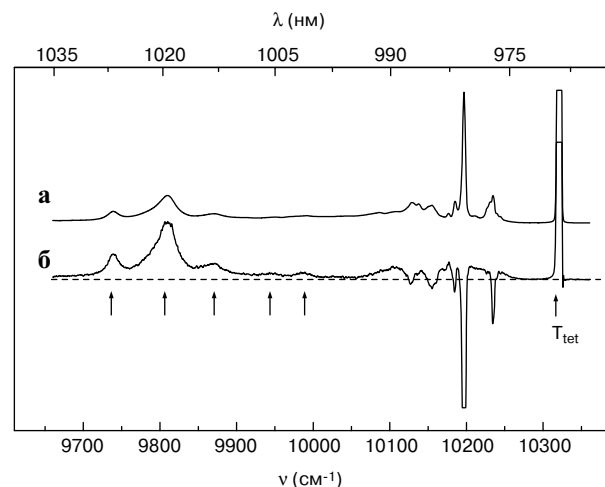


Рис. 3. Спектры люминесценции кристалла $\text{CaF}_2:\text{Yb}^{3+}$ ($c = 0.01\%$, $T = 2$ К) при селективном возбуждении на частоте перехода T_{tet} (отмечен стрелкой с соответствующим обозначением), полученные стандартным методом (а) и с использованием модуляционной фазовой методики (б). Стрелками показаны линии люминесценции, принадлежащие T_{tet} .

ным центрам, либо сведены к нулю, либо имеют отрицательную величину. Нулевой уровень для данного спектра показан штриховой линией. Таким образом, наиболее интенсивные линии, отмеченные на рис. 3 стрелками, необходимо соотнести с T_{tet} .

Анализ параметров кристаллического поля и оценка локальных искажений кристаллической решетки

Определение потенциала кристаллического поля

Для объяснения экспериментальных значений уровней энергии и g -факторов, найденных из оптических и ЭПР спектров, проводилась диагонализация матрицы гамильтониана следующего вида:

$$\mathcal{H} = -\xi(\mathbf{SL}) + B_2^0 V_2^0 + B_4^0 V_4^0 + B_4^4 V_4^4 + B_6^0 V_6^0 + B_6^4 V_6^4,$$

где ξ – параметр спин-орбитального взаимодействия, $\mathbf{S}$ и $\mathbf{L}$ – операторы спинного и орбитального моментов иона, V_k^q – гармонические полиномы Стивенса, в которых декартовы координаты $4f$ -электронов отнесены к кубическим осям кристалла и ось z совмещалась с осью z T_{tet} , показанного на рис. 1 и 4. Далее вычислялись уровни энергии и волновые функции. Волновые функции основного крамерсова дублета $^1\Gamma_{17}$ использовались для вычисления g -факторов спин-гамильтониана $\beta \mathbf{H} g \mathbf{S}'$, где $\mathbf{H}$ – напряженность магнитного поля, а $\mathbf{S}'$ – оператор эффективного спина $S' = 1/2$. Восемь теоретических величин (шесть энергетических разностей и два g -фактора) посредством процедуры, описанной в [16], сопоставлялись с соответствующими экспериментальными значениями для определения значения параметров кристаллического поля B_k^q и ξ . Ход вычислений контролиро-

вался также минимизацией отклонений расчетных значений g -факторов от экспериментальных для нижнего крамерсова дублета $^3\Gamma_{17}$ в мультиплете $^2F_{5/2}$. Результаты анализа представлены в таблице 1.

Структурная модель

Вследствие того, что КП, действующее на парамагнитный ион, определяется, главным образом, взаимодействиями иона Yb^{3+} с ближайшими ионами фтора, можно полагать, что при образовании T_{tet} не происходит существенных изменений положений лигандов по сравнению с теми, которые они занимали в T_c .

Для оценки количественных искажений кристаллической решетки вблизи Yb^{3+} использовалась суперпозиционная модель (СМ) КП [17]. В этой модели постулируется, что полное КП является линейной суперпозицией полей, создаваемых каждым ионом кристалла. Результирующие параметры КП тогда представляются в виде

$$B_k^q = \sum_i K_k^q(\vartheta_i, \phi_i) \bar{B}_k(R_i), \quad (1)$$

где $K_k^q(\vartheta_i, \phi_i)$ – структурные множители, зависящие от угловых позиций (определяемых сферическими углами ϑ_i и ϕ_i) всех ионов, находящихся на расстоянии R_i от примесного иона, а $\bar{B}_k(R_i)$ – “внутренние” параметры, зависящие от типа лиганда. На практике обычно предполагается, что зависимость параметров $\bar{B}_k(R_i)$ от R_i в ограниченных областях расстояний подчиняется закону вида

$$\bar{B}_k(R_i) = \bar{B}_k(R_0)(R_0/R_i)^{t_k}, \quad (2)$$

в котором t_k – показатель степени, а $\bar{B}_k(R_0)$ – собственный параметр модели, относящийся к некоторому сред-

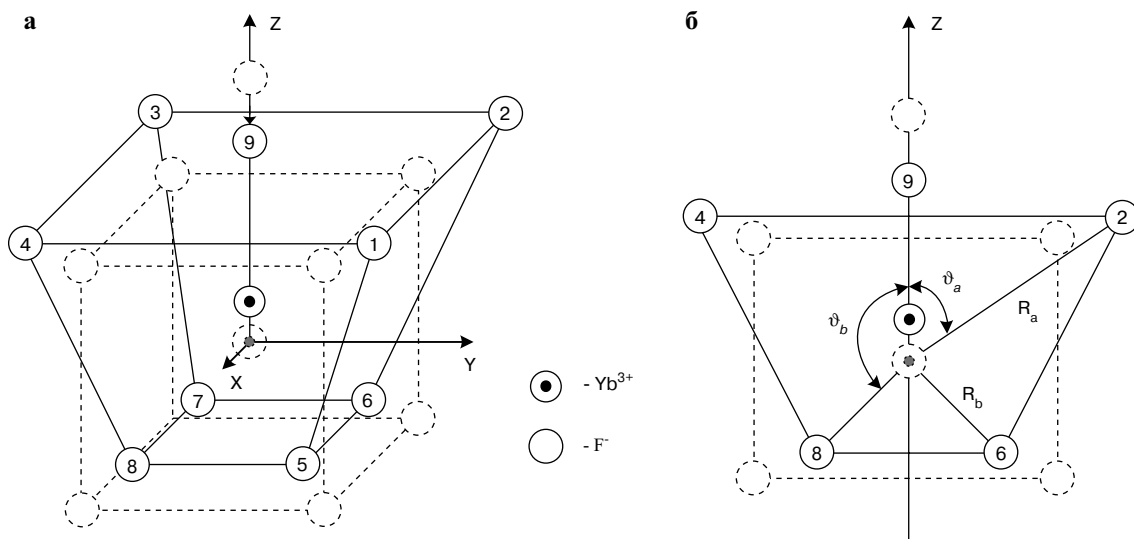


Рис. 4. Структурная модель T_{tet} в CaF_2 . а Позиции девяти F^- ближайшего окружения Yb^{3+} , б позиции F^- в плоскости (110) . Пунктирные линии – положения F^- в неискаженной кристаллической решетке, сплошные линии – положения F^- , вычисленные в рамках СМ.

Таблица 1. Уровни энергии, параметры КП (B_k^q), ξ (см⁻¹) и g-факторы T_{tet} .

B_k^q, ξ	J	Симметрия, g-факторы	Расчет [16] (ДЭЯР)	Эксперимент [2, 3]	Эксперимент	Настоящая работа Расчет	Теория (СМ)
	5/2	$^4\Gamma_{17}$ $^3\Gamma_{16}$ $^3\Gamma_{17}$ $g_{\parallel}(^3\Gamma_{17})$ $g_{\perp}(^3\Gamma_{17})$	10630(20) 10400(40) 10325* -1.41 -1.47	10325	10747(2) 10602(2) 10321(1)	10747 10602 10321	
	7/2	$^2\Gamma_{16}$ $^2\Gamma_{17}$ $^1\Gamma_{16}$ $^1\Gamma_{17}$ $g_{\parallel}(^1\Gamma_{17})$ $g_{\perp}(^1\Gamma_{17})$	435(50) 440(20) 164(20) 0 2.476 		581(3) 513(3) 451(3) 0 2.414(5) 3.801(5)	581 513 451 0 2.446 3.849	
ξ			2910		2903		
B_2^0			189		125		
B_4^0			-47		-141		-141
B_4^4			-93		-955		-955
B_6^0			52		11		11
B_6^4			-709		-646		-646

* Значение использовано из работы [2].

нему расстоянию R_0 , обычно принимаемому равным сумме ионных радиусов магнитного иона и лиганда.

Четверка ионов фтора F_{1-4} ближайшего окружения Yb^{3+} со стороны иона-компенсатора (рис. 1) занимают позиции с координатами: $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = R_a$, $\vartheta_1 = \vartheta_2 = \vartheta_3 = \vartheta_4 = \vartheta_a = 54.74^\circ$, $\phi_1 = 45^\circ$, $\phi_2 = 135^\circ$, $\phi_3 = 225^\circ$, $\phi_4 = 315^\circ$, в то время как координаты второй четверки F_{5-8} , соответственно: $R_{5-8} = R_b$, $\vartheta_{5-8} = \vartheta_b = 125.26^\circ$, $\phi_5 = 45^\circ$, $\phi_6 = 135^\circ$, $\phi_7 = 225^\circ$, $\phi_8 = 315^\circ$. Из анализа структуры тригональных “фторовых” ПЦ Yb^{3+} в кристаллах SrF_2 и BaF_2 [10] мы нашли: $t_4 = 6.44$, $\bar{B}_4(R_0) = 67.68$ см⁻¹, $t_6 = 9.93$, $\bar{B}_6(R_0) = 18.87$ см⁻¹. R_0 принималось равным 2.295 Å (сумма ионных радиусов [18]).

При образовании T_{tet} координаты $R_{a,b}$ и $\vartheta_{a,b}$ восьми ионов фтора ближайшего окружения Yb^{3+} изменяются по сравнению с их положениями в неискаженном кристалле. Эти изменения будут различными для F_{1-4} и F_{5-8} , но, в силу тетрагональной симметрии ПЦ, одинаковыми для каждого иона фтора, составляющих эти четвертки. Появление иона-компенсатора, находящегося на расстоянии R_k от иона Yb^{3+} , добавляет еще один член в выражении (1). Происходящие при этом изменения параметров кристаллического поля $\Delta B_k^q = B_k^q(T_{\text{tet}}) - B_k^q(T_c)$ описываются следующей системой четырех уравнений:

$$\begin{aligned}\Delta B_4^0 &= 4\bar{B}_4(R_a)K_4^0(\vartheta_a) + 4\bar{B}_4(R_b)K_4^0(\vartheta_b) + \bar{B}_4(R_k) \\ &\quad + (28/9)\bar{B}_4(R), \\ \Delta B_4^4 &= -4\bar{B}_4(R_a)K_4^4(\vartheta_a) - 4\bar{B}_4(R_b)K_4^4(\vartheta_b) \\ &\quad + (140/9)\bar{B}_4(R),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta B_6^0 &= 4\bar{B}_6(R_a)K_6^0(\vartheta_a) + 4\bar{B}_6(R_b)K_6^0(\vartheta_b) + \bar{B}_6(R_k) \\ &\quad - (16/9)\bar{B}_6(R),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta B_6^4 &= -4\bar{B}_6(R_a)K_6^4(\vartheta_a) - 4\bar{B}_6(R_b)K_6^4(\vartheta_b) \\ &\quad + (336/9)\bar{B}_6(R),\end{aligned}\quad (3)$$

из которой невозможно однозначно определить пять величин R_a , ϑ_a , R_b , ϑ_b и R_k , характеризующих структуру T_{tet} . Однако структура T_{tet} уже анализировалась ранее в работах, посвященных исследованиям лигандного сверхтонкого взаимодействия (ЛСТВ) Yb^{3+} с ионами фтора ближайшего окружения методами ЯМР и ДЭЯР [19, 20]. В частности, оценки показали, что $\vartheta_a = 62-65^\circ$, $\vartheta_b = 129-133^\circ$, $R_a = 2.33$ Å, $R_b = 2.36-2.50$ Å, $R_k = 2.34-2.41$ Å. Вывод о значительном приближении F_k^- к Yb^{3+} получен также в [21, 22] из теоретических расчетов пространственной структуры ПЦ редкоземельных ионов в кристаллах гомологического ряда флюорита MeF_2 . Из этих работ следует, что ион Yb^{3+} в T_{tet} находится скорее в девятикратном, нежели в восьмикратном окружении ионов фтора. Полученные в этих работах R_a , R_b , R_k и ϑ_a , ϑ_b были использованы в нашем анализе структуры T_{tet} в качестве исходных значений, а тот факт, что междоузельный ион-компенсатор F_k^- существенно приближается к примесному иону, позволяет допустить, что для параметров $\bar{B}_4(R_k)$ и $\bar{B}_6(R_k)$ в выражении (2) будут пригодны те же показатели степеней t_4 и t_6 и собственные параметры $\bar{B}_4(R_0)$ и $\bar{B}_6(R_0)$, что и для других восьми ионов фтора ближайшего окружения. Решение системы (3) приводит к значениям величин R_k , R_a , R_b , ϑ_a и ϑ_b , представленных

Таблица 2. Параметры деформационной структуры T_{tet} (R в Å, ϑ в градусах).

Тип модели	R_k	R_a	R_b	ϑ_a	ϑ_b
Неискаженный CaF_2	2.732	2.336	2.336	54.74	125.26
Наша модель	2.45	2.35	2.22	62.0	135.9
Модель [20]	2.41	2.33	2.36	62.0	129.0

в таблице 2 (строка “наша модель”), где для сравнения приведены соответствующие значения параметров структурной модели T_{tet} , предложенной в [20], и неискаженной кристаллической решетки CaF_2 . Сравнения R_a , R_b , R_k и ϑ_a , ϑ_b с соответствующими значениями в неискаженной кристаллической решетке показывают, что при образовании T_{tet} ионы F_{1-4} на 0.013 Å и на 7.28° отклоняются от оси ПЦ, а F_{5-8} на 0.142 Å приближаются к Yb^{3+} и, наоборот, на 10.6° прижимается к оси ПЦ. Если принять во внимание факт смещения Yb^{3+} к F_k^- на 0.18 Å, установленного из исследования ЛСТВ Yb^{3+} с ионами фтора второй координационной сферы [23], то из полученного решения можно заключить, что сам F_k^- на 0.10 Å приближается к Yb^{3+} . Теоретические значения параметров КП T_{tet} , вычисленные для полученных значений величин R_k , R_a , R_b , ϑ_a и ϑ_b в нашей модели представлены в таблице 1 (“Теория (СМ)”). Сравнивая их с экспериментальными значениями для T_{tet} в таблице 1, видно, что структура ПЦ очень хорошо соответствует параметрам КП четвертого и шестого порядка.

Установленная в результате проведенного анализа структура T_{tet} приведена на рис. 4, где изображены позиции девяти ионов фтора ближайшего окружения Yb^{3+} , а также для более детальной иллюстрации показано сечение ПЦ диагональной плоскостью, проходящей через его ось и пять ионов фтора.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 02-02-16648)

и МНТЦ № 2121. Авторы благодарны А. М. Леушину за проведенный расчет искажений кристаллической решетки в окрестности Yb^{3+} и предоставленный материал для печати.

Литература

1. Anderson C.H.: Crystal with the fluorite structure (Hayes W., ed.), chap. 5. Oxford: Clarendon 1974.
2. Kirton J., McLaughlan S.D.: Phys. Rev. **155**, 2, 279–284 (1967)
3. Kirton J., White F.M.: Phys. Rev. **178**, 2, 543–547 (1969)
4. Воронько Ю.К., Осико В.В., Щербаков И.А.: ЖЭТФ **56**, 1, 151–160 (1969)
5. Kiro D., Low W.: Magnetic Resonance (Coogan C.K., Ham N.S., Stuart S.N., Pilbrow J.P., Wilson G.V.H., eds.), pp. 247–269. New York: Plenum 1970.
6. Baker J.M., Blake W.B.: Proc. Roy. Soc. Lond. A **316**, 1524, 63–80 (1970)
7. Falin M.L., Gerasimov K.I., Leushin A.M., Bill H., Lovy D., Sanadze T.: J. Alloys and Compounds **323/324**, 692–695 (2001)
8. Герасимов К.И., Леушин А.М., Фалин М.Л.: ФТТ **43**, 9, 1609–1612 (2001)
9. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M., Bill H., Lovy D.: J. Luminescence **102-103**, 239–242 (2003)
10. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M.: J. Phys. Cond. Matt. **15**, 17, 2833–2847 (2003)
11. Латыпов В.А., Фалин М.Л.: ПТЭ **4**, 164–166 (2001)
12. Falin M.L., Gerasimov K.I., Kazakov B.N., Yakshin M.A.: Appl. Magn. Reson. **17**, 1, 103–112 (1999)
13. Reddy T.Rs., Davies E.R., Baker J.M., Chambers D.N., Newman R.C., Ozbay B.: Phys. Lett. A **36**, 3, 231–232 (1971)
14. Казаков Б.Н., Сафиуллин Г.М., Соловаров Н.К.: ПТЭ **3**, 156–161 (1993)
15. Казаков Б.Н., Михеев А.В., Сафиуллин Г.М., Соловаров Н.К.: Оптика и спектроскопия **79**, 3, 426–437 (1995)
16. Беспалов В.Ф., Казаков Б.Н., Леушин А.М., Сафиуллин Г.М.: ФТТ **39**, 6, 1030–1034 (1997)
17. Newman D.J.: Adv. Phys. **20**, 84, 197–256 (1971)
18. Shannon R.D.: Acta Crystallogr. B **32**, 751–767 (1976)
19. Wolfe J.P., Markiewicz R.S.: Phys. Rev. Lett. **30**, 22, 1105–1107 (1973)
20. McGarvey B.R.: J. Chem. Phys. **65**, 3, 955–961 (1976)
21. Давыдова М.П., Малкин Б.З., Столов А.Л.: Спектроскопия кристаллов, с. 27–39. Л.: Наука 1978.
22. Reid M.F., Butler P.H.: J. Phys. C: Solid State Phys. **15**, 19, 4103–4116 (1982)
23. Baker J.M., Davies E.R., Hurell J.P.: Proc. Roy. Soc. A **308**, 1494, 403–431 (1968)

ДЭЯР ян-теллеровских центров иона Cu^{2+} в кристалле CaF_2

И. И. Фазлижанов, В. А. Уланов, М. М. Зарипов

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) исследованы комплексы примесного иона Cu^{2+} в кристалле CaF_2 . Получены параметры лигандного сверхтонкого взаимодействия с ядерными магнитными моментами четырех ионов фтора первой анионной сферы окружения иона Cu^{2+} . Показано, что координационным многогранником иона меди является ромбическая призма. Ион меди локализован в центре этой ромбической призмы.

Первые результаты изучения методом ЭПР ян-теллеровских комплексов меди в кристаллах CdF_2 и CaF_2 были опубликованы в статьях [1, 2]. В этих работах были определены компоненты g -тензора, константа квадрупольного взаимодействия и параметры собственного и лигандных сверхтонких взаимодействий (ЛСТВ). Установлено, что ромбическая симметрия тензора электронного зеемановского взаимодействия обусловлена статическим эффектом Яна-Теллера, вызвавшим сжатие координационного куба примесного иона Cu^{2+} вдоль одной из его осей симметрии C_2 с одновременным растяжением вдоль другой оси C_2 . Модель статической молекулярной структуры комплекса, предложенная в работе [2], показана на рис. 1.

Компоненты g -тензора, представленного в системе координат XYZ (рис. 1), равны: $g_x = 2.103 \pm 0.002$, $g_y = 2.147 \pm 0.002$, $g_z = 2.802 \pm 0.002$. Параметры квадрупольного взаимодействия (Q_x и Q_y) и компоненты тензоров сверхтонкого взаимодействия (a_x , a_y и a_z) и лигандного сверхтонкого взаимодействия (ЛСТВ) с магнитными моментами ядер ионов $\text{F}^-(1)$ и $\text{F}^-(5)$ равны (в МГц): $a_x = 97 \pm 3$, $a_y = 97 \pm 3$, $a_z = 76 \pm 3$, $Q_x = -11 \pm 2$, $Q_y = -10 \pm 2$, $A_{xx}^{F(1)} = 221 \pm 5$, $A_{yy}^{F(1)} = 136 \pm 5$, $A_{zz}^{F(1)} = 58 \pm 2$, $A_{xy}^{F(1)} = 89 \pm 5$, $A_{xx}^{F(5)} = 9 \pm 2$, $A_{yy}^{F(5)} = 6 \pm 2$, $A_{zz}^{F(5)} = 3 \pm 2$ и $A_{yz}^{F(5)} = 3 \pm 2$.

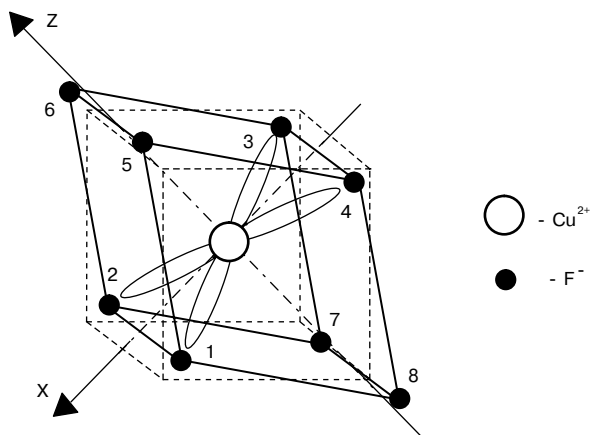


Рис. 1. Модель молекулярной структуры комплекса примесного иона Cu^{2+} в CaF_2 (показаны занятые электронной дыркой орбитали $3d$ -оболочек ионов Cu^{2+}).

Как видно из значений компонент тензоров ЛСТВ, электронный магнитный момент иона Cu^{2+} взаимодействует с магнитными моментами ядер ионов $\text{F}^-(1)$ – $\text{F}^-(4)$ сильнее, чем с моментами ядер ионов $\text{F}^-(5)$ – $\text{F}^-(8)$. Объясняется это прежде всего тем, что неспаренный электронный спин исследуемого комплекса находится на $3d_{xy}$ -орбитали иона Cu^{2+} (рис. 1).

Изучение молекулярной структуры комплекса меди в кристалле CaF_2 нами было запланировано после опубликования работы [3]. В этой работе ее авторами была предложена модель молекулярной структуры комплекса примесного иона Cu^{2+} в CaF_2 , которая отличалась от нашей модели (см. [2]) дополнительным искажением в виде смещения иона меди в нецентральное положение на оси Z . Такая модель основывалась на данных изучения кристалла $\text{CaF}_2:\text{Cu}$ методом оптической спектроскопии и методом ЭПР в условиях одноосного давления. В качестве возможных причин нецентрального смещения иона Cu^{2+} авторы работы [3] рассматривали или дефект решетки кристалла-матрицы, или псевдоэффект Яна-Теллера.

В свою очередь, мы не наблюдали такого смещения, хотя располагали информацией о параметрах ЛСТВ со всеми восемью ионами фтора, расположенными в первой катионной сфере окружения примесной меди. Наши данные говорили о том, что в исследуемом комплексе восемь лигандов меди разбиты лишь на две группы по четыре эквивалентных лиганда. Если бы реализовалась модель авторов [3], мы должны были бы наблюдать три группы эквивалентных лигандов, содержащих в себе $4 + 2 + 2$ лиганда. Группу из четырех эквивалентных лигандов должны были представлять ионы фтора с номерами 1–4 (рис. 1), а две группы по два лиганда – это лиганды 5 и 6, и 7 и 8, соответственно. Однако, после знакомства с работой [3], у нас возникли некоторые сомнения в своем выводе относительно центрального положения иона меди. Действительно, ЛСТ структура, обусловленная взаимодействием электронного магнитного момента исследуемого комплекса с ядерными магнитными моментами лигандов 5–8 в регистрируемых нами спектрах ЭПР, не была разрешена полностью. По этой причине мы могли не об-

наружить неэквивалентности между парами лигандов 5, 6 и 7, 8.

С целью уточнения полученных в ЭПР параметров ЛСТВ с лигандами 5–8 нами были проведены эксперименты с ДЭЯР. На рис. 2 и 3 показаны спектры ДЭЯР, зарегистрированные на сильнополевых линиях ЛСТС спектров ЭПР в ориентациях $\mathbf{B}_0 \parallel X$ (рис. 2) и $\mathbf{B}_0 \parallel Y$ (рис. 3). Линии ДЭЯР, представленные на этих рисунках, соответствуют ЛСТВ с ионами фтора, расположенными во второй и третьей анионных сферах окружения примесного иона Cu^{2+} в кристалле CaF_2 . Кроме того, в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel Y$ зафиксирована одна линия, расположенная по частотной оси существенно выше того диапазона частот, который представлен на рис. 3 (ей соответствует резонансная частота, равная 16.24 МГц). При вращении вектора $\mathbf{B}_0$ вокруг оси Z эта линия раздваивается, но в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel X$ две линии снова накладываются друг на друга в точке, соответствующей частоте 17.94 МГц. Кроме того, в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel X$ появляется еще одна линия. Ей соответствует резонансная частота 8.57 МГц. Расположена она симметрично по отношению к группе резонансных линий, возникающих вследствие взаимодействия электронного момента комплекса с ядрами лигандов второй, третьей и четвертой сфер окружения примесного иона Cu^{2+} . При отклонениях вектора $\mathbf{B}_0$ от ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel X$ в плоскости XOY две линии с частотами 17.94 и 8.57 МГц раздваиваются. При отклонениях вектора $\mathbf{B}_0$ от ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel X$ эти линии распадаются на четыре отдельных линии. Угловые зависимости указанных линий в плоскости XOY описываются параметрами, величины которых близки к значениям параметров ЛСТВ с лигандом $\text{F}^{-(5)}$, определенных методом ЭПР в работе [2]. К сожалению, нам не удалось изучить угловую зависимость этих резонансных линий ДЭЯР в плоскостях XOZ и YOZ , так как в этих плоскостях происходит наложение групп линий ЭПР, соответствующих шести ансамблям магнитно-неэквивалентных парамагнитных центров $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{D}_{2h})$.

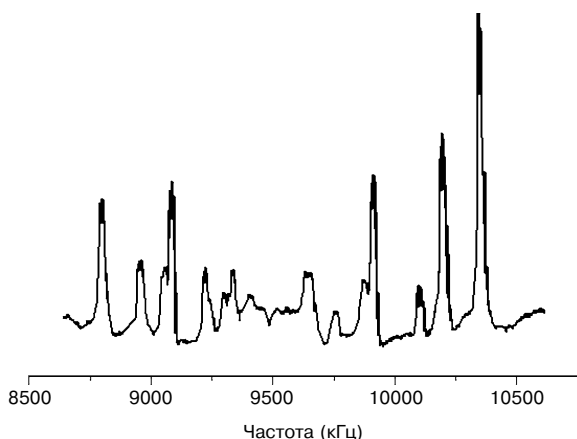


Рис. 2. Спектр ДЭЯР второй и третьей анионных сфер окружения примесного иона Cu^{2+} в комплексе $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{D}_{2h})$ в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}$, зарегистрированный для ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel Z$ на сильнополевой компоненте спектра ЭПР на частоте $\nu = 9.3$ ГГц при $T = 4.2$ К.

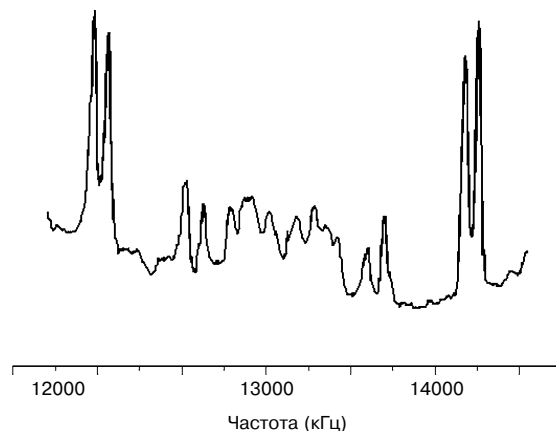


Рис. 3. Спектр ДЭЯР второй и третьей анионных сфер окружения примесного иона Cu^{2+} в комплексе $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{D}_{2h})$ в кристалле $\text{CaF}_2:\text{Cu}$, зарегистрированный в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel Y$ на сильнополевой компоненте спектра ЭПР на частоте $\nu = 9.3$ ГГц при $T = 4.2$ К.

Нам удалось лишь зарегистрировать спектр ДЭЯР в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel Z$. Никаких дополнительных линий, лежащих за пределами частотного диапазона 8.5–10.5 МГц (вплоть до 50 МГц), зарегистрировать не удалось. Это означало, что величина параметра не может быть больше 2.5 МГц. Для более точного определения величины параметра была выполнена симуляция спектров ЭПР, зарегистрированных в X- и Q-диапазонах. Она позволила определить значение параметра $A_{ZZ}^{F(5)}$. Оно оказалось равным 2.1 МГц.

Сравнивая полученные методом ДЭЯР экспериментальные факты с результатами проведенного нами анализа данных ЭПР, мы пришли к следующему выводу. Две отдельные линии, регистрируемые при вращении вектора $\mathbf{B}_0$ в плоскости XOY в частотном диапазоне 15.5–18.3 МГц, соответствуют переходам между ядерными состояниями лигандов первой сферы окружения, лежащих в плоскости ZOY . Очевидно, что эти ядерные состояния являются подуровнями одного из электронных уровней электронного крамерсовского дублета $|M_S = \pm 1/2\rangle$. Линия спектра ДЭЯР с резонансной частотой 8.57 МГц, зарегистрированная в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel X$, соответствует переходам ДЭЯР между ядерными подуровнями второго электронного уровня этого крамерсовского дублета. Отсутствие такой линии в спектре ДЭЯР в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel Y$ говорит о том, что соответствующий электронный уровень является возбужденным и, по этой причине, соотношения времен ядерной и электронной релаксаций на этом электронном уровне оказались неблагоприятными для наблюдения ДЭЯР. Четырехкратная вырожденность обсуждаемых линий в ориентациях $\mathbf{B}_0 \parallel X$ и $\mathbf{B}_0 \parallel Y$ однозначно говорит о центральном положении иона меди в объеме его координационного многогранника (ромбической призмы). Экспериментальные факты, которые авторы работы [3] приписали эффектам нецентральности примесного иона, могли быть связаны с псевдоэффектом Яна-Теллера на возбужденном орбитальном состоянии иона Cu^{2+} .

Совместный анализ данных ЭПР и ДЭЯР привел к следующим значениям параметров $A_{ij}^{F(5)}$: $A_{XX}^{F(5)} = 6.4$ МГц, $A_{YY}^{F(5)} = 6.0$ МГц, $A_{ZZ}^{F(5)} = 2.1$ МГц и $A_{YZ}^{F(5)} = 4.3$ МГц.

Несколько слов скажем о параметрах ЛСТВ с лигандами дальних сфер окружения иона меди. Из-за того, что интенсивности резонансных линий в спектрах ДЭЯР дальних сфер оказались слабыми, а общее число этих линий большое, уже при небольших отклонениях вектора $\mathbf{B}_0$ от главных ориентаций в кристалле спектр ДЭЯР терялся в собственных шумах элементов усилителей сигнала спектрометра. По этой причине сопоставление

линий с конкретными ядрами ионов фтора оказалось невозможным.

Литература

1. Зарипов М.М., Кропотов В.С., Ливанова Л.Д., Степанов В.Г.: ФТТ **10**, 325 (1968)
2. Зарипов М.М., Уланов В.А.: ФТТ **30**, 1547 (1988)
3. Lefevre V., Monnier A., Schnieper M., Lovy D., Bill H.: Z. Phys. Chem. **200**, 265 (1997)

Кластеры примесных ионов железа в кристалле BaF_2 : данные исследований методом ЭПР

Е. Р. Житейцев, В. А. Уланов, М. М. Зарипов, Е. П. Жеглов

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом ЭПР исследованы легированные ионами железа кристаллы BaF_2 . В кристаллах, где концентрация железа была приблизительно равной 0.2%, наряду с центрами одиночных ионов железа были обнаружены димеры $\text{Fe}^{3+}(3d^5)\text{-Fe}^+(3d^7)$. Рентгеновское облучение переводит этот димер в состояние $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$. Частота туннельных переходов электрона с одного иона на другой значительно выше частоты ЭПР, поэтому в лигандной сверхтонкой структуре спектров ЭПР наблюдается усредненная картина, соответствующая симметричной ядерной конфигурации димера $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$.

Исследования кристаллов $\text{BaF}_2\text{:Fe}$ были начаты в связи с тем, что примесные центры железа в кристаллах структурного ряда флюорита до настоящего времени изучены весьма поверхностно [1], хотя все данные выполненных исследований указывали на сложный характер взаимодействий между примесными центрами и решетками кристаллов-матриц. В настоящей работе в качестве объектов исследований были выбраны центры, образовавшиеся в кристаллах BaF_2 при относительно высоком уровне их легирования ионами железа (концентрация примеси около 0.2%).

Исследования выполнены методом ЭПР в X- и Q-диапазонах при температурах 4.2 и 77–80 К. Было установлено, что в выращенных (но не облученных) образцах при температуре 4.2 К наблюдаются спектры ЭПР, по крайней мере, двух типов центров с целочисленным спиновым моментом и с тетрагональной симметрией магнитных свойств. Линии этих спектров не имеют сверхтонкой структуры и при температурах 77 К и выше не наблюдаются.

После облучения образцов рентгеновскими лучами (при комнатной температуре в течение 30 мин), кроме указанных выше спектров, появляются спектры трех типов центров, обладающих спиновыми моментами с полуцелым значением. Все новые центры имеют разрешенную лигандную сверхтонкую структуру (ЛСТС). Два вида центров (I и II) образованы одиночными примесными ионами $\text{Fe}^{3+}(3d^5, ^6S)$, ассоциированными с компенсатором избыточного положительного заряда (междоузельным ионом фтора). Различия в их магнитных свойствах обусловлены различием во взаимном расположении иона Fe^{3+} и компенсатора заряда.

Наибольший интерес вызвали центры третьего типа (тип III). Резонансное поле центральной линии группы, представляющей спектр этих центров, меняет свое значение в очень широких пределах при поворотах вектора $\mathbf{B}_0$ в плоскостях кристалла $\langle 110 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. Минимальным значениям поля в X- и Q-диапазонах при $T = 77$ К соответствуют эффективные g-фактора 8.243 (X-диапазон) и 8.284 (Q-диапазон). Максимальному значению резонан-

сного магнитного поля соответствует $g_{\parallel}^{\text{эфф}} = 2.002$ (в X- и Q-диапазонах). Наблюдаются одновременно три магнитно-неэквивалентных ансамбля центров. В их спектрах ЭПР обнаруживается ЛСТС, явно указывающая на лигандное сверхтонкое взаимодействие (ЛСТВ) с магнитными ядрами восьми эквивалентных ионов фтора. Графики угловых зависимостей положений центров групп линий, соответствующих ансамблям примесных образований типа III в кристалле $\text{BaF}_2\text{:Fe}$, представлены на рис. 1. Зависимость А представляет одиночную группу линий, а зависимость Б – sdвоенную группу. Вид графиков дает основание для утверждения, что симметрия рассматриваемых центров тетрагональная.

Учитывая значения эффективных g-факторов и форму кривых А и Б, можно сделать вывод о значении спинового момента центра типа III. Прежде всего, представляется очевидным то, что спиновый момент центра – полуцелый и мы наблюдаем спектр, соответствующий переходам ЭПР между состояниями $|M_S = 1/2\rangle$ и $|M_S = -1/2\rangle$. Можно показать, что значение спинового момента центра типа III не может быть меньше $S = 5/2$. Более того, есть основание говорить о том, что наиболее вероятным значением является $7/2$. Действительно, влияние состояний $|M_S = \pm 3/2\rangle$, $|M_S = \pm 5/2\rangle$ и т.д. при большой величине начального расщепления обычно сводится к приблизительно удвоению (при $S = 3/2$), утроению (при $S = 5/2$) или учетверению (при $S = 7/2$) истинного значения $g_{\perp}^{\text{эфф}}$. Очевидно, что значение $g_{\perp}^{\text{эфф}} = 8.243$ практически нереально при $S = 3/2$ (пришлось бы предположить, что значение истинного $g_{\perp}$ больше 4). Если предполагать $S = 5/2$, необходимо объяснять причину большой анизотропии электронного зеемановского взаимодействия (так как в этом случае истинное значение $g_{\perp}$ должно быть приблизительно равно 2.7). Но это очень трудно объяснить, по крайней мере, до тех пор, пока мы имеем ввиду примесный ион Fe^{n+} в окружении восьми эквивалентных ионов фтора (здесь n – нечетное целое число). Кроме того, необходимо учитывать и экспериментальную статистику, связанную с легированием ионных кристаллов. С точки зрения этой статистики кажет-

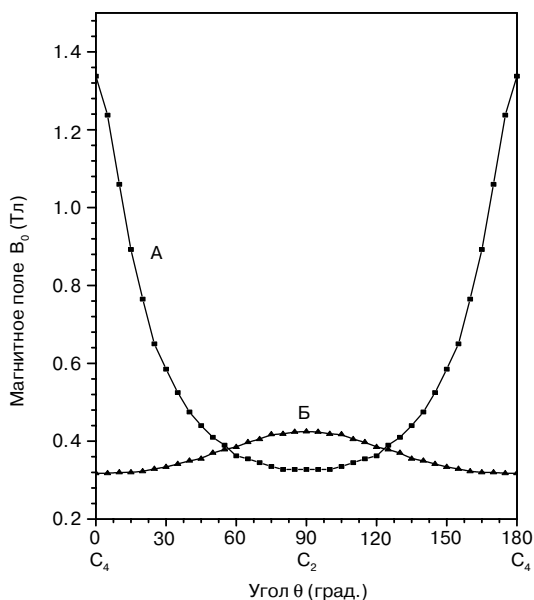


Рис. 1. Угловая зависимость положения центра тяжести спектра ЭПР парамагнитного комплекса типа III в кристалле $\text{BaF}_2:\text{Fe}$. Вращение вектора $\mathbf{B}_0$ в плоскости (110) , $T = 77 \text{ K}$, $\nu_{\text{ЭПР}} = 37 \text{ ГГц}$.

ся маловероятным то, что эффективный заряд иона Fe^{n+} может существенно отличаться от заряда замещаемого им иона Ba^{2+} (величина заряда которого близко к +2), поскольку в таком случае энергия решетки должна сильно повыситься.

Из числа возможных вариантов прежде всего упомянем ион Fe^{3+} , находящийся в основном состоянии с электронной конфигурацией $3d^5$. Поскольку орбитальный момент свободного иона Fe^{3+} практически равен нулю, больших отклонений от значения 2.0023 ожидать не приходится. Таким образом, вариант с Fe^{3+} в состоянии $3d^5$ (6S) исключается. Теперь допустим, что в кристалле ион Fe^{3+} оказался в состоянии с электронной конфигурацией $3d^4 4s$. Предположим, что правило Хунда выполняется. В таком случае в качестве основного скорее всего окажется терм 6D . Поскольку в кубическом кристаллическом поле основным окажется орбитальный дублет 6E_g , в образовавшемся примесном комплексе возможен статический эффект Яна-Теллера, связанный с взаимодействием примесного иона с ядерными колебаниями тетрагональной симметрии. Однако, величина спин-орбитального взаимодействия в ионе Fe^{3+} ($3d^4 4s$) вряд ли окажется намного больше 100 см^{-1} . И это взаимодействие оказывает влияние на состояния основного дублета 6E_g лишь во втором порядке теории возмущений. По этой причине значение $g_{\perp} = 2.7$ кажется маловероятным.

Более вероятным кажется предположение о том, что центр типа III является обменно-связанной парой $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$. В стационарных условиях низкотемпературные магнитные свойства этой пары приближенно могут быть описаны спиновым гамильтонианом

$$\mathcal{H}_S = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_2 + \beta_e \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{B}_0 + \beta_e \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{B}_0,$$

где $\mathbf{S}_1$ и $\mathbf{S}_2$ – операторы электронных спиновых моментов фрагментов примесной пары (центров, образованных отдельными ионами $\text{Fe}^{2+}(3d^6)$ и $\text{Fe}^+(3d^7)$, $S_1 = 2$ и $S_2 = 3/2$), $\mathbf{J}$ – тензор обменного взаимодействия между фрагментами пары, $\mathbf{g}_1$ и $\mathbf{g}_2$ – тензоры электронного зеемановского взаимодействия фрагментов пары с внешним магнитным полем, β_e – магнетон Бора, $\mathbf{B}_0$ – вектор внешнего магнитного поля. Если обменное взаимодействие ферромагнитной природы и оно значительно больше взаимодействия с внешним магнитным полем, то основными окажутся восемь состояний, трансформационные свойства которых будут описываться полным спиновым моментом $S = 7/2$.

Однако, полностью стационарными электронные состояния фрагментов рассматриваемой пары $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$ быть не могут, так как кристалл кубический и путем перескока электрона с иона Fe^+ на ион Fe^{2+} может быть реализовано энергетически эквивалентное состояние пары (т.е. состояние $\text{Fe}^+(3d^7)\text{-Fe}^{2+}(3d^6)$). Если барьер, препятствующий переносу электрона с одного фрагмента димера на другой, недостаточно высок, то частота перескоков электрона может оказаться выше частоты ЭПР, и в спектрах ЭПР будет наблюдаться усредненная картина. Именно так может быть разрешено кажущееся противоречие между предполагаемой статической молекулярной структурой исследуемой примесной пары $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$ и наблюдаемой ЛСТС, характерной для ЛСТВ с восемью эквивалентными ионами фтора (в статической системе $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$, ближайшие к ионам железа лиганды разбиваются на четыре группы по четыре эквивалентных иона фтора). Эквивалентность восьми ядер фтора в ориентации $\mathbf{B}_0 \parallel (001)$ говорит о том, что ионы примесной пары быстро обмениваются электронами и каждый акт такого обмена соответствует туннельному переходу этой пары из одной ямы адиабатического потенциала (соответствующей состоянию $\text{Fe}^{2+}(3d^6)\text{-Fe}^+(3d^7)$) в противоположную (соответствующую состоянию $\text{Fe}^+(3d^7)\text{-Fe}^{2+}(3d^6)$). Это означает, что в исследуемом димере ионы железа находятся в состояниях смешанной валентности.

Выше было отмечено, что в кристалле есть центры тетрагональной симметрии с целочисленным спиновым моментом, облучение которых вызывает образование рассматриваемых центров типа III. Если наша интерпретация центров типа III верна, то отсюда следует, что один из ансамблей центров с целочисленным моментом соответствуют примесной паре $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^+$. Высокая концентрация таких пар в кристалле объяснима: кулоновское взаимодействие нескомпенсированных зарядов двух отдельных центров (Fe^{3+} и Fe^+) должно явиться хорошим стимулом к образованию такой примесной пары.

Литература

1. Hayes W. (ed.): Crystals with the fluorite structure: electronic, vibrational and defect properties. Oxford: Clarendon Press 1974. 378 p.

Ян-теллеровский механизм связи в ассоциатах примесного иона Co^{2+} с дефектом междоузельного фтора в кристалле BaF_2

В. А. Уланов

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Выполнены расчеты поверхностей адиабатических потенциалов (АП) примесных комплексов $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ CaF_2 , SrF_2 и BaF_2 по модели ионного кристалла с потенциалами парных взаимодействий Борна-Майера. Показано, что вследствие псевдоэффекта Яна-Теллера на поверхности АП комплекса $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ в кристалле BaF_2 образуются один основной и шесть неосновных минимумов. Основной минимум соответствует центральному положению иона кобальта, а неосновные соответствуют смещениям этого иона вдоль одной из осей $\langle 001 \rangle$ кристалла. Если в процессе диффузии ионов фтора по междоузлиям, один из междоузельных ионов F_{int}^- окажется рядом с примесным комплексом $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$, один из неосновных минимумов АП оказывается основным, что соответствует выигрышу в энергии около 0.3 эВ.

В кристаллах $\text{BaF}_2:\text{Co}$, выращенных методом Бриджмена в гелиевой атмосфере, содержащей небольшую примесь фтора (около 1%), методом ЭПР при $T = 4.2$ К были обнаружены два типа парамагнитных центров. Первый из них соответствовал примесным комплексам $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$, обладающим кубической симметрией магнитных свойств. Центры подобного вида были предметом исследования в кристалле $\text{CdF}_2:\text{Co}$ авторов работы [1]. Магнитные свойства центров второго типа характеризовались спиновым гамильтонианом тетрагональной симметрии [2]. В спектрах ЭПР этих центров наблюдалась сверхтонкая структура, обязанная своим появлением сверхтонкому взаимодействию (СТВ) электронного момента центра с магнитным моментом ядра ^{59}Co ($I^{\text{Co}} = 7/2$), и суперсверхтонкая структура, характерная для лигандного сверхтонкого взаимодействия (ЛСТВ) с ядерными магнитными моментами пяти ионов фтора. Вид спектров ЭПР и угловые зависимости положений резонансных линий этих спектров однозначно свидетельствовали о том, что молекулярная структура центров второго типа может быть охарактеризована формулой $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$. В зависимости от условий выращивания кристаллов $\text{BaF}_2:\text{Co}$ концентрация тетрагональных комплексов $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ могла стать выше концентрации кубических комплексов $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$. Этот экспериментальный факт явно указывает на высокую стабильность центра $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$, обусловленную достаточно сильной связью между его фрагментами: примесным комплексом $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ и междоузельным ионом фтора, локализовавшимся в соседнем междоузлии (в тетрагональной позиции относительно иона Co^{2+}). Наличие такой связи позволяет причислить примесное образование $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ к разряду примесных ассоциативных структур [3].

По своей молекулярной структуре исследуемый ассоциат $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ похож на центр трехвалентного редкоземельного иона, ассоциированного с меж-

доузельным ионом фтора [4]. Структура этого центра представлена на рис. 1. Как это показано в работе [4], в центре $[\text{RF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{6-}(\text{C}_{4v})$, обнаруженном в кристалле CaF_2 , примесный редкоземельный ион (R^{3+}) и междоузельный ион фтора (F_{int}^-) сместились из центров своих координационных кубов навстречу друг другу, а размер общей грани этих кубов увеличился вследствие отталкивательного взаимодействия между электронными оболочками ионов $\text{F}^-(1)\text{-F}^-(4)$ и $\text{F}_{\text{int}}^-(9)$. Схожесть между центрами $[\text{RF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{6-}(\text{C}_{4v})$ и $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ обнаруживается не только в структурах, но и в концентрационных зависимостях относительных интенсивностей спектров ЭПР. В обоих случаях концентрация примесных центров, ассоциированных с междоузельными ионами фтора, оказывалась значительно большей произведения $C_{\text{Me}}C_{\text{F(int)}}$, где C_{Me} и $C_{\text{F(int)}}$ – концентрации примесного металла и избыточного фтора в кристалле, соответственно. Этот экспериментальный факт указывает на то, что образование ассоциатов $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ (также как и ассоциатов $[\text{RF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{6-}(\text{C}_{4v})$) является энергетически выгодным процессом.

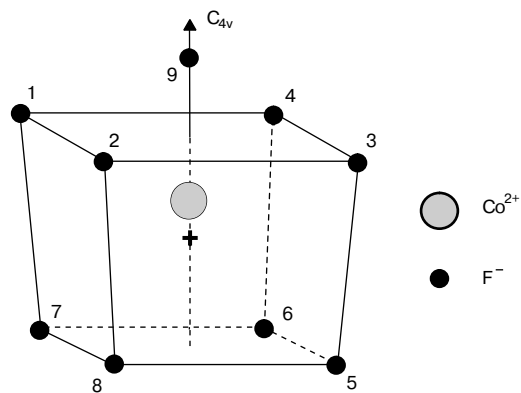


Рис. 1. Геометрическая структура ассоциата $[\text{CoF}_4\text{F}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ в кристалле BaF_2 .

Очевидно, что в кристалле BaF_2 сумма энергий образования изолированных друг от друга дефектов “примесный комплекс $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ ” и “междоузельный фтор F_{int}^- ” оказалась больше энергии ассоциата $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$. В результате этого, в объеме кристалла в процессе его роста и (или) отжига происходит постепенное накопление ассоциатов $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$. Это оказывается возможным вследствие того, что при высокой температуре избыточные ионы фтора способны легко перемещаться по объему кристалла и могут приблизиться к примесному иону Co^{2+} , локализованному в решетке кристалла в катионной позиции.

Однако, в то время как причина образования ассоциатов $[\text{RF}_4\text{F}_4]^{6-}(\text{C}_{4v})$ понятна (она связана с природным стремлением к зарядовой компенсации), в случае образования ассоциатов $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ стимулы не столь очевидны. Действительно, ион примесного металла в комплексе $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ является двухзарядным (реализовалось изовалентное замещение), и здесь нет необходимости в зарядовой компенсации. Можно предположить, что в ассоциате $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ между ионами кобальта и междоузельного фтора действует ковалентная связь, достаточная для термической стабильности такого ассоциата в кристалле BaF_2 . О наличии такой связи говорят сравнительно большие величины компонент $A_{\parallel}^{F(5)}$ и $A_{\perp}^{F(5)}$ тензора $A^{F(5)}$ [2]. Однако для объяснения стабильности ассоциативного центра при температурах $T > 900^\circ\text{C}$ требуется довольно сильная ковалентная связь, что не характерно для соединений переходных металлов со фтором (как показали наши опыты, фториды переходных металлов разлагаются уже при температурах выше $500\text{--}600^\circ\text{C}$). Анализ экспериментальных фактов, полученных в работе [2], приводит к предположению о том, что причина образования стабильного ассоциата $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ в кристалле BaF_2 может быть связана с псевдоэффектом Яна-Теллера в примесном комплексе $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ (будущем фрагменте ассоциата). По-видимому, псевдо-ян-теллеровское взаимодействие обеспечивает энергетическую выгодность образования ассоциатов $[\text{CoF}_4\text{F}_{\text{int}}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ в кристаллах BaF_2 . Убедительные аргументы в пользу такого предположения можно найти в работах ряда исследователей, изучавших эффекты смещений примесных ионов Ag^+ и Co^{2+} в нецентральные положения в легированных этими ионами кристаллах. Например, в работе [5] сообщается о необычных температурных зависимостях положений линий поглощения в оптических спектрах кристаллов $\text{KI}:\text{Ag}^+$. Эти результаты интерпретируются авторами [5] моделью примесного центра, у которого адиабатический потенциал (АП) имеет (кроме основного) несколько эквивалентных минимумов, соответствующих метастабильным ядерным конфигурациям с нецентральным положением ядра примесного иона. В работе [6] экспериментально показано, что переходы примесного дефекта Ag^+ между основной ямой АП, соответствующей центральной позиции иона Ag^+ в точечном примесном дефекте в кристаллах $\text{RbCl}:\text{Ag}^+$, и ямами с не-

центральной позицией этого примесного иона могут быть вызваны гидростатическим давлением и внешним электрическим полем. Влияние внешнего механического давления на кристалл SrCl_2 (относящийся к структурному типу флюорита) с примесными центрами Mn^{2+} и Co^{2+} изучалось методом ЭПР в работе [7], а влияние внешнего электрического поля на форму поверхности АП кристаллов $\text{SrCl}_2:\text{Co}^{2+}$ и $\text{SrCl}_2:\text{Mn}^{2+}$ изучалось в работах [8, 9]. Результаты работ [7–9] для нас особенно ценны тем, что объектом изучения в них были кристаллы рассматриваемой нами структурной группы. В работах [7–9] показано, что в комплексах $[\text{CoCl}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ в условиях осевого давления или под воздействием внешнего электрического поля ямы с нецентральным положением примеси могут стать основными. Очевидно, что влияние электрического поля иона F_{int}^- на форму нижнего листа АП примесного иона Co^{2+} , в основном, должно быть похоже на влияние внешнего электрического поля (отличие состоит лишь в том, что поле иона F_{int}^- является неоднородным). Чтобы продемонстрировать это, мы выполнили расчет поверхности нижнего листа АП примесного иона Co^{2+} в составе комплекса $[\text{CoF}_8]^{6-}(\text{O}_h)$ для различных размеров его координационного куба. В расчетах, выполненных с использованием потенциалов Борна-Майера, мы учитывали 144 иона, представляющих 12 элементарных ячеек кристалла. Некоторые из результатов этих расчетов показаны на рис. 2.

Графики, показанные на этом рисунке, демонстрируют зависимость формы поверхности АП иона Co^{2+} от размеров его координационного куба и от величины напряженности неоднородного электрического поля междоузельного иона F_{int}^- . Поскольку ион F_{int}^- расположен в объеме соседнего с кобальтом “пустого” куба анионной подрешетки кристалла, вектор напряженности индуцируемого им электрического поля действует на ион Co^{2+} вдоль оси C_4 его координационного куба. Графики на рис. 2б соответствуют смещенному положению примесного иона F_{int}^- (он смещен из центра своего координационного куба на $0.43 \text{ \AA}$ в сторону иона Co^{2+}). При таком

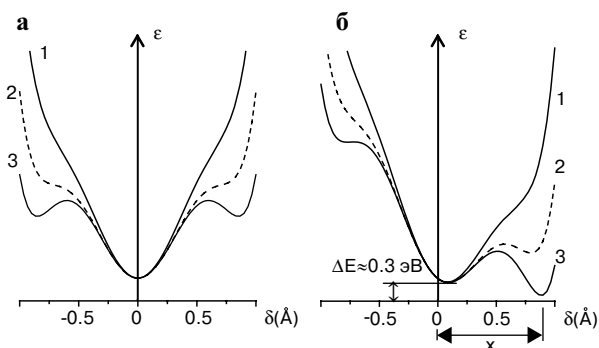


Рис. 2. Сечения нижнего листа АП иона Co^{2+} , замещившего в кристаллах структурной группы флюорита катион решетки: а в отсутствие и б под воздействием электрического поля междоузельного иона F_{int}^- . Кривые 1 соответствуют кристаллу CaF_2 , кривые 2 – кристаллу SrF_2 , а кривые 3 – кристаллу BaF_2 .

расположении иона F_{int}^- внецентровый минимум АП оказывается наиболее глубоким. Отрезок x определяет величину смещения иона Co^{2+} из центра своего координационного куба в направлении к F_{int}^- .

На рис. 2а представлены сечения АП центра Co^{2+} , не связанного с междоузельным ионом F_{int}^- , на рис. 2б – сечения АП иона Co^{2+} в составе ассоциата $[CoF_4F_4F_{int}]^{7-}$ (C_{4v}) при указанном расположении междоузельного иона F_{int}^- . Координата δ соответствует смещениям ядра иона Co^{2+} вдоль оси ассоциата.

Из анализа результатов выполненных расчетов следует вывод о том, что заметный выигрыш в энергии ($\Delta E < 0$) в ассоциатах типа $[MeF_4F_4F_{int}]^{7-}$ (C_{4v}) может реализоваться только в случае примесных ионов, имеющих АП определенного вида (АП с достаточно глубокими “возбужденными” ямами для нецентральных положений примесного иона). Обычно такие минимумы образуются вследствие эффектов ангармонизма решеточных колебаний и псевдо-эффекта Яна-Теллера [10] в случаях, когда ионный радиус примеси значительно меньше радиуса замещаемого катиона. Если потенциальная энергия в этих минимумах будет равна или меньше по-

тенциальной энергии высокосимметричной ядерной конфигурации, то в кристалле с такой примесью возникает локальная конфигурационная неустойчивость. Очевидно, что именно такой случай и реализовался в примесных комплексах $[CoF_8]^{6-}$ (O_h) кристалле $BaF_2:Co$, что явилось стимулом для образования стабильных ассоциатов $[CoF_4F_4F_{int}]^{7-}$ (C_{4v}).

Литература

1. Ulrici W.: Phys. Stat. Sol. (b) **62**, 431 (1974)
2. Зарипов М.М., Уланов В.А., Жеглов Е.П., Бучукури Г.Н.: ФТТ **36**, 411 (1994)
3. Крегер Ф.: Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир 1969. 524 с.
4. Bijvank E.J., den Hartog H.W.: Phys. Rev. B **22**, 4133 (1980)
5. Sievers A.J., Green L.H.: Phys. Rev. Lett. **52**, 1234 (1984)
6. Bridges F., Chow D.: Phys. Rev. Lett. **54**, 1532 (1985)
7. Groen J., van Opbroek G., Post K., van Hartog H.W.: Phys. Rev. B **30**, 3608 (1984)
8. Roelfsema K.E., van Hartog H.W.: J. Magn. Reson. **29**, 255 (1978)
9. Roelfsema K.E., van Hartog H.W.: Phys. Rev. B **13**, 2723 (1976)
10. Вихнин В.С.: Радиоспектроскопия твердого тела. Киев: Укр-ЦЕНДИСИ 1992. 259 с.

ЭПР в квазиодномерном проводнике $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$

Р. М. Ерёмина

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Проанализированы угловые зависимости ширины и положения линии ЭПР в квазиодномерном проводнике $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$.

Введение

Серия ванадиевых бронз $\beta\text{-A}_x\text{V}_2\text{O}_5$ ($A = \text{Li}, \text{Na}, \text{Ag}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}, \text{Cu}$) демонстрирует свойства квазиодномерного проводника вдоль оси b кристалла. В $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ атомы ванадия располагаются в трех неэквивалентных позициях. Атомы V1 и V2 находятся в окружении шести атомов кислорода, формирующих октаэдр. V3 располагается в пирамиде из пяти атомов кислорода. Октаэдры (V1) O_6 и пирамиды (V3) O_5 формируют зигзагообразные цепи вдоль оси b . Октаэдры (V2) O_6 соединены между собой общим атомом кислорода. Ионы ванадия могут находиться как в состоянии V^{4+} (d^1 , $S = 1/2$), так и V^{5+} (d^0). Один электрон приходится на шесть ионов ванадия.

Кристаллическая структура $\beta\text{-Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ определена хорошо [1]: кристалл имеет моноклинную симметрию, пространственная группа C2/m , элементарная ячейка включает в себя две формульные единицы. При температуре 135 К в образце наблюдается переход металл-диэлектрик, а при температуре 24 К – антиферромагнитное упорядочение. В 2002 году были проведены исследования кристаллической структуры $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ в области зарядового упорядочения [2]. Установлено, что при температуре 90 К период решетки вдоль оси b кристалла увеличивается в шесть раз. При этом изменяются расстояния между ионами V1-O и V2-O, между третьим и четвертым положениями ушестеренного периода решетки. На основании анализа межатомных расстояний и данных ЯМР измерений был сделан вывод, что в высокотемпературной фазе $T > 135$ К электроны располагаются на позициях V1. В статье А. Н. Васильева и др. [3] проанализирован спектр антиферромагнитного резонанса в $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ при $T = 4.2$ К. Установлено, что вектор Дзялошинского-Мория направлен вдоль оси c кристалла. Антиферромагнитный резонанс наблюдается несмотря на то, что только один ион V^{4+} со спином $S = 1/2$ приходится на пять ионов V^{5+} со спином $S = 0$. К настоящему времени не ясно, в каких позициях локализуется электрон при температурах ниже 135 К. Для решения этой задачи нами были проведены исследования линии ЭПР в $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$ при температурах 200 и 50 К. Величина симметричного обмена между ионами ванадия в цепочке равна 120 К [3].

Экспериментальные результаты и обсуждение

ЭПР измерения были выполнены на спектрометре Bruker ELEXSYS E500 в X- и Q-диапазонах. В спектре ЭПР в X- и Q-диапазонах наблюдается одна линия. Было проведено исследование угловой зависимости ширины линии и эффективного g -фактора в $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ при температурах 50 и 200 К в трех кристаллографических плоскостях. Положение и ширина линии ЭПР не зависят от диапазона измерений. На рис. 1а представлена угловая зависимость g -фактора при температуре 200 К, при которой $\text{Na}_{1/3}\text{V}_2\text{O}_5$ демонстрирует свойства квазиодномерного проводника. Мы предположили, также как и в [3],

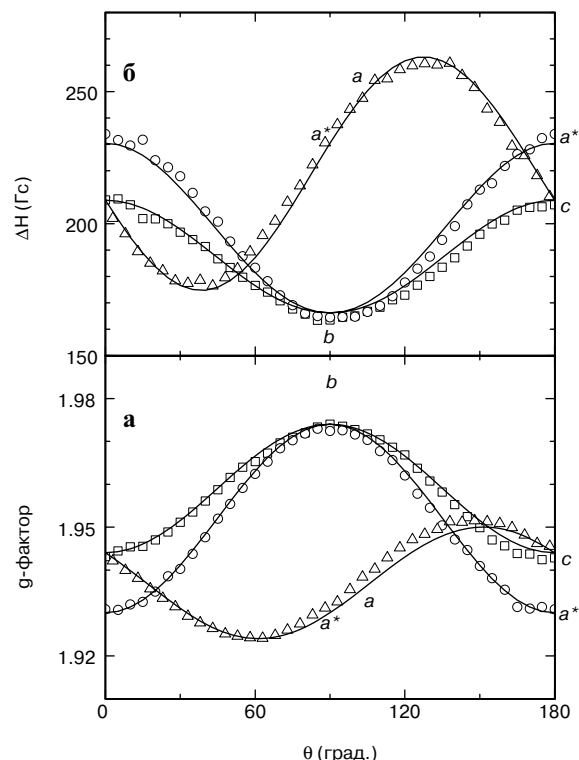


Рис. 1. Угловая зависимость эффективного g -фактора (а) и ширины линии ЭПР (б) в $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$. Δ плоскость ac , $\square$ плоскость bc , $\circ$ плоскость ab . X-диапазон, $T = 200$ К. a^* – вектор в плоскость ac , перпендикулярный оси c .

что электроны перемещаются по позициям ванадия V1 вдоль оси b кристалла. На рис. 1а сплошные линии теоретически рассчитаны при условии, что g -тензор является диагональным в локальной системе координат иона ванадия с направлениями осей: $x - (0.5068; 0; -0.862)$, $y - (0; 1; 0)$, $z - (0.862; 0; -0.5068)$. Было получено, что $g_x = 1.922$, $g_y = 1.975$, $g_z = 1.970$. Угловую зависимость эффективного g -фактора линии ЭПР при температуре 50 К также удалось описать в предположении, что электроны локализованы на четырех позициях V1 и двух позициях иона ванадия V2 так, что два электрона одновременно не находятся в плоскости ac . В этом случае вектор Дзялошинского-Мория имел бы составляющую вдоль оси b кристалла.

Описание угловой зависимости ширины линии ЭПР, обусловленной анизотропными обменными взаимодействиями, проводилось по методике, изложенной в работе [4]. При высоких температурах вклад взаимодействия Дзялошинского-Мория можно не учитывать, так как с повышением температуры вклад в ширину линии ЭПР для квазиодномерных соединений уменьшается обратно пропорционально температуре [5]. Если предположить, что проводимость при температурах выше 135 К обусловлена перескоком электронов по позициям V1, то основной вклад в ширину линии ЭПР вносят симметричные анизотропные обменные взаимодействия между данными ионами V1. Угловая зависимость ширины линии

ЭПР при температуре 200 К представлена на рис. 1б. Гамильтониан анизотропного обменного взаимодействия в локальной системе координат имеет вид:

$$\mathcal{H} = J_{xx} S_x^i S_x^j + J_{yy} S_y^i S_y^j + J_{zz} S_z^i S_z^j.$$

Рассматриваются анизотропные взаимодействия между ионами ванадия как соединенных зигзагом, так и вдоль оси b . Локальные оси располагаются следующим образом: ось x лежит вдоль прямой V1-V1, ось y – в плоскости V1-O-V1, ось z – перпендикулярна плоскости V1-O-V1.

Работа выполняется совместно с М. Хенриш, Х.-А. Круг фон Нидда и проф. А. Лойдлом (Университет г. Аугсбурга, Германия).

Литература

1. Wadsley A.D.: Acta Cryst. **8**, 695 (1955)
2. Yamaura J.-I., Isobe M., Yamada H., Yamauchi T., Ueda Y.: J. Phys. Chem. Solids **63**, 957 (2002)
3. Vasil'ev A.N., Marchenko V.I., Smirnov A.I., Sosin S.S., Yamada H., Ueda Y.: Phys. Rev. B **64**, 174403 (2002)
4. Krug von Nidda H.-A., Svistov L.E., Eremin M.V., Eremina R.M., Loidl A., Validov A., Prokofiev A., Assmus W.: Phys. Rev. B **65**, 134410 (2002)
5. Oshikawa M., Affleck I.: Phys. Rev. B **65**, 134410 (2002)

Микроструктура водных растворов нитрата гадолиния в процессе их охлаждения с различными скоростями

Г. П. Вишневецкая, Е. Н. Фролова, А. Р. Фахрутдинов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии
и отдел медицинской физики, лаборатория методов медицинской физики

Методом ЭПР изучена микроструктура водных растворов $Gd(NO_3)_3$ в процессе их охлаждения с различными скоростями. Определены локальные концентрации Gd^{3+} в микрообластях и концентрационная граница, при которой раствор стеклется по всему объему. Установлены температура стеклования жидких микрообластей (температура эвтектики) и их эвтектический состав. Обнаружено влияние эффектов адсорбции на процессы кристаллизации воды и концентрирования растворенного вещества. Показано, что необычная экспериментальная зависимость ширины линии ЭПР от исходных концентраций парамагнитных центров $\delta H(C_0)$, наблюдаемая в застеклованных водно-глицериновых растворах с равномерным распределением парамагнитных центров по объему образца, согласуется с теоретической при учете, наряду с диполь-дипольными взаимодействиями, вкладов от неоднородного уширения за счет неполноты разрешенной тонкой структуры спектров ЭПР.

Введение

В настоящей работе основное внимание уделено изучению изменения микроструктуры растворов в процессе вымерзания свободной воды и определению эвтектического состава и температуры эвтектики, данные о которых в литературе отсутствуют. Для этих целей мы применили метод ЭПР, позволяющий следить за поведением изолированных и взаимодействующих друг с другом парамагнитных комплексов. Заметим, что особенности процессов замораживания и стеклования методом ЭПР изучались ранее в водных растворах солей ионов VO^{2+} [1, 2], Mn^{2+} [3–5], Cr^{3+} [6–9]. В растворах солей Gd^{3+} такие работы не проводились, если не считать работы [3], в которой приведен спектр замороженного водного раствора $Gd(ClO_4)_3$. Однако, большая ширина линии ЭПР, по-видимому, не способствовала более детальному исследованию растворов Gd^{3+} в то время. Температуры стеклования для водных растворов лантаноидов определялись методом дифференциального теплового анализа [10].

Проводимые нами исследования могут быть также полезны для криохимии и криобиологии, рассматривающих вопросы, связанные с низкотемпературным консервированием биологических объектов, и для катализа, эффективность которого может возрасти в результате концентрирования растворенного вещества в жидких микрообластях в процессе понижения температуры.

Методика эксперимента

Для приготовления растворов использовалась соль нитрата гадолиния марки “чда”. Концентрация ионов Gd^{3+} изменялась от 0.02 до 3.6 М. Охлаждение образцов проводилось двумя способами: медленное ступенчатое по-

нижение температуры в парах жидкого азота, когда в каждой температурной точке образец выдерживался 20–30 мин (весь процесс охлаждения от 293 до 100 К проходил за 8–10 часов), и быстрое замораживание путем погружения образцов в жидкий азот. Для предотвращения кристаллизации воды при низких температурах и получения застеклованных по всему объему образцов использовались растворы, содержащие 10–20 объемных процентов глицерина, т.к. известно, что глицерин является одним из лучших криопротекторов, предохраняющих биологические объекты от разрушения при консервировании их низкими температурами. Измерения спектров ЭПР проводились на стандартном спектрометре (фирма JEOL) в X-диапазоне длин волн, причем образцы помещались в тонкие “волосные” капилляры диаметром около 1 мм. Для оценки времен спин-решеточной релаксации T_1 применялся метод нерезонансного поглощения в параллельных полях (НПП) [11].

Экспериментальные результаты и обсуждение

В первую очередь остановимся на результатах исследования концентрационной зависимости ширины линий в застеклованных растворах нитрата гадолиния. Поскольку застеклованные растворы представляют собой мгновенный слепок с жидких растворов, в которых отсутствуют вращательное и поступательное движения частиц жидкости, можно ожидать, что распределение растворенных частиц в них приближается к равномерному по всему объему ($C_0 = C_{\text{лок}}$).

Теоретически рассчитанная зависимость ширины линий от исходных концентраций парамагнитных центров C_0 для лоренцевой формы линии имеет вид [12–14]:

$$\delta H = \delta H_0 + AC_0, \quad (1)$$

где δH_0 – концентрационно независимый вклад в ширину линии, обусловленный релаксационным уширением от внутримолекулярных механизмов и возможным вкладом от неразрешенной тонкой структуры, C_0 – концентрация в М, A – коэффициент уширения, обусловленный диполь-дипольными взаимодействиями. Для эквивалентных спинов

$$A = 30.4 \cdot 10^{20} g\beta \sqrt{S(S+1)} \quad (2)$$

при условии равномерного распределения парамагнитных центров по объему образца для $S = 7/2$, $A = 223.7$ Гс/М.

В области высоких концентраций парамагнитных центров форма линии может изменяться от лоренцевой к гауссовой. Для оценки формы линии мы использовали два простых метода, представленных в [15]: метод нормированных графиков и метод наклона дифференциальных кривых поглощения. Оказалось, что линия остается практически лоренцевой в широком диапазоне концентраций и лишь при $C_0 > 3$ М принимает форму, промежуточную между лоренцевой и гауссовой. На фоне очень больших диполь-дипольных взаимодействий ($S = 7/2$), разница в ширинах линий для промежуточной и лоренцевой форм не играет существенной роли. Кроме того, отметим, что концентрированные застеклованные растворы можно рассматривать как систему, в которой распределение парамагнитных центров соответствует среднему между хаотическим и регулярным. В этом случае линия имеет в центре лоренцову форму, а гауссову – только на краях [14], поэтому теоретическую обработку экспериментальных ширин мы проводили, исходя из лоренцевой формы линии для всего диапазона концентраций.

На рис. 1 представлена концентрационная зависимость ширин линий δH производной сигнала ЭПР в застеклованных водно-глицериновых растворах $Gd(NO_3)_3$ при 77 К. Изменение δH не является строго линейным с одинаковым коэффициентом наклона во всей области концентраций, как это следует из формулы (1), если считать величину δH_0 постоянной: при $C_0 \sim 1.5$ М в зависимости $\delta H(C_0)$ наблюдается перегиб.

Прежде всего мы проверили предположение, хотя оно и маловероятно, о неполном стекловании относительно разбавленных по гадолинию растворов при содержании глицерина около 15 об.%. Изменение концентрации стеклообразователя в растворах от 10 до 30% не повлияло на ход экспериментальной зависимости $\delta H(C_0)$. Далее мы предположили, что подобный ход зависимости может возникнуть в результате возрастающего с усилением диполь-дипольных взаимодействий перекрывания отдельных компонент тонкой структуры спектра ЭПР, характерного для малых величин параметра тонкой структуры D . Действительно, ширины линий симулированных спектров ЭПР в области концентраций 0.2–3.6 М с использованием теории диполь-дипольных взаимодействий для лоренцевой формы линии, величины $D = 185 \pm 5$ Гс, оп-

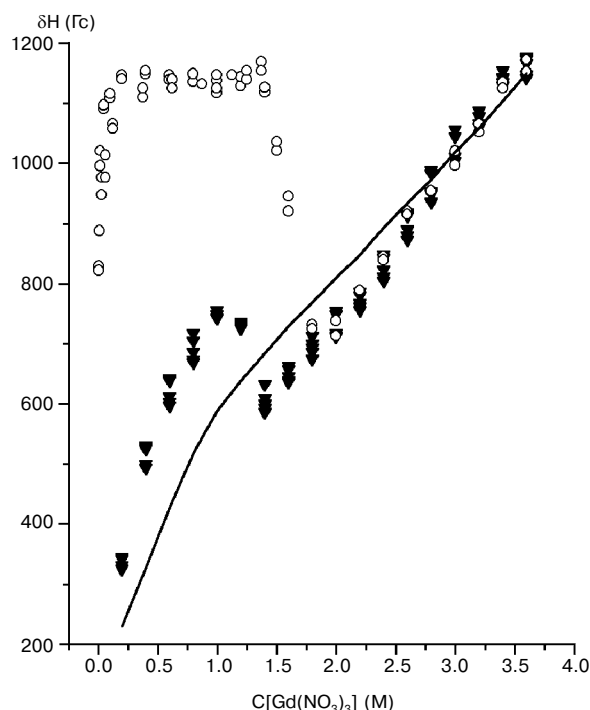


Рис. 1. Зависимость ширин линий ЭПР от концентрации Gd^{3+} в быстрозамороженных при 77 К водных растворах (○) и в застеклованных водно-глицериновых растворах (▼). Сплошная линия – ширины симулированных спектров с использованием теории диполь-дипольных взаимодействий и величины $\delta H_0 = 100$ Гс, $D = 180$ Гс.

ределенной из релаксационных данных и характерной для большинства акваионов Gd^{3+} в водном растворе [16] и величины независящего от концентрации вклада $\delta H_0 = 100$ Гс при $C_0 \rightarrow 0$ дают достаточно хорошее согласие с экспериментом (рис. 1).

На рис. 1 представлены также ширины линий быстро замороженных водных растворов $Gd(NO_3)_3$. При малых исходных концентрациях ($C_0 < 0.2$ М) наблюдается резкий рост δH , зависящий от величины C_0 . В диапазоне концентраций $0.2 \leq C_0 \leq 1.5$ М появляется платообразный участок с величиной $\delta H = 1150 \pm 20$ Гс. Постоянство величины $\delta H(C_0)$ позволяет утверждать, что вне зависимости от исходной концентрации соли растворенное вещество в процессе кристаллизации воды вытесняется в микрообласти постоянного состава, которые содержат достаточно большое число частиц. Количество таких микрообластей по объему раствора зависит от исходной концентрации соли. Чтобы определить степень концентрирования растворенных солей в микрообластях, мы сопоставили ширины линий ЭПР для ионов Gd^{3+} в замороженных водных растворах с ширинами линий ЭПР в застеклованных по всему объему водно-глицериновых растворах. Для областей постоянного состава получили величину локальной концентрации $C_{\text{лок}} = 3.6$ М; наименьшая величина $C_{\text{лок}} = 2.1$ М. Невозможность образования областей постоянного состава при малых концентрациях Gd^{3+} даже при 77 К, по-видимому, связана с сильными адсорбционными эффектами на поверхности капилляров

[17]. В зависимости от исходной концентрации $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ степень концентрирования $C_{\text{лок}}/C_0$ меняется от 18 при $C_0 = 0.2$ М до 2.4 при $C_0 = 1.5$ М.

Далее при увеличении исходной концентрации от 1.5 до 1.8 М ширина линии резко уменьшается, а при $C_0 = 1.8$ М зависимость $\delta H(C_0)$ в быстро замороженных водных растворах согласуется с аналогичной зависимостью в застеклованных водно-глицериновых растворах, т.е. выше 1.8 М водный раствор стеклует по всему объему. Стеклование возможно, если вся вода находится в связанном состоянии и ее вымораживания, приводящего к сегрегации растворенных веществ, не происходит. Учитывая, что при $C_0 = 1.8$ М на каждую молекулу $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ приходится 26 молекул воды и что каждый нитрат-анион может связывать 3 молекулы воды [18], мы определили, что ион Gd^{3+} при данной концентрации, помимо первой гидратной оболочки, образует достаточно устойчивую, чтобы проявиться в экспериментах по ЭПР, вторую гидратную оболочку, состоящую из 8–9 молекул воды. Оценка расстояния наибольшего сближения $d = C_0^{-1/3}$ [14] и отсюда радиуса комплекса дает величину $r = 4.87$ Å. Заметим, что для концентрации $C_0 = 3.6$ М, когда на каждую молекулу $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ приходится 11 молекул H_2O и возможно образование только одной гидратной оболочки, получена величина $r = 3.87$ Å, которая хорошо согласуется с рентгеновскими данными ($r = 3.81$ Å [19]). Узкая область от 1.5 до 1.8 М является, по-видимому, переходной зоной от стеклования в микрообластях к стеклованию по всему объему.

На рис. 2 представлены зависимости ширины линий ЭПР от температуры для растворов различных исходных концентраций Gd^{3+} в процессе их медленного охлаждения. Для концентраций 0.4–2 М следует выделить три характерных участка в зависимости $\delta H(T)$: сначала более медленное возрастание δH с понижением температуры, затем более резкое, а при достижении температуры 186 ± 2 К ширины линий ЭПР растворов с различными исходными концентрациями Gd^{3+} в пределах ошибки эксперимента совпадают ($\delta H = 1150 \pm 25$ Гс) и не зависят от дальнейшего понижения температуры. Заметим, что величины δH , соответствующие платообразному участку, одинаковы для режимов медленного и быстрого охлаждения. Следовательно, и структура растворов в обоих случаях будет также одинакова. Для раствора с исходной концентрацией 3.6 М, близкой к максимальной растворимости $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ в воде, изменение δH с понижением температуры является незначительным.

Поведение $\delta H(T)$ в процессе медленного охлаждения может быть согласовано с диаграммой состояния растворов. Начиная с 273 К, происходит постепенное вымерзание свободной воды, а растворенная соль вытесняется в незамерзшие области, образуя повышенные локальные концентрации. Это приводит к усилению межмолекулярных диполь-дипольных взаимодействий в микрообластях, в результате чего ширина линии растет. Рост δH вызывает также и ослабление усредняющего действия движения с понижением темпе-

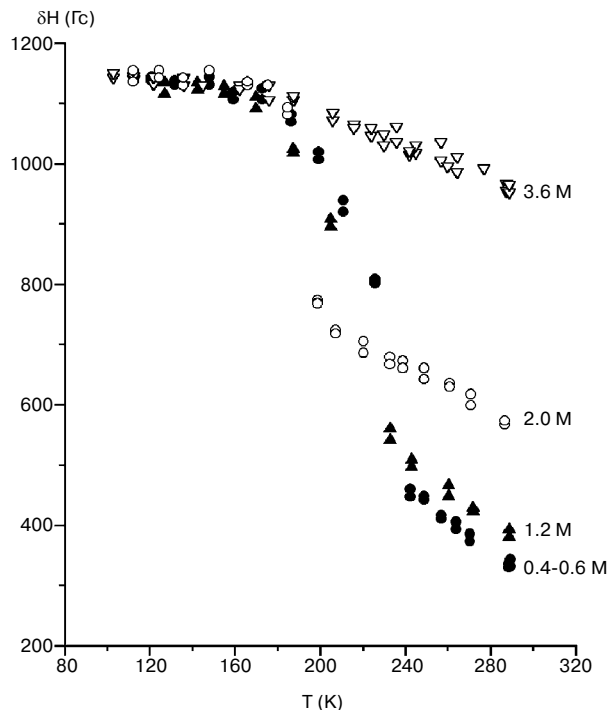


Рис. 2. Температурная зависимость ширины линий ЭПР для водных растворов $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ различных концентраций в процессе их медленного охлаждения.

ратуры. При температуре эвтектики жидкие области с растворенным веществом затвердевают, и ширина линии ЭПР, в соответствии с предсказаниями теории для межмолекулярных взаимодействий в твердом теле, перестает зависеть от дальнейшего понижения температуры. Измерение времен спин-решеточной релаксации подтвердило, что вплоть до $T = 185 \pm 5$ К микрообласти являются жидкими ($T_1 \sim 10^{-9}$ с), а ниже этой температуры микрообласти затвердевают ($T_1 \sim 10^{-7}$ с).

Таким образом, температуру 185 ± 5 К можно считать температурой эвтектики, а соответствующий ширине линии $\delta H = 1150 \pm 25$ Гс состав с $C_{\text{лок}} = 3.6$ М – эвтектическим составом. К сожалению, мы не смогли сопоставить данные, полученные нами методом ЭПР, с данными диаграмм состояния, т.к. их поиск в литературе для водных растворов нитрата гадолиния не привел к успеху. Такие сопоставления были сделаны ранее для водных растворов нитрата марганца [5] и показали прекрасное согласие результатов, полученных методами ЭПР и динамической калориметрии.

Более слабое концентрирование растворенного вещества на начальном этапе охлаждения в относительно разбавленных растворах $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ может быть связано с проявлением уже упомянутого нами эффекта адсорбции на поверхности капилляров [16, 17]. Мы полагаем, что вплоть до определенных температур аквакомплексы Gd^{3+} , непосредственно взаимодействующие с поверхностью капилляра, не участвуют или слабо участвуют в процессе сегрегации растворенного вещества в микрообластях. Дальнейшее понижение температуры приводит к акти-

зации указанного процесса, в результате чего наблюдается резкое повышение локальных концентраций гадолиния. Отметим, что в водных растворах Mn^{2+} и Cr^{3+} , в которых эффекты адсорбции не наблюдались, концентрирование растворенного вещества при вымораживании свободной воды происходит с одной скоростью [4–7]. В сильно концентрированных растворах количество свободной воды незначительно или она отсутствует (при $C_0 = 3.6$ М на каждую молекулу $Gd(NO_3)_3$ приходится всего 11 молекул H_2O), поэтому охлаждение не вызывает заметного концентрирования растворенного вещества, а слабый рост δH с понижением температуры до температуры эвтектики, по-видимому, связан с изменением интенсивности молекулярного движения в растворе.

Заметим, что при использованных нами скоростях медленного охлаждения состав затвердевших микрообластей следует считать стеклообразным, т.к. спектры ЭПР ионов Gd^{3+} в микрообластях аналогичны спектрам в застеклованных по всему объему растворах для значений $C_{лок}$, соответствующих определенным C_0 . Как показали предыдущие исследования замороженных растворов солей Cr^{3+} и Mn^{2+} [4–9], для кристаллизации застеклованных микрообластей необходимо значительно более медленное изменение температуры и в данной работе такие измерения не проводились.

В работе также принимали участие сотрудники Казанского государственного энергетического университета А. М. Гатауллин и Ф. М. Гумеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 00-03-32915а).

Литература

1. Гринберг О.Я., Никитаев А.Т., Замаев К.И., Лебедев Я.С.: Журн. структ. химии **10**, 230 (1969)
2. Хайрутдинов Р.Ф., Замаев К.И.: Изв. АН СССР. Сер. хим. **1970**, 1524.
3. Ross T.: J. Chem. Phys. **42**, 3919 (1965)
4. Вишневская Г.П., Гумеров Ф.М.: Журн. физ. химии **LII**, № 8, 1884 (1978)
5. Вишневская Г.П., Гумеров Ф.М., Ягфаров М.Ж.: Журн. физ. химии **LIII**, № 3, 609 (1979)
6. Вишневская Г.П., Гумеров Ф.М., Козырев Б.М.: ДАН СССР **239**, № 5, 1124 (1978)
7. Вишневская Г.П., Гумеров Ф.М.: Журн. физ. химии **LV**, № 4, 955 (1981)
8. Вишневская Г.П., Фахрутдинов А.Р.: ФТТ **35**, № 7, 1825 (1993)
9. Вишневская Г.П., Фахрутдинов А.Р.: Журн. физ. химии **68**, № 1, 71 (1994)
10. Kanno H., Akama Y.: J. Phys. Chem. **91**, 1263 (1987)
11. Волков Б.А., Вишневская Г.П., Горожанин В.А., Рамазанов Р.Г.: ПТЭ № 4, 167 (1973)
12. Альтшулер С.А., Козырев Б.М.: Электронный парамагнитный резонанс, 2-е изд. М.: Наука 1972. 672 с.
13. Замаев К.И., Молин Ю.Н., Салихов К.М.: Спиновый обмен. Новосибирск: Наука 1977. 317 с.
14. Лебедев Я.С., Муромцев В.И.: ЭПР и релаксация стабилизированных радикалов. М.: Химия 1972. 255 с.
15. Alger R.S.: Electron paramagnetic resonance: techniques and application. New York: Interscience Publishers 1968. 580 p.
16. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Журн. физ. химии **76**, № 5, 874 (2002)
17. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Гатауллин А.М.: ФТТ **45**, № 5, 817 (2003)
18. Елфимов В.И., Джураев В.Д., Вукс М.Ф.: Молекулярная физика и биофизика водных систем. Л.: ЛГУ 1973. 218 с.
19. Yamaguchi T., Nomura M., Wakita H., Ohtaki H.: J. Chem. Phys. **89**, no. 8, 5153 (1988)

О возможном релаксационном магнитоэлектрическом эффекте в резко охлажденном металломезогене

Н. Е. Домрачева, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

На соединении, обладающем жидкокристаллической колончатой фазой LCrCl_3 , где L – азоциклононановый лиганд, обнаружен эффект постоянства величины магнитной восприимчивости в температурном интервале от гелиевой до 10 К. Эффект наблюдался при резком охлаждении образца из дипольно-упорядоченной мезофазы и по поведению аналогичен релаксационному магнитоэлектрическому эффекту.

Введение

Создание металломезогенов – соединений, содержащих атомы переходных металлов и способных образовывать жидкокристаллическую фазу, заметно обогатило физику жидких кристаллов оптическими, электрическими и магнитными свойствами [1, 2]. Жидкокристаллическая фаза многих металломезогенов при охлаждении стеклится. При этом сохраняется надмолекулярная организация, возникающая в мезофазе, что позволяет формировать упорядоченные низкоразмерные молекулярные структуры и исследовать их свойства при низких температурах. В работе [3] методами ЭПР и диэлектрической спектроскопии выявлены особенности магнитных и электрических свойств мезогена хрома LCrCl_3 (рис. 1) в дискотических (колончатых) фазах. Эти особенности связаны с конденсацией мягкой моды и свидетельствуют о переходе системы (в Col_{hd} мезофазе) из параэлектрического в дипольно-упорядоченное состояние. Локальное дипольное упорядочение в колонке из LCrCl_3 молекул возникает вследствие коррелированных вдоль колонки искажений связей Cr–Cl и за счет смещения ионов Cr^{3+} из центральносимметричных позиций. В результате электрический дипольный момент связи Cr–Cl имеет несколько дискретных ориентаций, каждой из которых соответствует потенциальная яма.

Наличие одновременно магнитных (парамагнитных) и электрических дипольных свойств у мезогена хрома в условиях многоямного потенциала позволяет рассматривать его в качестве объекта потенциально обладающего магнитоэлектрическим эффектом, для наблюдения которого ранее [4–9] в качестве внешнего воздействия использовалось нестационарное электрическое поле.

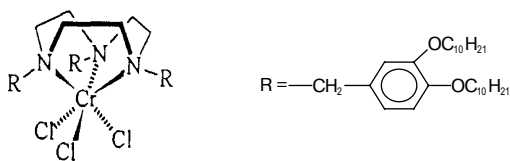


Рис. 1. Структурная формула металломезогена LCrCl_3 (слева) и заместителя R (справа).

Экспериментальная часть

Исследовался мезоген хрома LCrCl_3 , находящийся в застеклованном жидкокристаллическом состоянии, которое получалось резким охлаждением соединения из дипольно-упорядоченной Col_{hd} мезофазы. Измерения магнитной восприимчивости выполнены на SQUID магнитометре, сконструированном Н. Гарифьяновым в КФТИ, точность стабилизации температуры была лучше 0.1 К. На рис. 2 приведены температурные зависимости магнитной восприимчивости для циклов нагрева и охлаждения. В цикле нагрева наблюдалось постоянство величины магнитной восприимчивости в области температур 4.2–10 К с последующим ее резким спадом. В цикле охлаждения образца величина магнитной восприимчивости монотонно росла с понижением температуры по закону Кюри-Вейса, $\chi_{\text{CW}} = C/(T - \theta) + \chi_{\text{dia}}$ с константой C, соответствующей значению спина $S = 3/2$ и $\theta = 0.65$ К [3]. Прямой и обратный температурные ходы не совпадали ниже $T = 11$ К, где фиксировался гистерезис.

Дополнительно проведены эксперименты по изучению релаксационного характера наблюдаемого эффекта. Если система выдерживалась при $T = 7$ К, то равнове-

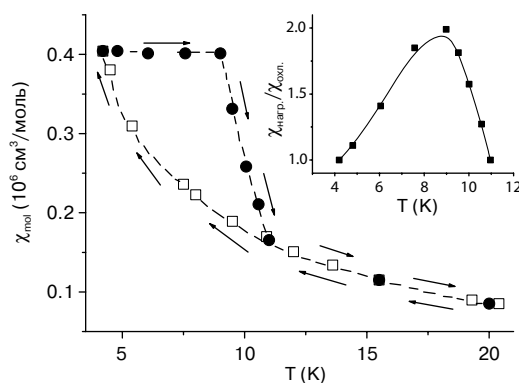


Рис. 2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости при нагревании и охлаждении комплекса LCrCl_3 . □ охлаждение, ■ нагрев. На вставке – отношение этих восприимчивостей.

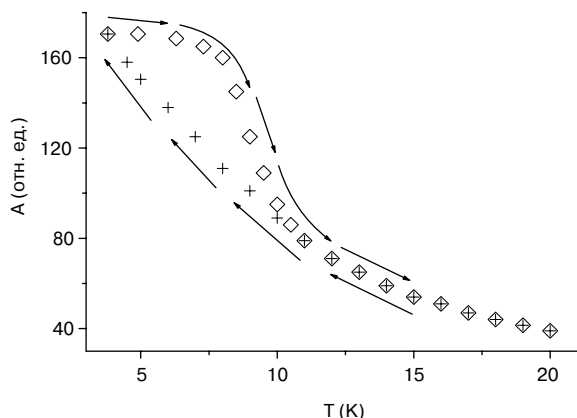


Рис. 3. Температурная зависимость интегральной интенсивности (A) линии ЭПР Cr^{3+} при нагревании ($\diamond$) и охлаждении образца ($+$).

ное значение χ_{CW} (описываемое законом Кюри-Вейса) достигалось в течении 7 мин; при $T = 7.6 \text{ K}$ – за 3.5 мин.

Исследование магнитного резонанса проводилось на радиоспектрометре ЭПР фирмы “Tomson”, точность стабилизации температуры составляла 0.1 K. Фиксировалось похожее поведение температурной зависимости интегральной интенсивности $A = I\Delta H^2$ сигнала ЭПР, которая пропорциональна величине магнитной восприимчивости (I – пиковая высота первой производной, ΔH – пик-пиковая ширина линии). Регистрируемые изменения ЭПР приведены на рис. 3. Спектр застеклованного из $\text{CoI}_{\text{хд}}$ мезофазы образца представлял собой одну слабо асимметричную линию с шириной 500 Гс.

Обсуждение результатов

Известно, что релаксационный магнитоэлектрический эффект в парамагнетиках заключается в заметном увеличении намагниченности образца (спиновой поляризации) при включении-выключении внешнего электрического поля E или наложении переменного поля. Эффект наблюдался в диэлектриках [4–9], содержащих парамагнитные центры, с которыми, кроме магнитного, связан и электрический дипольный момент, имеющий несколько дискретных ориентаций. После включения (выключения) внешнего электрического поля система реориентирующихся электрических диполей будет находиться в неравновесном состоянии и при достаточно медленном выключении поля E (при наличии связи между электрическими и магнитными диполями) в такой системе возможны кратковременные отклонения намагниченности от ее равновесных значений, обусловленные возрастанием спиновой поляризации парамагнитных ионов. Модели, объясняющие увеличение спиновой поляризации, предложены в [4–9].

Существенное отличие нашего эксперимента от предшествующих состоит в использовании в качестве внеш-

него воздействия внутреннего электрического поля мезофазы.

В соединении LCrCl_3 электрическая подсистема диполей переводится в неравновесное состояние резким охлаждением из дипольно-упорядоченной фазы. Релаксация этой подсистемы к равновесному состоянию, как и в прежних опытах, сопровождается перераспределением населенности зеемановских подуровней [6–9] и движением потенциальных ям [4, 5] за счет изменения величины внутреннего электрического поля (т.е. штарковских расщеплений). В результате, аналогично [4–9], удастся наблюдать возрастание спиновой поляризации.

Регистрируемый на объекте нашего исследования эффект по внешнему проявлению аналогичен температурной зависимости эффекта увеличения относительной намагниченности переменным электрическим полем [6, 10]. Возрастание неравновесной магнитной восприимчивости относительно ее равновесных значений (описываемых законом Кюри-Вейса) достигает в нашем случае двух раз ($\chi_{\text{нагр.}}/\chi_{\text{охл.}}$) (см. вставку на рис. 2).

Обнаружение релаксационного эффекта магнитоэлектрического типа в застеклованном жидкокристаллическом образце представляет значительный интерес в связи с поиском новых низкоразмерных материалов, проявляющих магнитоэлектрические свойства. Можно надеяться также, что найдена молекулярная система, которая позволит наблюдать релаксационный магнитоэлектрический эффект во внешних электрических полях, из которых наибольший интерес будут представлять: эффект квазистационарного увеличения намагниченности парамагнетика переменным электрическим полем [6, 7, 9] и возможность получения мазер-эффекта [5].

Авторы выражают благодарность Н. Н. Гарифьянову за помощь в проведении измерений на SQUID-магнетометре. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 02-03-32179).

Литература

1. Serrano J.L. (ed.): *Metallomesogens: synthesis, properties, and applications*. Weinheim: VCH 1996. 498 p.
2. Овчинников И.В., Галяметдинов Ю.Г.: Рос. хим. журн. **45**, № 3, 74 (2001)
3. Домрачева Н.Е., Овчинников И.В., Туранов А.Н., Латтерманн Г., Фачер А.: ФТТ **43**, № 6, 1145 (2001)
4. Вихнин В.С., Сочава Л.С., Крылов В.А., Толпаров Ю.Н.: Письма в ЖЭТФ **40**, № 10, 426 (1984)
5. Бурсиан В.Э., Вихнин В.С., Сочава Л.С.: Изв. Акад. наук СССР, Сер. физ. **52**, № 3, 477 (1988)
6. Матяш И.В., Брик А.Б., Заяц А.П., Мазыкин В.В.: Радиоспектроскопия кварца. Киев: Наукова Думка 1987. 165 с.
7. Брик А.Б.: Радиоспектроскопия твердого тела. Киев: Наукова Думка 1992. 202 с.
8. Брик А.Б., Матяш И.В., Ищенко С.С.: ЖЭТФ **79**, № 5, 1902 (1980)
9. Брик А.Б.: ФТТ **24**, № 2, 500 (1982)
10. Брик А.Б.: ФТТ **27**, № 12, 3687 (1985)

Делокализация неспаренных электронов ионов Cu^{2+} в монокристалле $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$

Т. А. Иванова

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

В спектрах ЭПР монокристаллов $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ обнаружена суперсверхтонкая структура от взаимодействия ионов Cu^{2+} с ядерными моментами ионов Ga^{3+} , расположенными во второй координационной сфере по отношению к ионам меди. Показано, что основную роль в формировании суперсверхтонких взаимодействий играют каскадные процессы переноса спиновой плотности через ионы кислорода.

Прямая информация о распределении спиновой плотности парамагнитного иона на ближайших структурных элементах может быть получена при наблюдении суперсверхтонкой структуры (ССТС) в спектрах ЭПР [1]. Однако использование такого подхода для изучения характера распределения спиновой плотности в слоях CuO_2 в высокотемпературных сверхпроводниках типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ затруднено, поскольку в самих сверхпроводниках сигнал ЭПР не наблюдается. Поэтому для получения данных о степени и характере делокализации неспаренных электронов в медь-кислородных октаэдрах мы исследовали изоструктурный диамагнитный кристалл LaSrGaO_4 , допированный ионами меди.

Кристаллы LaSrGaO_4 принадлежат к структурному типу K_2NiF_4 и имеют пространственную группу $I4/mmm$ с $Z = 1$ с параметрами единичной ячейки $a = 0.38437$ нм и $c = 1.2688$ нм [2]. Кристаллическая решетка построена из слоев соединенных кислородами октаэдров GaO_4O_2 , чередующихся со слоями $\text{La}(\text{Sr})\text{O}$, включающими апикальные кислороды галлиевых октаэдров. Октаэдры слабо искажены вдоль оси c : $\text{Ga-O}_{\text{plane}} = 0.1922$ нм и $\text{Ga-O}_{\text{apic}} = 0.2134$ нм. Считается, что ионы La и Sr статистически разупорядочены [3]. Ионы Cu^{2+} замещают ионы Ga^{3+} с нелокальной компенсацией недостающего положительного заряда и находятся в поле лигандов тетрагональной симметрии, возмущенном отсутствием порядка в La-Sr системе. Структура ближайшего окружения иона Cu^{2+} показана на рис. 1.

ЭПР монокристаллов $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ изучен в X-диапазоне в интервале температур 4.2–300 К. Ориентация образцов для измерений осуществлялась с помощью рентгеновской дифракции при окончательной доводке по спектру ЭПР. Измерения спектров проводились в плоскостях (110) и (001). Спектры ЭПР, записанные для направлений магнитного поля $\mathbf{B}$ вдоль [001], [110] и [100], приведены на рис. 2. Видно, что сигналы расщеплены на несколько компонент, число которых превышает ожидаемое для взаимодействия с ядрами $^{63,65}\text{Cu}$ ($I_{\text{Cu}} = 3/2$). Ближайшие к иону меди лиганды ^{16}O имеют нулевой ядер-

ный магнитный момент. Следовательно, дополнительные расщепления в наблюдаемом спектре обязаны ионам Ga^{3+} ($I_{\text{Ga}} = 3/2$), находящимся в следующей координационной сфере относительно ионов меди.

Наблюдаемые спектры описывались спин-гамильтонианом, включающим взаимодействие с четырьмя плоскостными ионами Ga^{3+} :

$$\mathcal{H} = \beta \mathbf{B} \{g\} \mathbf{S} + \mathbf{I}_{\text{Cu}} \{A_{\text{Cu}}\} \mathbf{S} + \sum_{i=1}^4 \mathbf{I}_{\text{Ga}}^i \{A_{\text{Ga}}^i\} \mathbf{S} \quad (1)$$

с $S = 1/2$, $I_{\text{Cu}} = 3/2$, $I_{\text{Ga}} = 3/2$. Электрические квадрупольные взаимодействия не учитывались, поскольку в спектрах ЭПР квадрупольные эффекты обнаружены не были. Изучение угловых зависимостей спектров показало, что $\{g\}$ - и $\{A\}$ -тензоры имеют аксиальную симметрию, а их главные оси совпадают с кристаллографическими ося-

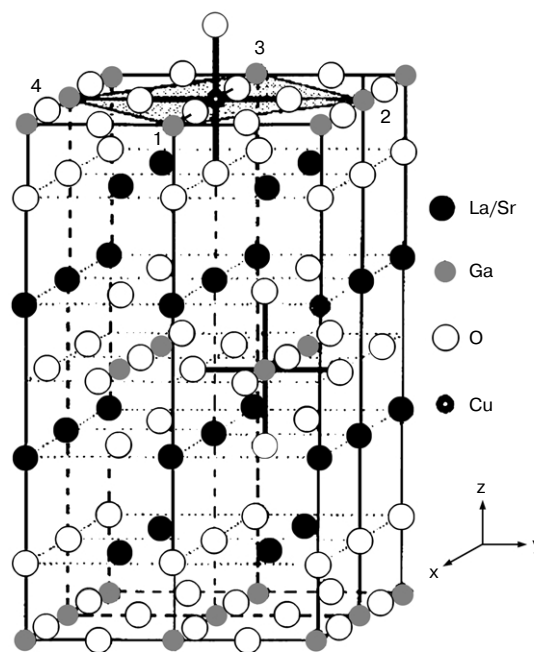


Рис. 1. Фрагмент структуры кристалла LaSrGaO_4 , допированного ионами Cu^{2+} . 1–4 – нумерация лигандов.

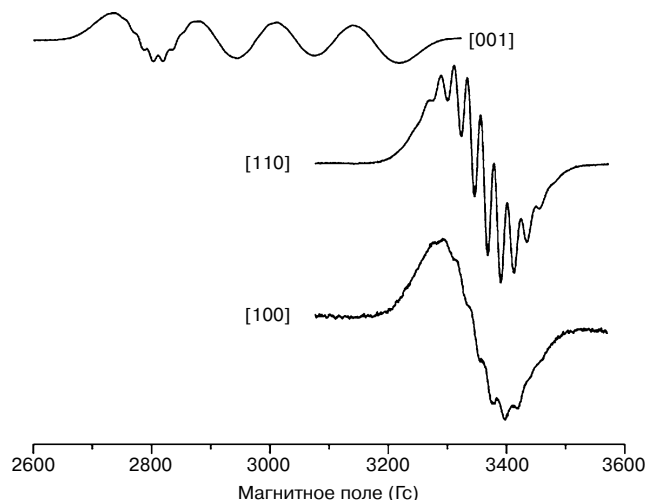


Рис. 2. Спектры ЭПР $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ при ориентации магнитного поля вдоль осей [001], [110] и [100].

ми. Нумерация лигандов и направления главных осей показаны на рис. 1.

Для направления $\mathbf{B} \parallel [001]$ параметры спин-гамильтониана определялись непосредственно из экспериментального спектра. Все четыре иона Ga^{3+} в этой ориентации эквивалентны. Обозначим $A_{\parallel \text{Ga}} = A_{\text{Ga}}^{(1)} = A_{\text{Ga}}^{(2)} = A_{\text{Ga}}^{(3)} = A_{\text{Ga}}^{(4)}$. Для направлений $\mathbf{B} \parallel [100]$ и $\mathbf{B} \parallel [010]$ суперсверхтонкая структура не разрешалась из-за перекрытия компонент суперсверхтонкой структуры от четырех попарно эквивалентных ионов Ga. Величину константы в направлении оси связи Cu-O-Ga в плоскости (001) обозначим $A_{\text{Ga},x}^{(1)} = A_{\text{Ga},y}^{(2)} = A_{\text{Ga},x}^{(3)} = A_{\text{Ga},y}^{(4)}$, а перпендикулярно ей – $A_{\text{Ga},y}^{(1)} = A_{\text{Ga},x}^{(2)} = A_{\text{Ga},y}^{(3)} = A_{\text{Ga},x}^{(4)}$. Наилучшее разрешение компонент спектра в плоскости (001) имело место для ориентации $\mathbf{B} \parallel [110]$, когда все четыре иона Ga^{3+} эквивалентны. Наблюдалось 13 компонент суперсверхтонкой структуры, что соответствует величине $N = (2nI_{\text{Ga}} + 1)$ для $n = 4$. Ожидаемое соотношение интегральных интенсивностей компонент в этом случае должно быть 1:4:10:20:31:40:44:40:31:20:10:4:1. Наличие двух изотопов ^{69}Ga и ^{71}Ga с естественным содержанием 60.4% и 39.6%, соответственно, приводят к уширению наблюдаемых линий ЭПР и к отклонениям соотношений их интенсивностей от ожидаемых. Процедура моделирования спектров учитывала все соотношения между расщеплениями сигналов и их интенсивностями, обусловленные наличием изотопов Ga и Cu. Мы полагали, что константы сверхтонкой структуры пропорциональны гироманнитным отношениям: для изотопов ^{69}Ga и ^{71}Ga $A_{71\text{Ga}}/A_{69\text{Ga}} = \gamma_{71\text{Ga}}/\gamma_{69\text{Ga}} = 1.2701$ и для изотопов ^{63}Cu и ^{65}Cu $A_{65\text{Cu}}/A_{63\text{Cu}} = \gamma_{65\text{Cu}}/\gamma_{63\text{Cu}} = 1.0701$. Соотношение интенсивностей линий изотопов принималось пропорциональным их естественному содержанию. В результате моделирования спектра, измеренного для ориентации $\mathbf{B} \parallel [110]$, получены величины параметров $g_{\perp}$, $A_{\text{Cu}\perp}$ и $A_{\text{Ga}[110]}$. Параметры $A_{\text{Ga},x}^{(i)}$ и $A_{\text{Ga},y}^{(i)}$ оценивались с использованием экспериментальных величин $A_{\text{Ga}[110]}$ и $A_{\text{Ga}\parallel}$ и заключения об аксиальной сим-

Таблица 1. Параметры спектра ЭПР кристалла $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ (A в 10^{-4} см^{-1}).

Параметр	Эксперимент	Константы CCTC			
		Ga^{69}	Ga^{71}	Теория для Ga^{71}	
$g_{\parallel}$	2.320 ± 0.005				
$g_{\perp}$	2.058 ± 0.005				
$A_{\text{Cu}\parallel}$	143 ± 1				
$A_{\text{Cu}\perp}$	≈ 3				
$A_{\text{Ga},z} = A_{\text{Ga},y}$	18.4	16.8	21.3	21.50	
$A_{\text{Ga}[110]}$	22.1	19.5	24.7		
$A_{\text{Ga},x}$	25.3	21.9	27.7	27.66	

метрии тензора CCTC. Поскольку $A_{\text{Ga},y} = A_{\text{Ga},z}$, а $A_{[110]\text{Ga}}^2 = (A_{\text{Ga},x}^2 + A_{\text{Ga},y}^2)/2$, $A_{\text{Ga},x}$ определяется однозначно. Здесь и при дальнейшем изложении для определенности будем подразумевать, что анализ тензора CCTC проводится для $\text{Ga}(1)$. Параметры спин-гамильтониана приведены в таблице 1. Все параметры спектра (g , A_{Cu} , A_{Ga} и δB) в пределах точности измерений не зависят от температуры при её понижении до ~ 15 К. Ниже 15 К начинается уширение линий спектра, вызываемое насыщением сигналов ЭПР.

Характерной особенностью наблюдаемых в монокристалле спектров является асимметричное расположение линий суперсверхтонкой структуры относительно центра соответствующей сверхтонкой компоненты. Практически только спектр для ориентации [110] можно назвать симметричным (рис. 3). Такая асимметрия спектра может быть объяснена влиянием на параметры спектра ионов La^{3+} и Sr^{2+} , расположенных следом за кислородом по оси [001]. Возможны три различные комбинации ионов La и Sr по оси [001]. Как показано на рис. 4, асимметричный спектр хорошо описывается суммой трех симметричных спектров с несколько различающимися

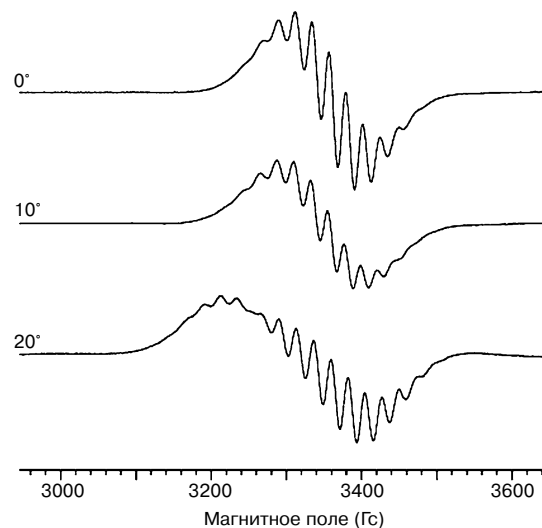


Рис. 3. Спектры ЭПР $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$ в плоскости (001) при различных значениях угла φ (угол $\varphi = 0$ соответствует ориентации магнитного поля вдоль оси [110]).

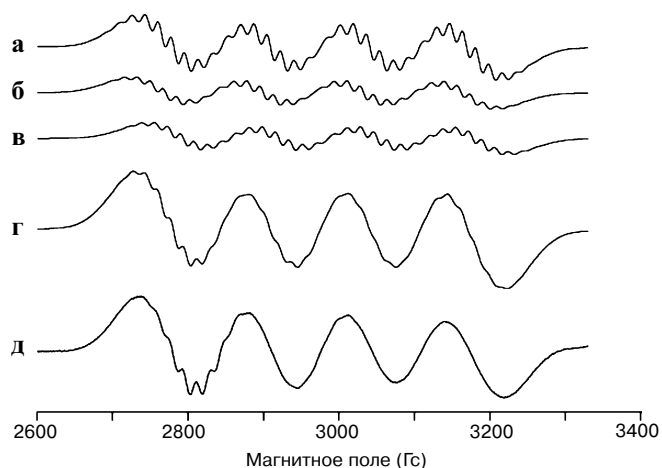


Рис. 4. Моделирование спектра ЭПР $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$, записанного при ориентации магнитного поля вдоль оси [001]: **а** $g = 2.320$, $A_{\text{Ga s}} = 140.0 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_{\text{Ga p}} = 149.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$; **б** $g = 2.327$, $A_{\text{Ga s}} = 141.8 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_{\text{Ga p}} = 150.6 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$; **в** $g = 2.312$, $A_{\text{Ga s}} = 138.0 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_{\text{Ga p}} = 147.0 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$; **г** суммарный теоретический спектр; **д** экспериментальный спектр в ориентации [001].

величинами g и A_{Cu} и соотношением интенсивностей 1:2:1, соответствующим вероятностям возникновения комбинаций La-La, La-Sr, Sr-Sr по оси [001] в случае статистического распределения ионов La^{3+} и Sr^{2+} в позиции тяжелых металлов. Такой подход позволил смоделировать и все другие асимметричные спектры. Этот факт может быть интерпретирован как доказательство отсутствия в монокристалле областей, обогащенных La и Sr, в отличие от аналогичных керамик, где наблюдалось только две разновидности центров, отличающихся степенью тетрагональных искажений [4].

Оценим изотропный $A_{\text{Ga s}}$ и анизотропный $A_{\text{Ga p}}$ вклады в константу суперсверхтонкой структуры для приведенных в таблице 1 экспериментальных величин. В соответствии с [5] для выбранного в данной работе направления магнитных осей комплекса:

$$\begin{aligned} A_{\text{Ga s}} &= 1/3(A_{\text{Ga x}} + 2A_{\text{Ga z}}), \\ A_{\text{Ga p}} &= 1/3(A_{\text{Ga x}} - A_{\text{Ga z}}), \end{aligned} \quad (2)$$

откуда $A_{\text{Ga s}} = 20.7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_{\text{Ga p}} = 2.3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Изотропное взаимодействие $A_{\text{Ga s}}$ возникает из-за делокализации спиновой плотности неспаренного электрона Cu^{2+} на s-орбиталь иона Ga (его электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$). Анизотропная часть взаимодействия $A_{\text{Ga p}}$ может быть записана как: $A_{\text{Ga p}} = A_{\text{d}} + A_{\text{Ga } \sigma} - A_{\text{Ga } \pi}$ и означает сумму эффекта делокализации на p_{σ} - и p_{π} -орбиталях Ga^{3+} и диполь-дипольного взаимодействия A_{d} между ядрами $^{69,71}\text{Ga}$ и электронным спином соседнего иона Cu^{2+} . В модели точечных диполей $A_{\text{d}} = g_n \beta_n g \beta R^{-3}$ и для $g_{\perp} = 2.058$ и $R = 0.38437 \text{ нм}$ диполь-дипольное взаимодействие $A_{\text{d}} = 0.12 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Видно, что изотропный вклад $A_{\text{Ga s}}$ на порядок величины больше, чем $A_{\text{Ga } \sigma} - A_{\text{Ga } \pi} = 2.18 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

Теоретический анализ полученных данных в рамках теории конфигурационных взаимодействий выполнен О. А. Аникеенком. Рассматривались каскадные процессы переноса электронов с 2s- и 2p-орбиталей кислорода на медные орбитали и с 3s- и 3p-орбиталей галлия на освобождающиеся орбитали кислорода, обусловленные эффектами перекрывания и ковалентности [6]. Полученное хорошее соответствие величин рассчитанных и экспериментальных констант (см. таблицу 1) подтверждает правомерность используемой модели.

Работа выполнена совместно с Ю. В. Яблоковым и М. Аугустыняк-Яблоковой (Институт молекулярной физики ПАН, г. Познань). Кристаллы для исследований выращены П. Рейче и П. Юкер (Институт роста кристаллов, г. Берлин).

Литература

1. Аникеенок О.А., Гумеров Р.М., Ерёмин М.В., Иванова Т.А., Яблоков Ю.В.: ФТТ **26**, № 8, 2249–2253 (1984)
2. Reuter I., Muller-Buschbaum H.: Z. Anorg. Allg. Chem. **584**, 119–124 (1990)
3. Oudalov J.P., Daoudi A., Joubert J.P., Le Flem G., Hagenmüller P.: Bull. Soc. Chim. France **10**, 3408–3414 (1970)
4. Yablokov Yu.V., Ivanova T.A., Shipunova S.Yu., Chezhina N.V., Zvereva I.A., Bobrisheva N.P.: Appl. Magn. Reson. **2**, 547–558 (1991)
5. Owen J., Thorley J.H.M.: Rep. Prog. Phys. **29**, 675–679 (1965)
6. Anikeenok O.A., Augustyaniak-Jablokow M.A., Ivanova T.A., Reiche P., Uecker R., Yablokov Yu.V.: Physica B **325C**, 246–255 (2003)

Осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в бислоях сильный ферромагнетик/сверхпроводник

Б. П. Водопьянов, Л. Р. Тагиров

Лаборатория физики перспективных материалов
и отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

На основе выведенных граничных условий для квазиклассических функций Грина вычислена температура сверхпроводящего перехода T_c бислоя чистый ферромагнетик/“грязный” сверхпроводник. Такая комбинация соответствует условиям большинства экспериментов, в которых использовались Fe, Ni, Co или Gd в качестве материала ферромагнитного слоя. Показано, что T_c осциллирует с изменением толщины ферромагнитного слоя.

Контакты и слоистые системы сверхпроводник/ферромагнетик интересны как с точки зрения реализации в них неоднородного спаривания типа Ларкина-Овчинникова-Фульде-Ферреля (ЛОФФ), так и в качестве основной комбинации материалов для конструирования пи-контактов и сверхпроводящих логических цепей на их основе. Неоднородное спаривание в ферромагнетике проявляется в осцилляциях температуры сверхпроводящего перехода, туннельной плотности состояний и джозефсоновского тока в би- и мультислоях ферромагнетик/сверхпроводник (Ф/С). Хотя ЛОФФ-сценарий может считаться доказанным в контактах сверхпроводников со слабыми ферромагнетиками – ферромагнитными сплавами с низкой температурой магнитного упорядочения (100 К и ниже), для контактов сверхпроводников с сильными ферромагнетиками (Fe, Co, Ni, Gd) вопрос остается открытым. В настоящий момент имеются вычисления туннельной плотности состояний и температуры сверхпроводящего перехода в Ф/С бислоях, которые не предсказывают осцилляций указанных величин как функции толщины ферромагнитного слоя, если ферромагнетик чистый. Под чистым ферромагнетиком понимается материал, в котором длина волны осцилляций парной волновой функции мала по сравнению с объемной длиной свободного пробега электронов проводимости.

Таким образом, возникает вопрос, как получить информацию о характере парных корреляций в сильном ферромагнетике, если корреляции типа ЛОФФ не проявляют себя в осцилляционных явлениях, а джозефсоновский пи-контакт почти невозможно сделать, так как надо работать с толщинами в диапазоне 2–5 монослоев ферромагнитного металла. В настоящей статье мы покажем, что температура сверхпроводящего перехода в бислойной системе чистый ферромагнетик/сверхпроводник осциллирует с изменением толщины ферромагнитного слоя. Для этого найдём решение для парной волновой функции в ферромагнетике, выведем граничные условия для квазиклассических функций Грина для границы раздела чистый ферромагнетик/“грязный” сверхпроводник и, используя их, найдём зависимость температуры сверхпро-

водящего перехода бислоя Ф/С от параметров ферромагнитной плёнки.

На рис. 1 приведены результаты расчета для следующего набора параметров:

$$\delta = p_\uparrow/p_\downarrow = 0.65, \quad p_\uparrow l_\uparrow = 40, \\ l_\uparrow/l_\downarrow = 2.5, \quad \xi^S/\xi_{\text{BCS}}^S = 0.25,$$

где δ – параметр поляризации, p_α и l_α ($\alpha = \uparrow, \downarrow$) – импульс Ферми и длина свободного пробега электрона в соответствующей спиновой подзоне ферромагнетика, ξ^S – длина когерентности сверхпроводника при температуре сверхпроводящего перехода T_c . Параметры примерно соответствуют контакту никеля и ниобия или ванадия.

Из рис. 1 видно, что критическая температура бислоя испытывает затухающие осцилляции с ростом толщины ферромагнитного слоя, как это наблюдалось в экспериментах. Когда сверхпроводник становится достаточно тонким, возможно возвратное поведение (нижняя сплошная кривая на рис. 1), которое также наблюдалось в эксперименте [1]. Результаты другого расчета для параметра спинового расщепления зоны проводимости, что примерно соответствует кобальту, приведены на рис. 2. Из сравнения с рис. 1 видно, что степень подавления T_c в контакте с более сильным (с меньшим значением δ) ферромагнетиком оказывается меньшей, что на первый взгляд нелогично. На самом деле, с ростом поляризации зоны проводимости прозрачность границы уменьшается из-за растущего рассогласования фермиевских импульсов сверхпроводника и спиновых подзон ферромагнетика. Растущая при этом изоляция Ф и С слоев доминирует над усиливающимся распаривающим влиянием обменного поля. Такой сценарий был реализован экспериментально в бислоях $\text{Fe}_x\text{V}_{1-x}/\text{V}$ [2]. При увеличении концентрации железа в ферромагнитном сплаве наблюдалось немонокотное поведение температуры сверхпроводящего перехода в бислое с фиксированной толщиной сверхпроводящего слоя ванадия. Слой чистого железа подавлял T_c слабее сплава. Интересно отметить, что с уменьшением длины свободного пробега электронов в ферро-

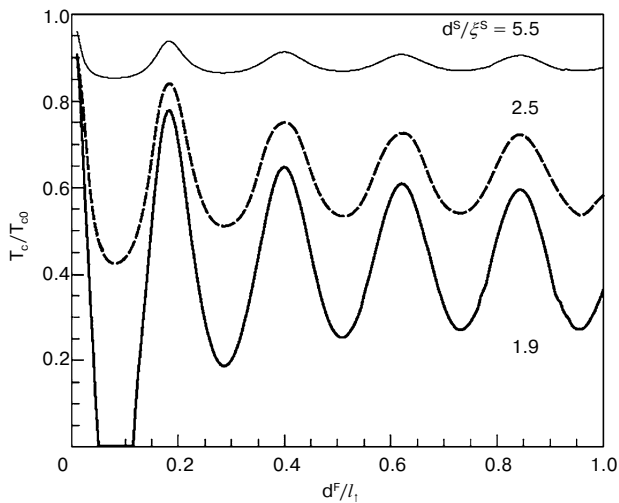


Рис. 1. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода бислоя Ф/С от толщины ферромагнитного слоя при $\delta = 0.65$.

магнетике декремент затухания осцилляций не увеличивается, как это можно было бы ожидать, а уменьшается, по крайней мере, на малых толщинах. Такое парадоксальное поведение объясняется тем, что эффект исключения наклонных траекторий движения электронов, путь которых в ферромагнитной пленке превышает длину пробега, доминирует. По мере приближения длины пробега к толщине пленки, конус траекторий, интерференция которых приводит к геометрическим осцилляциям T_c , сужается вокруг нормали к границе, и решение постепенно превращается в одномодовое. При определенном диапазоне толщин эффект “схлопывания” конуса и уменьшения разброса длин путей интерферирующих волн доминирует над увеличением их затухания.

В заключение отметим, что мы построили последовательную теорию эффекта близости сильный ферромагнетик/“грязный” сверхпроводник и дали принципиальный ответ на вопрос, осциллирует ли температура сверхпроводящего перехода как функция толщины ферромагнитного слоя. Ответ утвердительный – осциллирует, и

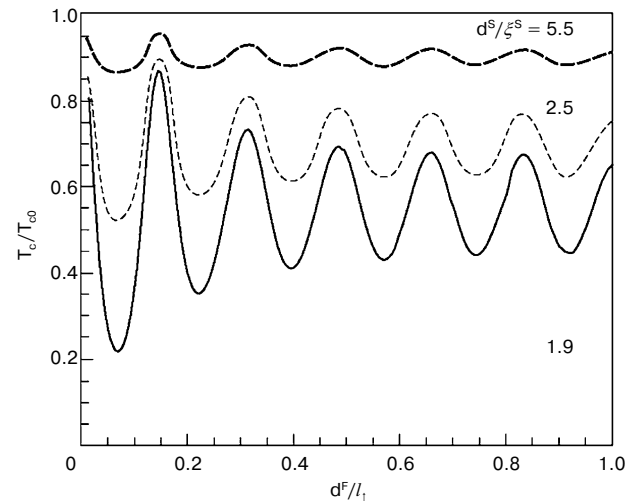


Рис. 2. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода бислоя Ф/С от толщины ферромагнитного слоя при $\delta = 0.55$.

возможно возвратное поведение сверхпроводящей T_c при изменении толщины ферромагнитного слоя. Влияние спинового расщепления на прозрачность границы и, следовательно, на осцилляции критической температуры, включено в расчет в явном виде и согласуется с данными экспериментов. Качественно полученные результаты согласуются со всеми существующими на данный момент экспериментальными наблюдениями.

Подробные расчёты можно найти в статье [3].

Литература

1. Garifullin I.A., Tikhonov D.A., Garifyanov N.N., et al.: Phys. Rev. B **66**, 20505(R) (2002)
2. Aarts J., Geers J.M.E., Bruck E., et al.: Phys. Rev. B **56**, 2779 (1997)
3. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Письма в ЖЭТФ **78**, № 9, 1043–1047 (2003)

Поляризационная развязка суперфлуоресценции и накачки в кристалле дифенила с пиреном

А. А. Калачёв, А. А. Калинин, В. В. Самарцев

Лаборатория нелинейной оптики

Обсуждаются результаты экспериментальных исследований поляризационных свойств суперфлуоресценции в кристалле дифенила с пиреном, главный из которых – поляризационная развязка – состоит в том, что поляризация импульса суперфлуоресценции оказывается перпендикулярной поляризации импульса накачки.

Введение

Оптическое сверхизлучение, в частности суперфлуоресценция (СФ), предсказанное Р. Дике в 1954 году [1], до сих пор остается предметом многочисленных теоретических и экспериментальных исследований (см. обзоры [2, 3]). Одной из причин неугасающего интереса к нему является то, что СФ, будучи ярким примером процесса самоорганизации, образует своеобразный мост между микромиром, в котором происходит самонаведение корреляций между дипольными моментами атомов через общее поле излучения, и макромиром, в котором, через некоторое время задержки, наблюдается когерентный оптический сигнал, интенсивность которого пропорциональна квадрату числа атомов. Именно самоорганизация системы атомов, в ходе которой происходит переход из некогерентного начального состояния в когерентное сверхизлучательное, и является наиболее интересным моментом СФ. Наблюдение сигналов СФ можно сравнить с процессом измерения, позволяющим судить об особенностях взаимодействия атомов на начальной (квантовой) стадии эволюции системы “атомы + поле”, наблюдая те или иные характеристики сигналов СФ. Среди последних следует отметить, прежде всего, время задержки импульса СФ. Эксперименты по триггерному сверхизлучению [4, 5], в которых исследовалась зависимость времени задержки сигнала сверхизлучения от интенсивности триггерного импульса, однозначно показали, что процесс коллективизации системы атомов через общее поле излучения происходит, по сути, в момент спонтанного испускания первого фотона в основную моду излучения среды. Наблюдаемые флуктуации времени задержки обусловлены флуктуациями вакуумного электромагнитного поля и макроскопической поляризации возбужденной среды в начальный момент времени.

Другой важной характеристикой СФ является ее поляризация. Поляризационные закономерности СФ в газовых средах исследовались в работах [6–9]. В частности, экспериментальные исследования [6, 7] показали, что импульсы СФ, в отличие от усиленного спонтанного излучения, всегда являются высоко поляризованными,

даже если начальное состояние атомной системы является некогерентной смесью двух состояний, из которых возможны переходы в основное состояние с испусканием ортогонально поляризованных фотонов. В последнем случае поляризация импульсов СФ будет меняться от импульса к импульсу случайным образом. Что касается поляризационных закономерностей СФ в твердых телах, то они до сих пор остаются мало изученными. Пожалуй, единственными исследованиями, проведенными в этом направлении, являются эксперименты по оптическому сверхизлучению в кристалле дифенила с пиреном [10]. Недавно были проведены более детальные исследования поляризационных свойств СФ в этом кристалле [11], результаты которых и обсуждаются в данной работе.

Свойства симметрии кристалла дифенила с пиреном и их влияние на динамику спектроскопических переходов

Кристалл дифенила ($C_{12}H_{10}$) принадлежит к моноклинной сингонии с двумя молекулами в элементарной ячейке и соответствует федоровской группе симметрии $P2_1/a$. Кристаллографические оси принято обозначать как a , b , c , причем ось c направлена под углом 95.4° к оси a . Имеется еще одна ось, обозначаемая как c' , которая характеризует направление роста кристалла дифенила. Ситуация пояснена на рис. 1. Плотнейший слой молекул дифенила совпадает с плоскостью ab , получившей название плоскости спайности, причем слои накладываются один на другой путем моноклинного сдвига вдоль оси c . Наложение слоев при помощи трансляции формирует более рыхлое образование, чем упаковка внутри каждого слоя, о чем свидетельствует характерная для моноклинных кристаллов совершенная плоскость спайности, проявляющаяся при скалывании и необходимая при ориентации кристалла.

Молекула пирена ($C_{16}H_{10}$), используемая в качестве примеси, принадлежит к точечной группе симметрии D_{2h} . Молекула пирена замещает молекулу дифенила в узлах кристаллической решетки дифенила. Ориентация моле-

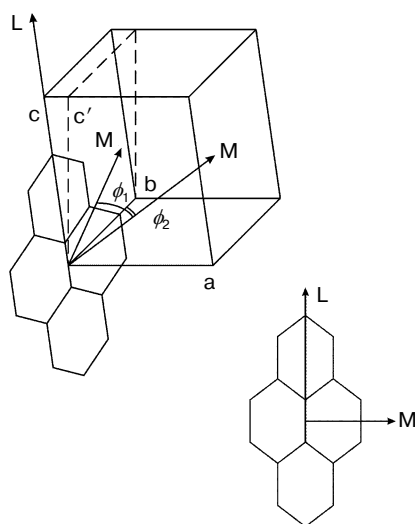


Рис. 1. Схема вхождения молекулы пирена в решетку дифенила. L и M – длинная и короткая оси молекулы пирена, $a = 0.812$ нм, $b = 0.564$ нм и $c = 0.947$ нм, c' – направление роста кристалла. Угол между осями c и c' равен 5.4° . Три возможных ориентации молекулы пирена соответствуют углам $\phi = 0^\circ$, $\phi_1 = 14^\circ$ и $\phi_2 = -4^\circ$, где ϕ – угол поворота вокруг оси L .

кулы пирена при таком замещении пояснена на рис. 1. Молекулярная плоскость пирена лежит в плоскости bc , а её длинная ось L совпадает с направлением оси c кристаллической элементарной ячейки. Отметим, что при поляризационных исследованиях использовались плоскости скола кристаллов (т.е. плоскости ab), а также ac' и bc' – плоскости, которые выпиливались нитяной пилой из монокристаллического блока (обратим внимание на то, что ось c' , с которой совпадает направление роста при выращивании кристаллов, перпендикулярна плоскости ab).

Теоретический расчет процесса вхождения молекулы пирена в кристаллическую решетку дифенила при комнатной температуре выполнен в работе [12]. Этот расчет показал наличие трех минимумов на поверхности потенциальной энергии как функции углов поворота молекулы пирена вокруг осей L , M и нормали к плоскости молекулы. Два из этих минимумов соответствуют углам $\phi_1 = +14^\circ$ и $\phi_2 = -4^\circ$ поворота молекулы вокруг оси L (и, следовательно, оси c) от положения полного совпадения осей M и b . Авторы работы [12] высказали предположение о возможности наблюдения трех центров свечения пирена в дифениле на образцах хорошего оптического качества при низких температурах. Позднее, в работах [13, 14], это предсказание было подтверждено в экспериментах по фотонному эхо и оптическому сверхизлучению, соответственно.

В эксперименте по изучению поляризационных свойств СФ в кристалле дифенила с пиреном использовались образцы с концентрацией молекул пирена, равной $8.4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Накачка осуществлялась на переходе из основного состояния $^1A_g(S_0)$ на один из колебательных подуровней первого электронного воз-

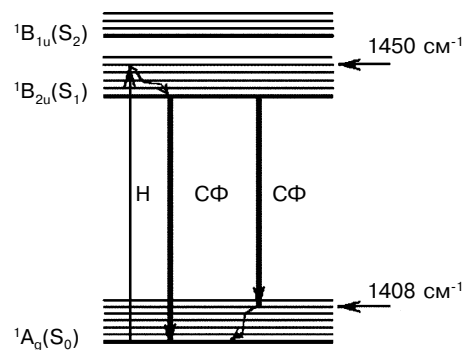


Рис. 2. Схема рабочих уровней молекулы пирена в кристалле дифенила, на переходе между которыми наблюдаются сигналы СФ. Н – импульс накачки.

бужденного состояния $^1B_{2u}(S_1)$ молекул пирена с помощью линейно-поляризованного излучения лазера YAG:Nd³⁺ (а, именно, излучением его третьей гармоники на длине волны 354.7 нм). Схема рабочих уровней молекул пирена в дифениле и соответствующие энергетические переходы пояснены на рис. 2. Образец находился в криостате при температуре жидкого гелия, а возбуждение (накачка) осуществлялось перпендикулярно плоскостям ab , bc' и ac' . Возбужденные электронно-колебательные подуровни не участвовали в формировании СФ, поскольку из-за быстрого безызлучательного перехода за время около 10^{-12} с молекулы пирена оказывались на первом возбужденном электронном уровне, полностью “забывая” информацию о фазе и поляризации импульса накачки. СФ формируется в полной мере на энергетическом переходе $^1B_{2u}(S_1) \rightarrow ^1A_g(S_0)$ (т.е. на 0–0-переходе) на длине волны 373.9 нм (и, соответственно, на частоте $\nu_{0-0} = 26734 \text{ см}^{-1}$). Кроме того, согласно [15], на переходе $^1B_{2u}(S_1) \rightarrow ^1A_g \times a_g$ ($\nu = 25326 \text{ см}^{-1}$), где $^1A_g \times a_g$ – колебательный подуровень основного состояния, соответствующий полносимметричному колебанию с $\nu = 1408 \text{ см}^{-1}$, наблюдается ограниченное сверхизлучение. Следуя работе [16], можно говорить о наблюдении в кристалле дифенила с пиреном двухчастотного оптического сверхизлучения.

Поляризационные закономерности суперфлуоресценции в кристалле дифенила с пиреном

Результаты экспериментального исследования поляризационных закономерностей СФ в кристалле дифенила с пиреном, выполненного во ФТИНТ АН Украины (г. Харьков), сводятся к следующему [11]: имеется только два направления: c' и a , вдоль которых возбуждается СФ (речь идет о направлениях волнового вектора накачки $\mathbf{k}_H$). Кроме того, эксперимент надежно показал, что для того, чтобы произошла накачка, ее вектор поляризации $\mathbf{E}_H$ должен быть параллельным оси b или хотя бы иметь

проекцию на эту ось. Итак, результаты эксперимента предопределили два варианта расположения векторов $\mathbf{k}_H$ и $\mathbf{E}_H$ по отношению к кристаллографическим осям (a , b и c') и осям молекулы пирена (L и M) (рис. 3). Следует отметить, что для случая, когда волновой вектор накачки направлен вдоль оси a , СФ наблюдается при достижении наименьших пороговых мощностей возбуждения. Это объясняется тем, что молекулярная плоскость пирена почти полностью совпадает с кристаллической плоскостью bc' решетки дифенила. Вектор поляризации СФ $\mathbf{E}_{\text{СФ}}$ в обоих вариантах направлен под углом $100\text{--}110^\circ$ по отношению к оси b .

Отметим, что наиболее общая классическая модель люминесцирующей молекулы предполагает наличие двух пространственных осцилляторов, один из которых отвечает за излучение, а другой – за поглощение. Впервые такая модель пространственных осцилляторов была введена А. Яблонским и в ней сделано искусственное разделение процессов поглощения и излучения промежуточными процессами, разрывающими связь между фазами поглощаемой и испускаемой волн. В работе [17] рассмотрен один из частных случаев, когда за поглощение отвечает линейный осциллятор, а за испускание – плоский осциллятор. Именно такая ситуация, по-видимому, реализуется в кристалле дифенила с пиреном, где за поглощение отвечает линейный осциллятор, а за излучение (и, следовательно, за СФ) – плоский. Это подтверждается характером снятых в [18] поляризованных спектров люминесценции и поглощения обсуждаемого кристалла, где нарушена зеркальность отображения этих спектров и показано, что поглощение поляризовано либо вдоль оси b (например, на частоте 0–0-перехода), либо вдоль оси c' , а поляризация люминесценции одинакова вдоль обеих осей, т.е. за поглощение отвечает линейный осциллятор, а за излучение – плоский.

Рассмотрим геометрию возбуждения сигналов СФ, соответствующую наименьшим энергиям накачки (рис. 4). Поскольку электрический дипольный момент имеет проекции на оси c' и b , можно было бы ожидать развития СФ с обоими направлениями поляризации. Но нуж-

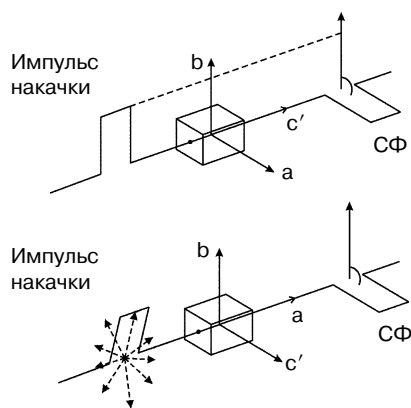


Рис. 3. Варианты возбуждения кристалла дифенила с пиреном, при которых наблюдаются сигналы СФ.

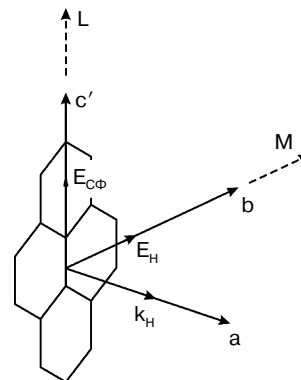


Рис. 4. Геометрия возбуждения сигналов СФ, соответствующая наименьшему пороговому значению энергии импульса накачки. $\mathbf{k}_H$ и $\mathbf{E}_H$ – волновой и единичный векторы поляризации импульса накачки, $\mathbf{E}_{\text{СФ}}$ – единичный вектор поляризации импульса СФ.

но принять во внимание то обстоятельство, что мы имеем дело с оптически плотным образцом. В этих условиях будет иметь место сильное перепоглощение зарождающейся СФ с поляризацией вдоль оси b и ее гашение (пленение излучения). В итоге, из двух возможных проекций поляризаций остается непогашенной лишь проекция на ось c' . Если же принять во внимание три возможные ориентации молекулы пирена, связанные с поворотом вокруг оси L , а также угол между осями c и c' , то в пределах ошибки эксперимента становится объяснимым наблюдаемый угол $100\text{--}110^\circ$ между плоскостью поляризации СФ и осью b .

Заключение

Таким образом, в данной работе выполнено исследование поляризационных свойств СФ в кристалле дифенила с пиреном. Показано, что поляризационные закономерности СФ в данном кристалле существенно отличаются от таковых в газовых средах, что связано с особенностями вхождения примесей в кристаллическую матрицу и симметрией кристаллической решетки. В частности, обнаружен эффект “поляризационной развязки” импульсов накачки и СФ, заключающийся в том, что поляризация импульса СФ, испускаемого на 0–0-переходе молекул пирена в матрице дифенила, оказывается ортогональной поляризации импульса накачки. Данный эффект может оказаться полезным при регистрации сигналов СФ, поскольку позволяет существенно увеличить отношение “сигнал/шум”.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 02-02-16722а), программой Президиума РАН “Квантовая макрофизика”, программой ОФН РАН “Фундаментальная спектроскопия и стандарты частоты”, грантами МПНТ РФ и МНТЦ (проект № 2121). Авторы благодарны П. В. Зиновьеву и Н. Б. Силаевой за предоставленные экспериментальные данные.

Литература

1. Dicke R.H.: Phys. Rev. **93**, 99 (1954)
2. Benedict M.G., Ermolaev A.M., Malyshev V.A., Sokolov I.V., Trifonov E.D.: Superradiance: multi-atomic coherent emission. Bristol, Philadelphia: IOP Publishing 1996. 326 p.
3. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Laser Physics **12**, 1114 (2002)
4. Vrehen Q.H.F., Schuurmans M.F.H.: Phys. Rev. Lett. **42**, 224 (1979)
5. Carlson N.W., Jackson D.J., Schawlow A.L., et al.: Optics Commun. **32**, 350 (1980)
6. Crubellier A., Liberman S., Pillet P.: Phys. Rev. Lett. **41**, 1237 (1978)
7. Crubellier A., Liberman S., Pillet P., Schweighofer M.G.: J. Phys. B: At. Mol. Phys. **14**, L177 (1981)
8. Reshetov V.A., Yevseyev I.V.: Laser Physics **4**, 109 (1994)
9. Reshetov V.A., Yevseyev I.V.: Laser Physics **11**, 1000 (2001)
10. Набойкин Ю.В., Самарцев В.В., Зиновьев П.В., Силаева Н.Б.: Когерентная спектроскопия молекулярных кристаллов. Киев: Наукова Думка 1986. 204 с.
11. Zinoviev P.V., Kalachev A.A., Kalinkin A.A., Samartsev V.V., Silaeva N.B.: Laser Phys. Lett. **1** (2004) in press.
12. Hochstrasser R.M., Small G.J.: J. Chem. Phys. **48**, 3612 (1968)
13. Aartsma T.J., Wiersma D.A.: Phys. Rev. Lett. **36**, 1360 (1976)
14. Зиновьев П.В., Малюкин Ю.В., Набойкин Ю.В., Руденко Е.Н., Самарцев В.В., Силаева Н.Б.: ФНТ **12**, 204 (1986)
15. Зиновьев П.В., Набойкин П.В., Лопина С.В., Самарцев В.В., Силаева Н.Б., Шейбут Ю.Е.: ЖЭТФ **85**, 1945 (1983)
16. Андрианов С.Н., Зиновьев П.В., Малюкин Ю.В., Руденко Е.Н., Самарцев В.В., Силаева Н.Б., Шейбут Ю.Е.: ФНТ **13**, 957 (1987)
17. Гайсенок В.А., Саржевский А.М.: Анизотропия поглощения и люминесценции многоатомных молекул. Минск: МГУ 1986. 320 с.
18. Bree A., Vilkos V.V.B.: Spectrochim. Acta **27** A, 2333 (1971)

Динамика твердофазной эпитаксиальной кристаллизации и образования жидкой фазы на поверхности имплантированного кремния

Я. В. Фаттахов, М. Ф. Галаяудинов, Т. Н. Львова, М. В. Захаров

Отдел медицинской техники, лаборатория методов медицинской физики
и отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Проведены экспериментальные исследования динамики структурных и фазовых переходов на поверхности имплантированных полупроводников при воздействии мощных импульсов некогерентного света различной длительности и плотности мощности излучения. Впервые были исследованы *in situ* процессы твердофазной эпитаксиальной рекристаллизации кремния, имплантированного различными ионами, подвергнутого импульсным световым обработкам с длительностями импульсов от 130 до 500 мс. Исследования *in situ* динамики рекристаллизации имплантированного кремния были проведены с использованием оригинальной дифракционной методики, основанной на регистрации сигнала дифракции зондирующего излучения на специальных измерительных периодических структурах.

Введение

Исследования взаимодействия 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. Более того, исследование этого эффекта позволило нам разработать оригинальную методику для исследования динамики структурных и фазовых переходов на поверхности имплантированного кремния.

Методы исследования

В качестве исследуемых образцов использовали полированные пластины монокристаллического кремния диаметром 76 и 100 мм, *n*- и *p*-типа проводимости с удельным сопротивлением 1–10 Ом·см, с ориентацией поверхности (100) и (111).

Ионная имплантация специальных измерительных структур проводилась на ускорителе ИЛУ-4 в РНЦ “Курчатовский институт”, г. Москва. Энергия имплантации ионов фосфора варьировалась от 10 до 25 кэВ, доза изменялась от $6.24 \cdot 10^{14}$ до $3.12 \cdot 10^{15}$ см⁻².

Импульсное световое облучение полупроводниковых пластин в режиме локального плавления проводили на модернизированной установке УОЛ.П-1 излучением трех ксеноновых ламп-вспышек, работающих в стробоскопическом режиме. Плотность мощности излучения плавно

регулировалась в диапазоне от 20 до 2000 Вт·см⁻². Общая длительность светового импульса τ_n варьировалась от 20 мс до 20 с путем набора соответствующего количества импульсов-вспышек.

Для исследований на имплантированном кремнии нами была разработана оригинальная методика, основанная на регистрации динамики дифракции зондирующего излучения на специальных периодических структурах, сформированных ионной имплантацией. Предпосылкой формирования таких структур на поверхности полупроводников послужил экспериментальный факт преимущественного образования локальных областей плавления (ЛОП) в областях с повышенной дефектностью. Детали установки более подробно описаны в [1].

Результаты и их обсуждение

Как известно, ионная имплантация в сочетании с импульсным световым отжигом (ИСО) является одной из базовых технологий современной микроэлектроники. Поэтому особый интерес представляло исследование динамики импульсного отжига имплантированного кремния.

Предложенная и разработанная нами методика позволяет с высоким временным разрешением определить все стадии структурных и фазовых переходов.

В таблице 1 суммированы первые результаты исследований в динамике процессов твердофазной эпитаксиальной рекристаллизации и локального плавления. Они показывают, что при длительности светового импульса от 100 до 140 мс момент завершения эпитаксиальной твердофазной рекристаллизации имплантированного полупроводника очень близок к моменту начала плавления. Это говорит о том, что эффективные режимы ИСО для наших структур приближаются к режимам образования ЛОП. Для более коротких импульсов разница во вре-

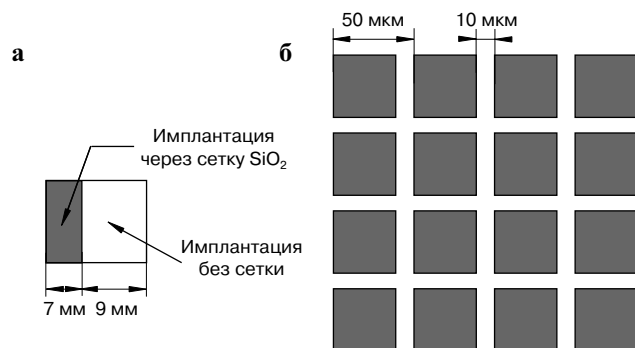
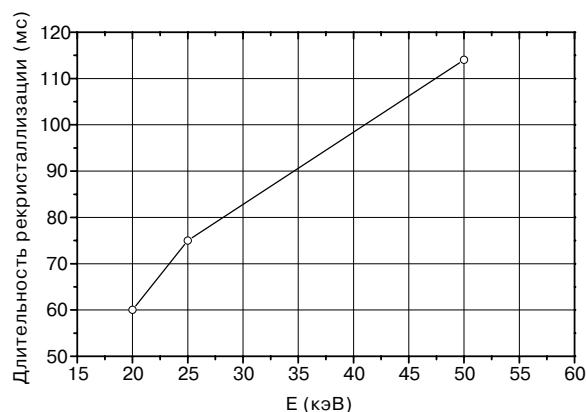
Таблица 1. Результаты исследований динамики рекристаллизации и плавления поверхности имплантированного кремния.

Образец	$\tau_{\text{и}}$ (мс)	Длительность стадии рекристаллизации (мс)	Начало плавления (мс) (± 5)
Si $\leftarrow$ P ⁺ , через металлическую сетку	135	—	112
	125	60 $\pm$ 10	116
Si $\leftarrow$ P ⁺ , через сетку SiO ₂	140	69 $\pm$ 5	114
	130	67 $\pm$ 5	120
	129	70 $\pm$ 5	119
	125	63 $\pm$ 5	105
	113	63 $\pm$ 5	106
	492	108 $\pm$ 10	—
Si $\leftarrow$ Si ⁺ , через металлическую сетку	125	—	100

мени между моментом завершения твердофазной рекристаллизации и моментом начала плавления, по-видимому, будет гораздо меньше.

Используя методы ионной имплантации и фотолитографии, был изготовлен новый тип измерительных структур. Особенность этих структур заключается в том, что методом фотолитографии на часть пластины монокристаллического кремния наносится слой SiO₂. Затем вся кремниевая пластина имплантируется ионами кремния. Внешний вид такой измерительной структуры приведен на рис. 1а. В результате левая часть образца представляет собой ячейки имплантированного кремния размером 40 $\times$ 40 мкм, разделенные “сеткой” монокристаллического кремния. Эта часть образца применялась для исследования особенностей динамики рекристаллизации имплантированных слоев. Правая часть, на которую перед имплантацией фотошаблон не наносился, использовалась для измерения электрофизических параметров данных образцов.

Для получения более полного представления о влиянии режимов имплантации на динамику структурно-фазовых переходов необходимо провести дополнительные серии экспериментов, но по полученным результа-

**Рис. 1.** а Вид сверху образца размером 16 $\times$ 16 мм; б фрагмент области с периодическим легированием (имплантация через сетку SiO₂). Темные участки на рисунке соответствуют имплантированной области на кремнии, светлые – монокристаллическому кремнию.**Рис. 2.** Зависимость длительности стадии рекристаллизации имплантированного слоя полупроводника от энергии ионов фосфора с дозой $\Phi = 3.12 \cdot 10^{15}$ P⁺/см².

там уже можно построить зависимость длительности стадии рекристаллизации от энергии имплантации, а, следовательно, и толщины аморфизованного (имплантированного) слоя. Такой график приведен на рис. 2. Отсюда также можно заключить, что использованная нами методика может быть применена для регистрации особенностей твердофазной рекристаллизации различных имплантированных слоев. Эта работа проводится в настоящее время.

Образцы, подвергнутые ИСО, подготовлены для проведения измерений электрофизических параметров ИЛС – слоевого сопротивления и слоевой концентрации.

Применение разработанной нами методики исследования динамики структурных и фазовых переходов на таких образцах оказывается весьма перспективным и может внести существенный вклад в получение новых физических данных.

Хорошее соответствие измеренной длительности твердофазной рекристаллизации с рассчитанной величиной подтверждает справедливость ранее предложенной зависимости скорости рекристаллизации от температуры отжига [1] и позволяет расширить температурный диапазон ее применимости до температуры плавления.

Настоящие результаты хорошо согласуются с нашими более ранними данными, полученными при скоростной киносъемке динамики дифракционной картины [2].

В заключение отметим, что данная методика позволяет создать технологию импульсного светового отжига имплантированных полупроводников с контролем не по температуре или длительности процесса, а по факту завершения процесса рекристаллизации.

Заключение

1. Изучена динамика процесса твердофазной эпитаксиальной рекристаллизации ионно-имплантированных слоев кремния (до достижения температуры плавления), и

определены важнейшие характеристики фазового перехода расплав-монокристалл, такие как длительность периода существования расплава и стадии жидкофазной рекристаллизации. Исследования проведены методом лазерного зондирования сформированной на поверхности полупроводника периодической решетки и изучения *in situ* ее дифракционной эффективности при воздействии импульсов некогерентного света с различными длительностями.

2. Создана установка для проведения *in situ* исследований процессов твердофазной эпитаксиальной рекристаллизации и плавления на поверхности имплантированных полупроводников. Предложен способ развития дифракционной методики с целью получения дополнительных физических данных.

3. Проведена автоматизация установки по импульсному световому облучению, что позволило повысить воспроизводимость параметров световых импульсов и однородность облучения по поверхности образца.

Литература

1. Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Захаров М.В.: Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Ежегодник 2002, с. 168–170. Казань: ФизтехПресс 2003.
2. Емельянов В.И., Кашкаров П.К., Чеченин Н.Г., Дитрих Т.: ФТТ **30**, № 8, 2259–2263 (1998)
3. Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Хайбуллин И.Б.: Оптика и спектроскопия **89**, № 1, 150–156 (2000)

Моделирование корректирующей системы для устранения зональных и тессеральных гармоник магнитного поля в большом объеме для системы катушек Гарретта

Р. Т. Галеев, А. Р. Фахрутдинов

Отдел медицинской физики, лаборатория методов медицинской физики
и отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Разработана корректирующая система магнитно-резонансного томографа, состоящая из шестнадцати корректирующих катушек. Проведена оптимизация параметров катушек, предложена оригинальная конструкция для некоторых компенсаторов.

Постановка задачи

Одной из ключевых задач при разработке магнитной системы ЯМР томографа является получение максимально однородного поля в заданном объеме. В случае медицинского магнитно-резонансного томографа неоднородность магнитного поля не должна превышать $\sim 10^{-5}$ в сфере диаметром не менее 300 мм. Однако, сколь бы тщательно ни рассчитывалась магнитная система, неизбежные погрешности в процессе ее изготовления и монтажа приводят к тому, что реальное поле магнита томографа отличается от расчетного. Кроме того, на однородность поля влияют также магнитные поля от внешнего ферромагнитного окружения (элементы конструкций здания, коммуникации, массивные предметы в соседних помещениях и т.д.). Таким образом, на практике всегда требуется коррекция поля с помощью корректирующих катушек. В медицинских магнитно-резонансных томографах с резистивными магнитами для создания основного магнитного поля применяются магнитные системы, состоящие из так называемых катушек Гарретта. В общем случае это набор соосных катушек различного диаметра и с разным числом витков в секциях. По своей конструкции система катушек Гарретта наиболее близка к магниту соленоидального типа. Этим обусловлены некоторые особенности конструктивного исполнения корректирующих элементов.

Ниже мы рассмотрим вопросы коррекции поля в соленоидальных магнитных системах. Для описания магнитного поля в пространстве свободном от токов, где магнитное поле удовлетворяет уравнению Лапласа,

$$\nabla^2 B_z = 0,$$

(в ЯМР интроскопии существенной является только z компонента магнитного поля), удобно пользоваться сферической системой координат (r, θ, φ) , в которой решение уравнения Лапласа, как известно, может быть представлено в виде ряда по ортогональным сферическим гармоникам $Y_l^m(\theta, \varphi)$

$$B_z(R, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_l^m R^l Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (1)$$

Коэффициенты разложения A_l^m можно получить, учитывая ортогональные свойства сферических функций

$$A_l^m = \frac{1}{R^l} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} Y_l^{m*}(\theta, \varphi) B_z(R, \theta, \varphi) d\varphi. \quad (2)$$

Гармоники с $m = 0$, не зависящие от азимута φ , называются зональными. Гармоники с $m \neq 0$, зависящие от азимута φ , называются тессеральными.

Использование сферических гармоник для анализа неоднородности магнитного поля оказывается весьма полезным. Во-первых, амплитуды гармоник легко могут быть найдены из измерений карты поля, а во-вторых, существуют достаточно простые системы катушек и магнитных диполей, создающие с хорошим приближением поля отдельных гармоник, что позволяет корректировать неоднородности, описываемые разными гармониками независимо друг от друга.

В декартовой системе координат для первых членов ряда (1) получаем

$$\begin{aligned} B_z = & A_0^0 + 2A_2^0 Z + 3A_2^1 X + 3B_2^1 Y + \frac{3}{2} A_3^0 (2Z^2 - X^2 - Y^2) \\ & + 12A_3^1 ZX + 12B_3^1 ZY + 15A_3^2 (X^2 - Y^2) + 15B_3^2 (2XY) \\ & + \frac{1}{2} A_4^0 Z [8Z^2 - 15(X^2 + Y^2)] \\ & + \frac{15}{2} A_4^1 X (4Z^2 - X^2 - Y^2) \\ & + \frac{15}{2} B_4^1 Y (4Z^2 - X^2 - Y^2) + 90A_4^2 Z (X^2 - Y^2) \\ & + 90B_4^2 Z (2XY) + 105A_4^3 X (X^2 - 3Y^2) \\ & + 105B_4^3 Y (3X^2 - Y^2) + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Корректирующие обмотки изготавливают таким образом, чтобы можно было компенсировать соответствующую гармонику, не влияя на другие. Для коррекции

тессеральных гармоник ($B_z \sim X, Y, XZ, YZ, X^2 - Y^2, XY, \dots$) применяют седловидные обмотки, размещаемые на поверхности цилиндра. Для коррекции зональных гармоник ($B_z \sim Z^m, m = 1, 2, 3, \dots$) используют системы круговых катушек, коаксиальных с катушками основной магнитной системы [1].

Важным конструктивным требованием является ортогональность корректирующих катушек, которая обеспечивает независимость систем регулировки. Ее можно достичь, если градиенты, создаваемые различными компенсаторами, заданы членами ортогонального ряда сферических гармоник.

Расположив витки так, чтобы поля, создаваемые ими, соответствовали либо непосредственно членам разложения в (3), либо их линейным комбинациям, можно получить набор корректирующих катушек, управление которыми будет полностью независимым. В [1] предложена конструкция корректирующих катушек для создания градиентов поля $B_z \sim Z, 2Z^2 - X^2 - Y^2, Z[8Z^2 - 15(X^2 + Y^2)]/2, X, Y, ZX, ZY$.

При юстировке магнитных систем томографов “ТМР-0.02-КФТИ” и “ТМР-0.06-КФТИ”, оснащенных корректирующими системами, создающими градиенты $B_z = Z, X, Y, ZX, ZY, XY, X^2 - Y^2$, нами было отмечено, что заметный вклад в неоднородность вносят гармоники магнитного поля следующего порядка. Поэтому было принято решение разработать корректирующую систему для устранения зональных гармоник вплоть до четвертого порядка и устранения тессеральных гармоник вплоть до третьего порядка. Для этого предстояло усовершенствовать имеющуюся в томографе “ТМР-0.06-КФТИ” корректирующую систему и разработать новые компенсаторы для устранения гармоник более высокого порядка.

Алгоритм оптимизации поля

Каждая корректирующая катушка в идеале должна создавать магнитное поле, соответствующее определенной сферической функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Однако реальная катушка может содержать вклады, описываемые сферическими функциями большего или меньшего порядка. Процедура оптимизации состоит в минимизации всех вкладов, отличных от искомой $Y_l^m(\theta, \varphi)$, путем регулировки параметров катушки, например, положения витков по оси z и числа витков n . Следуя [2], опишем основные этапы процедуры оптимизации на примере корректирующей катушки, создающей градиент магнитного поля вдоль оси z ($\partial B_{0z}/\partial z$) (рис. 1).

Вначале рассчитывается величина поля на поверхности рабочей сферы. В нашем случае это сфера радиуса $R = 15$ см. Затем, согласно выражения (2), находят коэффициенты разложения напряженности магнитного поля по сферическим функциям. Данные коэффициенты являются функциями положений витков z_1, z_2 , числа витков n_1, n_2 и величины тока J . Рассмотрим только оптимизацию z положений витков. Таким обра-

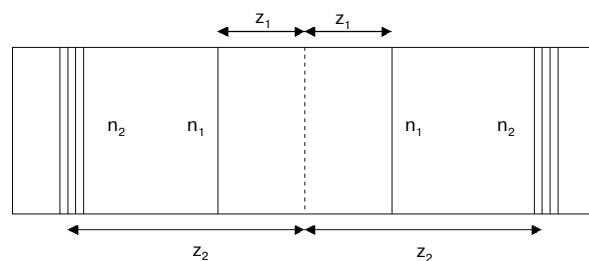


Рис. 1. Схематическое изображение катушки, создающей градиент $\partial B_{0z}/\partial z$. n_1, n_2 – число витков; z_1, z_2 – положение витков.

зом, коэффициенты разложения являются функцией от значений z_1, z_2

$$A_i = f_i(z_1, z_2), i = 1, 2, \dots, n,$$

где i – номер соответствующей гармоники. Вследствие вращательной симметрии корректирующей катушки (см. рис. 1), разложение (1) магнитного поля, создаваемого на сфере, будет содержать только зональные сферические функции, т.е. $Y_i^0, i = 1, 2, \dots, n$.

Компоненты A_i зависят от значений z_1, z_2 нелинейно. Однако, данное уравнение можно линеаризировать, предполагая, что аргументы функции мало изменяются. Тогда имеем

$$\Delta A_i = \frac{\partial f_i}{\partial z_1} \Delta z_1 + \frac{\partial f_i}{\partial z_2} \Delta z_2.$$

В матричной форме данное уравнение можно записать в виде:

$$\begin{bmatrix} \Delta A_1 \\ \Delta A_2 \\ \vdots \\ \Delta A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \frac{\partial f_1}{\partial z_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial z_1} & \frac{\partial f_2}{\partial z_2} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial z_1} & \frac{\partial f_n}{\partial z_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta z_1 \\ \Delta z_2 \end{bmatrix},$$

$$\text{или } \Delta A = \Delta S \Delta z.$$

Вектор коррекции можно найти, разрешив уравнение относительно z

$$\Delta z = \Delta S^{-1} \Delta A,$$

где $\Delta S^{-1} = (\Delta S^{\text{trans}} \Delta S)^{-1} \Delta S^{\text{trans}}$ – матрица псевдообращения, ΔS^{trans} – матрица, транспонированная по отношению к ΔS .

Градиент магнитного поля вдоль оси z описывается сферической функцией $Y_1^0(\theta, \varphi)$. Однако поле, создаваемое катушкой, может содержать нежелательные вклады, описываемые другими сферическими функциями. Для характеристики отклонения результирующего поля от гармоники $Y_1^0(\theta, \varphi)$ удобно ввести величину

$$N = \frac{1}{|A_l|} \sqrt{\sum_{i \neq l}^n |A_i|^2}. \quad (4)$$

Данная величина характеризует, насколько суммарный вклад “паразитных” гармоник меньше вклада от основной гармоники, поэтому, чем меньше данная величина для конкретной корректирующей катушки, тем более “чистый” градиент катушка создает.

Результаты и обсуждение

Рассмотренный в предыдущем разделе алгоритм оптимизации был использован для улучшения компенсирующих свойств корректирующих катушек. Нами была также предложена конструкция новых корректирующих

Таблица 1. Значения параметра N для различных корректирующих систем.

Тип катушки	N		
	[1]	“ТМР-0.06-КФТИ”	Новая система
Z	0.027	0.200	0.020
X, Y	0.076	0.023	0.019
$2Z^2 - X^2 - Y^2$	0.150	—	0.014
XZ, YZ	0.030	0.140	0.009
$XY, X^2 - Y^2$	—	0.050	0.009
$Z[8Z^2 - 15(X^2 + Y^2)]/2$	0.150	—	0.033
$X(4Z^2 - X^2 - Y^2)/2,$ $Y(4Z^2 - X^2 - Y^2)/2$	—	—	0.016
$Z(X^2 - Y^2), Z(2XY)$	—	—	0.020
$X(X^2 - 3Y^2), Y(3X^2 - Y^2)$	—	—	0.012
$8Z^4 - 24Z^2(X^2 + Y^2) +$ $3(X^2 + Y^2)^2$	—	—	0.031

катушек для компенсации гармоник более высокого порядка. Для наглядности в таблице 1 приведены сравнительные характеристики различных корректирующих систем. Параметр, по которому сравниваются корректирующие катушки, является величина N (см. уравнение (4)).

Таким образом, применение алгоритма оптимизации позволило существенно улучшить “чистоту” корректирующих катушек, применяемых ранее. Кроме того, была предложена оригинальная конструкция для компенсации гармоник типа $X(X^2 - 3Y^2), Y(3X^2 - Y^2)$.

Благодарности

Авторы выражают искреннюю благодарность заведующему кафедрой КИПЭВА КГТУ им. Туполева, д.т.н., профессору О. Ш. Даутову и старшему преподавателю кафедры радиоэлектроники КГУ К. С. Сайкину за плодотворное сотрудничество при разработке корректирующей системы магнитно-резонансного томографа. Финансирование работы осуществлялось из средств, выделенных по Государственному контракту с МПНИТ РФ № 40.032.11.54 от 15.09.03 и по Государственному контракту с МЗ РТ № 28 от 31.10.03.

Литература

1. Назаров В.Б., Забродин В.А., Краинский И.С., Гальперин Л.Н.: ПТЭ № 5, 208–210 (1971)
2. Анк К.Б., Чжо Д.М., Чо З.Х.: ПНИ № 4, 138–143 (1986)

Долговременная сенситизация – модель мембранных механизмов нарушений в функционировании нейронной сети

Х. Л. Гайнутдинов, В. В. Андрианов, Т. Х. Гайнутдинова, Р. Р. Тагирова

Отдел медицинской физики, лаборатория биофизики

Показано, что у животных после выработки долговременной сенситизации (ДС) достоверно уменьшаются мембранный и пороговый потенциалы командных нейронов. Эти изменения электрических характеристик сохраняются в течение 14 дней после выработки ДС, что говорит о длительном сохранении повышенной возбудимости этих нейронов. Нервно-патологические заболевания часто связаны с нарушениями в серотонинергической и дофаминергической системах, поэтому дальнейшие исследования были направлены на исследование роли серотонина в формировании ДС и обнаружено, что предварительное введение нейротоксина 5,6-дигидрокситриптамин (5,6-ДОТ) блокирует выработку ДС. Найдено, что 5,6-ДОТ вызывает деполяризационный сдвиг мембранного потенциала и снижение порога генерации потенциала действия командных нейронов, что свидетельствует о том, что у этих клеток имеются серотониновые синаптические входы. Также найдено, что после ДС улиток, которым вводили 5,6-ДОТ, не наблюдалось дальнейшего падения мембранного и порогового потенциалов.

Введение

Многие заболевания нервной системы у человека нередко представляют собой крайние проявления нормальных биологических процессов и подчиняются закономерностям, которые можно успешно изучать физическими и химическими методами [1, 2]. Актуальной задачей является исследование механизмов патогенеза нервно-психических заболеваний на клеточном и молекулярном уровнях [3]. Это позволяет моделировать не само поведение, которое различно у человека и животных, а элементарные механизмы его формирования и реализации [4, 5]. Эффективность такого подхода к выделению базовых механизмов усиливается тем фактом, что молекулярные структуры, обеспечивающие электрическую возбудимость, представляют собой одно из древнейших приобретений эволюции и используются для генерации основных нервных процессов в любых типах нервных клеток как низших, так и высших животных [6]. Реализация такой экспериментальной модели на животных с простой нервной системой создает реальные предпосылки для выяснения клеточных механизмов формирования и развития состояний, возникающих при различных стрессовых ситуациях, возбуждениях и нервно-психических заболеваниях. Было проведено исследование, посвященное разработке модели экспериментальной патологии на животных с простой нервной системой, которая могла бы создать реальные предпосылки для выяснения клеточных механизмов формирования и развития состояний, возникающих при различных нервно-психических расстройствах.

В настоящее время большое внимание привлекает такая нейробиологическая модель как долговременная сенситизация. Она позволяет успешно исследовать мембранные механизмы формирования устойчивых очагов

возбуждения в нервной системе животного при изменении поведения [7–9]. Долговременная сенситизация (ДС), являясь видонеспецифическим феноменом, т.е. присущим животным разного уровня организации, позволяет проводить исследование реакций высших животных на относительно простых объектах и создает реальные предпосылки для выяснения клеточных механизмов формирования и развития состояний, возникающих при различных нервно-психических расстройствах [5]. Показано, что ДС является результатом резкого увеличения выброса серотонина, так что с помощью аппликаций серотонина удастся воспроизвести те же изменения характеристик нейронов, что и при ДС интактного животного. Таким образом, целью данной работы было проведение исследований биофизических механизмов ДС как модели экспериментальной патологии, позволяющей исследовать клеточных (мембранных) механизмов патогенеза нервно-патологических заболеваний и роли серотонинергической системы.

Мембранные механизмы длительного сохранения явления ДС у виноградной улитки

На начальном этапе нашего исследования была поставлена задача изучения мембранных механизмов формирования модели экспериментальной патологии – ДС. В подобных исследованиях широко используются некоторые виды беспозвоночных, в том числе такой моллюск, как виноградная улитка. У виноградной улитки *Helix lucorum* вырабатывалась ДС, для этого животные получали электрический стимул в область головы 4 раза в день в течение 4-х дней с интервалом в 1.5–2 ч. Длительность каждого стимула составляла 0.5 с. Ток имел следующие характеристики: прямоугольные импульсы

тока амплитудой 6–8 мА, длительностью 10 мс, частотой 50 Гц. После выработки ДС проводили анализ электрических характеристик командных нейронов ЛПа3, ППа3, ЛПа2, ППа2 оборонительного поведения. В ходе эксперимента регистрировали потенциал покоя, амплитуду потенциала действия, критический уровень деполяризации и пороговый потенциал. Регистрация потенциалов производилась через АЦП-преобразователи непосредственно в память компьютера. Результаты статистически обрабатывались с применением *t*-критерия Стьюдента. В работе приведены средние значения измеряемых величин и стандартные ошибки среднего ($M \pm SEM$).

Нанесение серии электрических раздражений виноградной улитке приводило к формированию ДС. Выработку ДС определяли по значительному увеличению времени реакции дыхательного отверстия в ответ на предъявление тестирующего стимула относительно исходной. Только полное закрытие пневмостома определялось как положительная реакция на стимул. Момент открытия пневмостома определялся по возврату сопротивления фоторезистора на стационарный уровень, но не менее 90% от начальной величины. Анализ электрических характеристик командных нейронов и мотонейронов висцерального ганглия проводился через один день после выработки ДС. Было найдено, что у сенситизированных улиток вероятность генерации нервных импульсов (потенциалов действия) в командных нейронах значительно выше, чем у контрольных животных. Измерения электрических параметров мембран командных нейронов показывают, что у сенситизированных животных потенциал покоя и пороговый потенциал уменьшаются на 5–8 мВ по сравнению с контрольными животными (рис. 1). Достоверных изменений в форме потенциала действия, включая амплитуду, продолжительность и овершут не отмечено. Измерения характеристик мотонейронов у интактных улиток и в экспериментальной серии с выработкой ДС показали отсутствие заметных изменений при сенситизации. Таким образом, на уровне нейронной сети оборонительного рефлекса были найдены изменения в ключевых, командных нейронах, обеспечивающих запуск оборонительного поведения. С учетом литературных данных [7] можно с большой достоверностью предположить, что на поведенческом уровне изменения электрических характеристик командных и сенсорных нейронов обуславливают усиление оборонительного рефлекса при ДС. Однако есть также данные, что в некоторых мотонейронах также обнаруживаются изменения биофизических характеристик при долговременной сенситизации [9].

На следующем этапе была поставлена задача: проследить временную динамику найденных изменений при ДС в поведенческих реакциях и электрических характеристиках командных нейронов. Длительное тестирование оборонительного поведения животных после формирования ДС показало сохранение увеличенной реакции дыхательного отверстия и глазных щупалец на протяжении одного месяца. К исходу месяца после оконча-

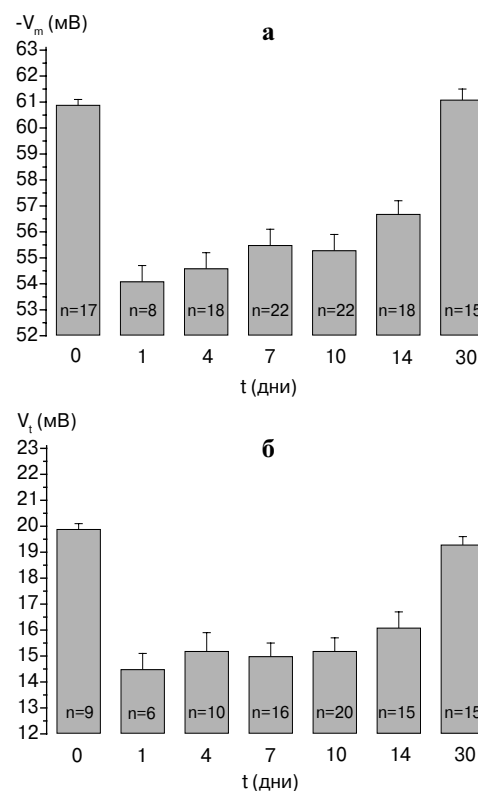


Рис. 1. Динамика сохранения измененных при ДС мембранных параметров командных нейронов: **а** потенциал покоя V_m , **б** порог генерации потенциала действия V_t . Ось абсцисс – этапы эксперимента: 0 – до начала ДС (за день до начала процедуры выработки ДС), 1 (4, ...) – дни, прошедшие после окончания процедуры ДС; *n* – число нейронов, в которых были произведены измерения.

ния процедуры выработки ДС эта реакция пневмостома у сенситизированных и контрольных животных перестает достоверно отличаться. Параллельно с тестированиями оборонительного поведения животных в командных нейронах регистрировали электрические характеристики на 1-й, 4-й, 7-й, 10-й и 14-й дни, и через месяц после ДС. Всего было исследовано 120 нейронов у улиток на разных сроках после формирования ДС. Выработка ДС привела, как и ранее, к достоверному уменьшению средних значений мембранного потенциала (V_m) с -60.9 ± 0.3 до -54.1 ± 0.4 мВ и порогового потенциала (V_t) с 19.9 ± 0.2 до 14.5 ± 0.6 мВ. Дальнейшие измерения электрических характеристик нейронов показывают сохранение этих изменений в течение, по крайней мере, 14 дней после выработки ДС (рис. 1), что означает длительное сохранение повышенной возбудимости нейронов. Таким образом, нами выявлено длительное (не менее 2-х недель) сохранение повышенной возбудимости командных нейронов оборонительного рефлекса после формирования ДС, что выражается в сохранении деполяризационного сдвига мембранного потенциала и прямо доказывается снижением порогового потенциала. Результаты, полученные в ходе проведенных экспериментов, позволяют сделать вывод, что длительное сохранение поведенческих феноменов при ДС является следствием изменений элек-

трических характеристик командных нейронов оборонительного рефлекса. Долговременный характер наблюдаемых изменений электрических характеристик нейронов при ДС свидетельствует, по-видимому, о необходимости вовлечения в этот процесс синтеза новых белков [10]. Это подтверждается работами, в которых наблюдалось нарушение ДС при блокаде биосинтеза белков [11].

Роль серотонинергической системы в ДС

Интенсивное изучение функциональной роли серотонина показало его важную роль в деятельности центральной нервной системы, а также в механизмах обучения и памяти. Существует два подхода для проведения исследований роли серотонина в этих процессах. Первый заключается в аппликации серотонина, чтобы воспроизвести изучаемый феномен пластичности. Такой подход широко используется в модельных экспериментах на моллюсках [7]. Другой подход включает применение блокаторов синтеза серотонина или нейротоксических аналогов серотонина 5,6- или 5,7-дигидрокситриптамина (5,6-ДОТ), которые селективно разрушают серотониновые элементы в нервных окончаниях и ведут к истощению серотонина [12]. Дальнейшим направлением исследований является анализ мембранных и молекулярных (биофизических и биохимических процессов) механизмов.

Мы использовали нейротоксин 5,6-ДОТ в дозе 30 мг/кг веса за 2 инъекции, он был растворен в 0.1 мл физиологического раствора (ФР) для виноградной улитки и вводился за 2 инъекции. Кроме того, в раствор была добавлена 0.1% аскорбиновая кислота в качестве антиоксиданта. Результаты этой серии свидетельствуют о том, что при введении 5,6-ДОТ нарушается формирование ДС, при этом наблюдается деполяризация мембраны командных нейронов: мембранный потенциал снижается с уровня -60.9 мВ ($n = 33$) у улиток, которым был введен ФР, до -57.2 мВ ($n = 31$) у группы улиток после инъекции 5,6-ДОТ (рис. 2). При этом у них снижается величина порогового потенциала с 19.9 мВ ($n = 17$) до 17.3 мВ ($n = 17$). Амплитуда нервного импульса и величина критического уровня деполяризации, необходимого для возникновения нервного импульса, практически не меняется. Обнаруженные значительные изменения электрических характеристик нейронов ЛПа3, ППа3, ЛПа2 и ППа2 при введении 5,6-ДОТ, выражающиеся в деполяризационном смещении мембранного потенциала и снижении порогового потенциала, свидетельствуют о том, что у этих клеток имеются серотониновые синаптические входы, разрушение которых ведет к изменению параметров командных элементов нейронной сети.

Продолжением этой экспериментальной серии был анализ изменений электрических характеристик командных нейронов после попыток сформировать ДС (предъявлений электрических стимулов) у виноградной улитки. Предыдущие эксперименты показали, что введение толь-

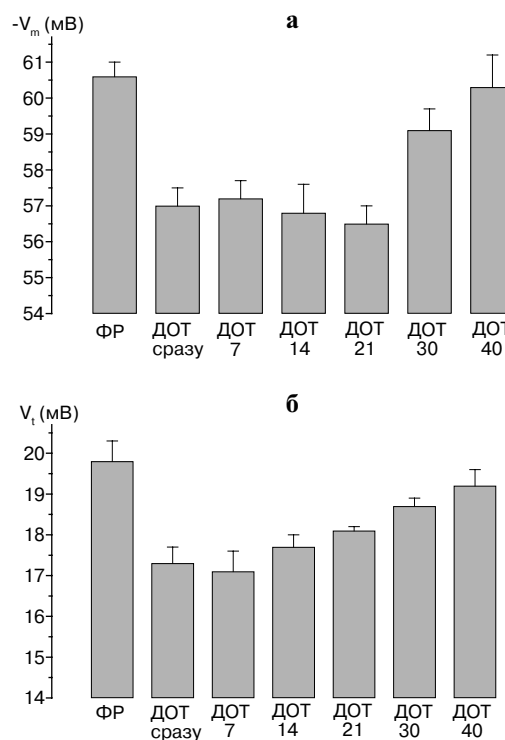


Рис. 2. Длительность сохранения изменений электрических характеристик командных нейронов оборонительного поведения после инъекции 5,6-ДОТ сразу после нее и через 7, 14, 21, 30 и 40 дней. ФР – улитки после инъекции физиологического раствора. **а** Потенциал покоя V_m , **б** порог генерации потенциалов действия V_t .

ко 5,6-ДОТ привело к снижению мембранного и порогового потенциалов. При введении ФР они не изменились. Предъявление электрических стимулов улиткам, которым вводили ФР, приводит к развитию ДС на поведенческом и нейрональном уровнях. Мембранный потенциал командных нейронов у этих улиток уменьшился до -55.5 ± 0.3 мВ, порог снизился до 15.6 ± 0.8 мВ. После ДС улиток, которым вводили 5,6-ДОТ, V_m составил -57.5 мВ, V_t – 16.9 мВ, т.е. не наблюдалось их дальнейшего снижения (рис. 2). Полученные результаты показывают, что формирования ДС при нарушенной работе серотониновой системы не происходит, а инъекция 5,6-ДОТ препятствует дальнейшему снижению мембранного и порогового потенциалов командных нейронов при выработке ДС по сравнению с улитками после введения 5,6-ДОТ.

Полученные в данной работе результаты свидетельствуют о большой значимости таких характеристик [13], как мембранный потенциал покоя и порог генерации потенциалов действия в явлении ДС. Найдено уменьшение исходного потенциала покоя на достаточно значительную величину при неизменном уровне критической деполяризации. Главным результатом этих изменений является повышение возбудимости командных нейронов оборонительного поведения. Было выявлено длительное (не менее 2-х недель) сохранение повышенной возбудимости командных нейронов оборонительного рефлекса после формирования ДС, что выражается в сохранении

деполяризационного сдвига мембранного потенциала и прямо доказываемся снижением порогового потенциала. Результаты, полученные в ходе проведенных экспериментов, позволяют сделать вывод, что длительное сохранение поведенческих феноменов при ДС связано с изменениями электрических характеристик командных нейронов оборонительного рефлекса. Было показано, что в условиях разрушения серотониновых терминалей нейротоксином 5,6-ДОТ формирования ДС не происходит. При введении 5,6-ДОТ были обнаружены значительные изменения электрических характеристик командных нейронов, выражающиеся в деполяризационном смещении мембранного потенциала и снижении порогового потенциала. Впервые показано, что подобные изменения электрических характеристик командных нейронов оборонительного поведения улитки после введения 5,6-ДОТ сохраняются в течение 3 недель и найдено, что процедура выработки ДС на фоне действия нейротоксина не сказывается заметным образом на ходе восстановления характеристик нейронов. То есть формирования ДС при нарушенной работе серотониновой системы не происходит ни на поведенческом уровне, ни на уровне электрических параметров командных нейронов.

Таким образом, выработка ДС может служить экспериментальной моделью для исследования на простой нервной системе клеточных и молекулярных механизмов формирования и развития нервно-патологических заболеваний. Реализация же экспериментальной модели этих заболеваний на животных с простой нервной систе-

мой может создать реальные предпосылки для выяснения клеточных механизмов формирования и развития состояний, возникающих при различных нервно-психических расстройствах (стрессовые состояния, разного рода возбуждения и т.д.).

Литература

1. Кэндел Э.: Клеточные основы поведения. М.: Мир 1980. 598 с.
2. Шульговский В.В.: Физиология высшей нервной деятельности с основами нейробиологии. М.: Асадема 2003. 462 с.
3. Костюк П.Г.: Рос. физиол. журнал **83**, 2–10 (1997)
4. Рабинович М.Я.: Журн. высш. нервн. деят. **36**, 242–251 (1986)
5. Гайнутдинов Х.Л., Штарк М.Б.: Биоэлектрические механизмы индукции антителами генератора патологически усиленного возбуждения при развитии нейроиммунных состояний. Моноклиальные антитела в нейроиммунологии, с. 121–143. Новосибирск: Институт медицинской биофизики 1995.
6. Костюк П.Г.: Журн. эволюционной биохим. физиол. **19**, 333–340 (1983)
7. Clark G.A., Kandel E.R.: Proc. Natl. Acad. Sci. USA **90**, 11411–11415 (1993)
8. Гайнутдинов Х.Л., Андрианов В.В., Гайнутдинова Т.Х., Тарасова Е.А.: Журн. высш. нерв. деят. **48**, 1004–1013 (1998)
9. Cleary L.J., Lee W.L., Byrne J.H.: J. Neurosci. **18**, 5988–5998 (1998)
10. Goelet P., Castellucci V.F., Schacher S., Kandel E.R.: Nature **322**, 419–422 (1986)
11. Bergold P.J., Sweatt J.D., Winicov I., Weiss K.R., Kandel E.R., Schwartz J.H.: Proc. Natl. Acad. Sci. USA **87**, 3788–3791 (1990)
12. Hernadi L., Hiripi L., Vehovszky A., Kemenes G., Rozsa K.: Brain Res. **578**, 221–234 (1992)
13. Perrins R., Weiss K.R.: J. Neurosci. **18**, 3977–3989 (1998)

Определение концентрации оксида азота в тканях крысы методом спектроскопии ЭПР

Х. Л. Гайнутдинов, О. И. Гнездилов, А. И. Исмаилова, Л. Н. Муранова, А. А. Обычный

Отдел медицинской физики, лаборатория биофизики
и отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Отработана методика определения содержания оксида азота в органах крыс по скорости его включения в комплекс с Fe^{2+} и спиновой ловушкой (диэтилдитиокарбомата, ДЭТК) для исследования роли оксида азота в патогенезе инфаркта миокарда. Найден оптимальный срок действия спиновой ловушки у животных до взятия образцов. Проведен анализ содержания оксида азота в тканях разных органов крысы: сердца (правая, левая половины), печени. Типичные спектры ЭПР замороженных образцов органов крыс представляют сигнал ЭПР с $g_{\perp} = 2.036$, $g_{\parallel} = 2.01$ и триплетной сверхтонкой структурой при $g_{\perp}$. Наблюдается существенное различие спектров ЭПР тканей сердца здоровых крыс и крыс после экспериментального инфаркта миокарда. Найдено, что продукция оксида азота в первые часы после экспериментального инфаркта миокарда заметно снижается.

Роль оксида азота в функциях сердечно-сосудистой системы

В последнее время при анализе функций сердечно-сосудистой системы пристальное внимание привлекает оксид азота, свободный радикал со временем жизни в биологических объектах порядка 5 секунд [1]. Оксид азота в сердечно-сосудистой системе контролирует сосудистый тонус, артериальное давление, регулирует сократимость миокарда [2–3]. Широта его биологической активности весьма велика. Он участвует в нейротрансмиссии, регуляции иммунитета и защите организма от бактериального поражения. Не удивительно, что уже в 1992 году редакция журнала Science назвала оксид азота молекулой года, а в 1998 году три американских ученых – Р. Фурчгот, Л. Игнарро и Ф. Мурад – за вклад и выяснение роли оксида азота в функционировании живого организма удостоены Нобелевской премии в области физиологии и медицины [4]. Избыточная продукция оксида азота снижает тонус гладкомышечных клеток и угнетает сократительную функцию миокарда, что наблюдается при остром инфаркте миокарда. Эффекты оксида азота в сердечно-сосудистой системе многогранны, можно говорить о двух диаметрально противоположных влияниях этой молекулы [5]: во-первых, – стимулирующее, положительное, а во-вторых, он способен оказывать токсическое, повреждающее действие, приводить к гибели клеток. Вместе с тем, практически не исследовано его влияние на регуляцию таких функций сердца как автоматия, проводимость, а данные о сократительной функции миокарда единичны и разрозненны. Отсутствуют данные о содержании оксида азота в предсердиях и желудочках, в рабочем и атипическом миокарде сердца в условиях нормы. Исходя из этого, на первое место встает вопрос об использовании точного метода количественного определения оксида азота в тканях сердца в силу очень важной его роли в протекании различных заболеваний, прежде всего, при инфаркте миокарда и ин-

сультах. Точное измерение как стационарной концентрации оксида азота, так и скорости его генерации является сложной задачей вследствие невысоких активностей синтазы оксида азота, малых времен жизни оксида азота и, следовательно, невысоких значений его стационарных концентраций. В настоящее время начаты ЭПР исследования по определению оксида азота, разработана методика, основанная на использовании большого сродства оксида азота к переходным ионам, в которой применен комплекс Fe^{2+} с ДЭТК для захвата оксида азота и формирования устойчивого тройного комплекса $(\text{ДЭТК})_2\text{-Fe}^{2+}$ -оксид азота, который определяется методом ЭПР спектроскопии при 77 К [6]. Целью данной работы является разработка метода диагностики инфаркта миокарда через определение сигналов ЭПР радикалов оксида азота и парамагнитных комплексов железа.

Методы количественного измерения продукции оксида азота в биологических системах

Существует большое количество методов измерения продукции оксида азота в биологических системах. Разнообразие методов измерения окиси азота обусловлено ее уникальными физическими (гидрофобный парамагнитный газ) и химическими (высокая реакционная способность по отношению к радикалам) свойствами. Высокой специфичностью и чувствительностью к оксиду азота обладает спектрофотометрический метод, основанный на реакции оксигемоглобина с оксидом азота, он является одним из самых простых и доступных. Регистрируются изменения оптической плотности в видимой части спектра поглощения гемоглобина. Этот метод неприменим при работе с оптически плотными образцами. Кроме того, гемоглобин самопроизвольно окисляется в растворах, поэтому при измерениях активностей синтазы оксида азота необходим контроль за их ингибиторами.

ЭПР спектроскопия дает уникальную информацию о молекулярной динамике элементарных химических актов и является прямым методом выявления свободных радикалов и в настоящее время начаты исследования по определению оксида азота с применением этого метода. Метод спиновой ловушки основан на реакции радикала со спиновой ловушкой. В результате реакции образуется аддукт с характерным спектром ЭПР. Классические спиновые ловушки, такие как 5,5-диметилпирролин-N-оксид и спиновая ловушка на основе нитрозосоединений не применяются для спиновой ловушки оксида азота из-за низкой реакционной способности по отношению к оксиду азота, а также из-за того, что некоторые спиновые ловушки класса нитрозосоединений в определенных условиях сами распадаются с выделением оксида азота [7]. Наиболее широко применяются комплексы переходных металлов. Как правило, оксид азота обратимо с высокими константами скорости реагирует с комплексами двухвалентного железа, образуя стабильные нитрозильные и динитрозильные комплексы. В качестве ловушек для оксида азота широко применяются комплексы железа с дитиокарбоматами [8], а также дезоксигемоглобин. Большим преимуществом метода является возможность изучения комплексов оксида азота с молекулами из биологических образцов. К его недостаткам относится необходимость регистрации спектров ЭПР при низких температурах [9].

Первым начал подобные измерения коллектив из ИХФ РАН и ИФ РАМН под руководством проф. А. Ф. Ванина [10]. В настоящее время достигнута хорошая линейная связь интенсивности сигнала ЭПР с концентрацией оксида азота при значении отношения сигнала к шуму 2 и поднят порог определения оксида азота до уровня 50 нМ. Недавно определен уровень оксида азота, продуцируемого кардиомиоцитами в культуральной среде, что является примером количественного определения оксида азота в очень малых количествах [11].

Определение концентрации оксида азота в тканях крысы методом ЭПР спектроскопии

Содержание оксида азота в органах крыс определяли методом ЭПР с использованием спиновой ловушки. В качестве спиновой ловушки нами был использован диэтилдитиокарбомат натрия (ДЭТК-Na). ДЭТК-Na при взаимодействии с цитратом железа образует водонерастворимый комплекс ДЭТК-Fe (II), который, в свою очередь, взаимодействует с оксидом азота и образует стабильный радикал $((\text{ДЭТК})_2\text{-Fe}^{2+}\text{-оксид азота})$, который может быть зарегистрирован методом ЭПР спектроскопии. Количество оксида азота оценивается по интенсивности характерного сигнала ЭПР, принадлежащего комплексу. Все опыты проводили на самцах белых крыс весом 180–260 г. По методике, разработанной А. Ф. Ваниным, для образования в организме мононитрозильных комплексов железа (МНКЖ) животным одновременно вводили водный

раствор ДЭТК-Na в дозе 500 мг/кг в 2.5 мл воды внутривенно и раствор цитрата железа (II) (сульфат железа (II) в дозе 37.5 мг/кг + цитрат натрия, 187.5 мг/кг) – подкожно. Через 40 мин. после введения необходимых реагентов крысы декапитировали, немедленно извлекали части сердца, печень, поджелудочную железу и помещали их в кварцевые трубочки. Образцы замораживали в жидком азоте для последующего анализа методом ЭПР спектроскопии. В ряде опытов вещества вводили через 10–15 мин после выработки острого инфаркта миокарда (число образцов $n = 20$). Регистрацию спектров ЭПР приготовленных образцов проводили на спектрометре ЭПР ER-200E-SRC фирмы Bruker X-диапазона при 77 К. В качестве эталона был использован уголь. Во всех экспериментах сохранялись постоянными следующие параметры: мощность СВЧ – 30 мВт, модуляция – 5 Гс, усиление – $4 \cdot 10^4$, постоянная времени – 100 мс, время записи спектра – 50 с и число накоплений – 8.

Для первых пробных измерений использовались насыщенные растворы ДЭТК-Na и цитрата железа (сульфат железа (FeSO₄) + цитрат натрия), вместо эндогенного оксида азота из биологических образцов был использован донор оксида азота – нитропруссид натрия. Все вещества растворяли в бидистиллированной воде. Образовавшийся в результате реакции водонерастворимый комплекс ДЭТК-Fe растворяли в органическом растворителе, затем помещали в кварцевую ампулу для последующей регистрации. Анализ проводился при комнатной температуре. В результате данной реакции методом ЭПР спектроскопии был зарегистрирован спектр оксида азота. Спектр соответствует типичному комплексу радикала оксида азота с ловушкой ДЭТК. На это указывают значение g -фактора сигнала ЭПР и расщепление вследствие взаимодействия с ядром азота. Значение g -фактора и константы сверхтонкого взаимодействия с азотом находятся в соответствии с данными, полученными ранее в работах А. Ф. Ванина и др. [12]. При связывании оксида азота с липофильной ловушкой образуются парамагнитные мононитрозильные комплексы железа с ДЭТК, характеризующиеся сигналом ЭПР с $g_{\perp} = 2.036$, $g_{\parallel} = 2.01$ и сверхтонкой триплетной структурой при $g_{\perp}$. Таким образом, были проведены измерения оксида азота в водном растворе, образующегося при разложении нитропруссидом натрия.

Большинство измерений оксида азота проводилось на тканях сердца, печени и поджелудочной железы, т.к. именно в этих органах спектры были наиболее интенсивными. Типичный спектр ЭПР замороженных образцов печени и сердца крыс после введения им ДЭТК + Fe²⁺-цитрат приведен на рис. 1 и 2. Кроме сигнала ЭПР МНКЖ-ДЭТК с $g_{\perp} = 2.036$, $g_{\parallel} = 2.01$ и триплетной сверхтонкой структурой при $g_{\perp}$ в спектрах ЭПР мы наблюдали сигналы от свободных радикалов при $g \approx 2.0$ и восстановленных железосерных белков при $g \approx 1.94$.

Экспериментальный инфаркт миокарда воспроизводили по методу Сейли [13]. Через 10–15 мин после инфаркта миокарда животным вводили ловушку ($n = 20$).

В качестве контроля использовали intactных животных ($n = 23$). Измерения проводились на тканях сердца (правая половина, инфарктная зона, межжелудочковая перегородка) и печени. Наблюдается существенное различие спектров ЭПР печени здоровых крыс и крыс после инфаркта миокарда. Отличительной их особенностью является резкое изменение соотношения групп сигналов в полях 3300 и 3400 Э. В спектрах ЭПР печени intactных животных интенсивность линий в поле 3300 Э превышает интенсивность в поле 3400 Э более чем на порядок, в то время как для животных после инфаркта миокарда интенсивности этих сигналов примерно одинаковые. Как видно из рис. 2, общая интенсивность линий, соответствующих комплексам $(\text{ДЭТК})_2\text{-Fe}^{2+}$ -оксид азота, для животных после инфаркта миокарда в несколько десятков раз меньше по сравнению с интенсивностью линий этого комплекса для intactных животных. Следует отметить, что наблюдается существенное различие между радикалами и в самих группах (в поле 3300 Э и в поле 3400 Э). Кроме того, в спектре печени крысы после инфаркта миокарда появился новый сигнал в поле 3420 Э, природа которого устанавливается. Наблюдается также резкое уменьшение интенсивности спектров ЭПР правой половины сердца крысы (рис. 2) – почти полное исчезновение сигнала от $(\text{ДЭТК})_2\text{-Fe}^{2+}$ -оксид азота) и появление сигнала ЭПР в области 3350 Э, а также его уменьшение в районе расположения церуплазмينا. Такой вид спектра дает основание предположить, что у животных после инфаркта миокарда количество радикалов оксида азота в тканях сердца уменьшается.

Таким образом, произведена детекция радикалов оксида азота по спектрам ЭПР моонитрозильных комплексов железа с диэтилдитиокарбоматом натрия. Были проведены измерения оксида азота в водном растворе по его продукции нитропруссидом натрия. Найден оптимальный срок действия спиновой ловушки (диэтилдитиокарбомата и железа (II)) у животных до взятия образцов. Проведен анализ содержания оксида азота в разных тканях крыс, перенесших инфаркт миокарда. При сравнительном анализе спектров ЭПР МНКЖ-ДЭТК конт-

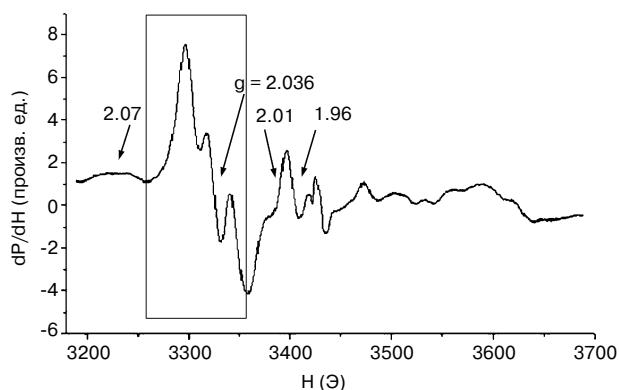


Рис. 1. Спектр ЭПР МНКЖ-ДЭТК печени крысы (intactные животные). Прямоугольником выделен сигнал NO.

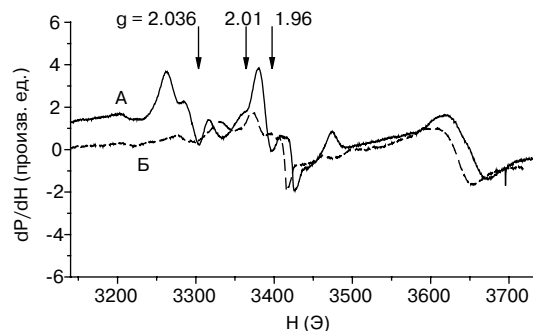


Рис. 2. Спектры ЭПР МНКЖ-ДЭТК правой стороны сердца крысы. А – контрольная; Б – после инфаркта миокарда.

рольных и перенесших инфаркт миокарда животных было обнаружено, что у крыс, перенесших инфаркт миокарда, спектры ЭПР МНКЖ-ДЭТК имеют меньшую интенсивность, чем у контрольных животных. Это означает, что продукция оксида азота в первые часы после инфаркта миокарда заметно снижается. Количественное определение содержания оксида азота в тканях сердца и других органов на разных стадиях протекания экспериментального инфаркта миокарда у крыс позволит разработать метод диагностики острого инфаркта миокарда.

Работа выполнена совместно с сотрудниками Казанского государственного медицинского университета А. Л. Зефировым, А. И. Насыровой, Р. Р. Нигматуллиной, Ф. Ф. Рахматуллиной.

Литература

- Schuman E.M., Madison D.V.: Annual Rev. Neurosci. **17**, 153–183 (1994)
- Guo J.-P., Panday M.M., Consigny P.M., Lefer A.M.: Amer. J. Physiology **269**, H122–H131 (1995)
- Ingles A.C., Ruiz F.J., Salom M.G., Quesada T., Carbonell L.F.: Can. J. Physiol. Pharmacol. **73**, 693–698 (1995)
- Граник В.Г., Григорьев Н.Б.: Вестник РФФИ № 4, 48–74 (2002)
- Манухина Е.Б., Малышев И.Ю.: Рос. физиол. журн. **86**, 1283–1292 (2000)
- Khramtsov V.V., Volodarsky L.B.: Biol. Magn. Reson. **14**, 109–180 (1998)
- Singel D.J., Lancaster J.R.: Electron paramagnetic resonance spectroscopy and nitric oxide biology. Methods in nitric oxide research (Feelish M., Stamler J.S., eds.), pp. 341–356. Chichester: John Wiley & Sons 1996.
- Vanin A.F., Mordvintsev P.I., Hauschildt S., Mulsch A.: Biochim. Biophys. Acta **1177**, 37–42 (1993)
- Утепбергенов Д.И.: Исследования производных 1,2-дiazетина и нитронилнитроксида в качестве доноров и акцепторов окиси азота in vitro и in vivo. Дис. на соиск. учен. степ. канд. биол. наук ИХКГ СО РАН. Новосибирск 1999.
- Ванин А.Ф., Маленкова И.В., Мордвинцев П.И., Мюльш А.Ф.: Биохимия **58**, 1094–1103 (1993)
- Zhang D., Xiong J., Hu J., Li Y., Zhao B.: Appl. Magn. Reson. **20**, 345–356 (2002)
- Vanin A.F., Malenkova I.V., Serezhnikov V.A.: Biol. Chem. **19**, 191–196 (1997)
- Selye H., Bajusz E., Grasso S., Mendell P.: Angiology **11**, no. 3, 398–412 (1960)

Ca²⁺-чувствительные ионселективные мембраны на основе некоторых подандов

В. В. Андрианов, Х. Л. Гайнутдинов, Ю. Г. Галяметдинов, В. А. Доронин

Отдел медицинской физики, лаборатория биофизики
и лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Для определения концентрации щелочных и щелочноземельных ионов в водных растворах использованы электроды с пластифицированными мембранами. Мембрана представляет собой пленку из пластифицированного полимера (матрицы) с внедренным в нее ионофором. Полимерная матрица была изготовлена из поливинилхлорида и пластификаторов. Липофильной ионной добавкой служил тетрафенилборат натрия (ТФБ-Na), а в качестве пластификатора – о-нитро-фенил-октиловый эфир (о-НФОЭ), диоктилфталат (ДОФ) и дибутилфталат (ДБФ). Получены Ca²⁺-селективные мембраны с коэффициентом чувствительности порядка 10⁻⁴–10⁻⁵ моль/л. Определена селективность полученных ионселективных электродов к ионам кальция $K_{Ca/Mg} = 0.02$, $K_{Ca/K} = 0.02$, $K_{Ca/Na} = 4 \cdot 10^{-3}$.

Введение

В процессе развития диагностических систем новых поколений возникли технологии, которые включают в себя аналитические элементы, базирующиеся на ряде микропреобразователей, называемых обычно химическими и биомедицинскими сенсорами. Датчики на основе химических и биомедицинских сенсоров позволяют успешно решать проблемы регулирования технологических процессов, мониторинга окружающей среды, определения состава различных жидких и газообразных сред, проблема их разработки выдвигается в качестве первоочередной задачи рядом отраслей народного хозяйства. Химические сенсоры обеспечивают детекцию электроактивных соединений и дают прямую информацию о химическом составе среды, в которую погружены, без отбора анализируемой пробы и её специальной подготовки. Сенсорные анализаторы могут работать автономно, без вмешательства оператора, причём они могут быть связаны с системами накопления и автоматизированной обработки информации. Трудно переоценить значение химических сенсоров и созданных на их основе анализаторов для контроля состояния производственно-технологических сред, среды обитания и охраны здоровья человека. Перспективным направлением развития химических сенсоров является создание и применение ионселективных электродов (ИСЭ). Их применение сдерживается сложностью получения основных компонентов мембран, прежде всего ионофоров, достаточно чистыми и в значительных количествах, необходимостью защиты чувствительного элемента от вредных воздействий среды, высокой стоимостью некоторых биологических компонентов сенсоров и т.д.

Мембраны ИСЭ в качестве электроактивного компонента содержат макроциклические комплексоны, к которым относятся и макроциклические полиэфиры, краун-эфиры, каликсарены. Эти соединения отличаются способностью (вследствие ион-дипольного взаимодействия) образовывать комплексы с ионами щелочных и щелоч-

ноземельных металлов в растворах и переносить связанный катион через разнообразные биологические и искусственные мембраны. Эти переносчики моделируют один из механизмов дискриминирования катионов биологическими мембранами, поэтому исследование свойств электродных мембран на основе разнообразных макроциклических комплексонов открывает возможность получения электродов с высокой специфичностью, характерной для живых клеток. Одной из наиболее привлекательных черт макроциклических комплексонов является возможность легкого химического видоизменения структуры, которая дает возможность изменения избирательности к ионам простой заменой одной лигандной функциональной группы на другую. Такие соединения представляют несомненный интерес в качестве ионофоров при изготовлении мембран для ИСЭ.

Ранее можно было определить только общее количество кальция с помощью атомной абсорбционной спектроскопии. При некоторых физиологических условиях количество ионизированного кальция в биологических жидкостях, таких как сыворотка крови, может меняться в широких пределах, в то время как общее количество кальция остается сравнительно постоянным. Природа компонентов, используемых для получения диагностического сигнала, является главным для определения рабочих характеристик любого химического сенсора, а именно – избирательность, срок годности и время отклика. Поэтому актуальной научно-исследовательской и технологической задачей является попытка найти новые сравнительно дешёвые компоненты мембран, чувствительных к изменению концентраций щелочных и щелочноземельных ионов, содержащихся в биологических средах, прежде всего, для целей медицинской диагностики, получение и изучение электрохимических характеристик мембран, и создание на их основе ИСЭ. Отсюда цель нашей работы – разработка технологии изготовления и апробация ионселективных мембран, чувствительных к ионам кальция и применяемых для изготовления ИСЭ.

Методы приготовления ионселективных мембран и ИСЭ

На основе ИСЭ можно создать прибор – ионселективный экспресс-анализатор щелочных и щелочноземельных ионов в водных растворах, который измеряет электродвижущую силу (ЭДС), образуемую селективной мембраной и пропорциональную концентрации определяемого вещества. При измерении ЭДС растворов используется система, состоящая из измерительного и вспомогательного электродов. В качестве измерительного электрода используется ИСЭ на пластифицированной мембране, а в качестве вспомогательного – хлорсеребряный электрод.

Для создания мембранных электродов используют широкий спектр электродноактивных веществ (ионофоров), как моно- и поликристаллы, жидкие и твердые иониты, природные и синтетические циклические и ациклические органические соединения, селективно связывающие те или иные ионы. Сейчас актуально создание и исследование такой разновидности пластифицированной мембраны, содержащей жидкий ионит или нейтральный хелат. Активными компонентами жидкой мембраны могут быть ионообменники, хелаты и нейтральные переносчики [1–3].

Перспективным направлением развития химических сенсоров является изучение ИСЭ, мембраны которых содержат или нейтральный переносчик, или ионообменник в качестве электродноактивного компонента. Изучение кристаллической структуры комплекса кальция, в случае ионообменника, показало, что каждый из ионов кальция находится в близком контакте только с одним из двух фосфатных атомов кислорода, и что хелатиобразование не имеет места. Каждый ион кальция в комплексе связан с одним кислородом каждой из двух фосфатных групп и с двумя молекулами воды, создающими октаэдрическое окружение вокруг каждого иона кальция. Такая структура объясняет образование комплекса, менее устойчивого по сравнению с комплексом, в котором фосфаты образуют хелатный цикл, и поэтому обмен иона кальция облегчен. Очень устойчивые комплексы не дают отклика в потенциометрических сенсорных мембранах.

В случае нейтральных переносчиков предполагается, что взаимодействие иона кальция с карбонильными атомами кислорода приводит к формированию структуры с внутренней полостью, в которой ион кальция окружен гидрофобными длинноцепочечными радикалами. Этот комплекс положительно заряжен, поэтому, чтобы он существовал в объемной фазе мембраны, для сохранения электронейтральности необходимо присутствие липофильного противоиона. В противном случае, в мембранную фазу будут экстрагироваться гидрофобные анионы из анализируемого раствора, приводя к анионному мешающему влиянию. Обычно этого можно избежать, включая в состав мембраны липофильный анион, такой как тетрахлорфенилборат-ион [4].

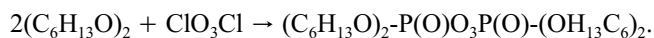
Хелаты – циклические соединения ионов металлов с полидентатными органическими лигандами. В этом случае определяемый ион связан с ионофорами мембраны не только электростатически, но и координационными связями, что может существенно повысить селективность определения.

Селективность и чувствительность мембран зависят от процентного содержания ионофора, а также от содержания липофильного аниона в мембране [5]. Оптимальное содержание в мембране ионофора находится в пределах от 1 до 3%, а липофильного аниона – от 0.1 до 1%. Оптимальная толщина, обеспечивающая высокую чувствительность, селективность, а также механическую прочность, лежит в пределах от 0.1 до 0.5 мм [3].

Для определения концентрации щелочных и щелочноземельных ионов в водных растворах использовались электроды с пластифицированными мембранами. Мембрана представляет собой пленку из пластифицированного полимера (матрицы) с внедренным в нее ионофором. Полимерная матрица была изготовлена из поливинилхлорида (ПВХ) и пластификаторов. Для приготовления пластифицированных мембран, чувствительных к щелочноземельным ионам (прежде всего кальция и магния) в качестве ионофоров использованы поданды. Липофильной ионной добавкой служил тетрафенилборат натрия (ТФБ-Na), а в качестве пластификатора – о-нитро-фенил-октиловый эфир (о-НФОЭ), диоктилфталат (ДОФ) и дибутилфталат (ДБФ). Мембраны были приготовлены по следующему способу. В бюксе объемом 20 мл растворялись в тетрагидрофуране (ТГФ) ПВХ порошок (30–33%), ионофор (1–3%), ТФБ-Na (0.1–1%) и пластификатор (65–70%). Взвешивание компонентов проводилось на аналитических весах ВЛР-20 с точностью до 0.000005 грамма. Раствор наливали тонким слоем в чашку Петри диаметром 10 см и оставляли на 24 часа до полного испарения ТГФ и таким образом формировалась эластичная прозрачная мембрана толщиной 0.3–0.5 мм.

Синтез фосфорилсодержащего поданда

Взаимодействием дициклогексилфосфористой кислоты с 1,1'-дихлорэфиром по реакции Михаэлиса-Беккера получен фосфорилсодержащий поданд, который использовался как ионофор, предположительно чувствительный к ионам кальция.

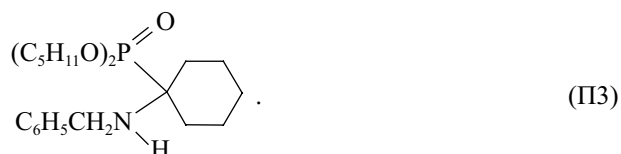
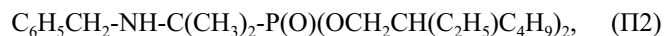
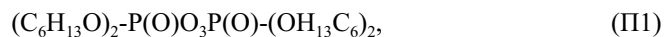


Синтез 1,1'-бис(дициклогексилфосфорил)-метилового эфира диэтиленгликоля проведен по следующей методике. В колбе объемом 100 мл, снабженной обратным холодильником, помещалось 1.5 г 1,1'-дихлорметилового эфира диэтиленгликоля и 0.7 г натрия. При нагревании к смеси добавлялось 3.9 г дициклогексилфосфина в течение 3 часов. После 4 часов кипячения

выпавший осадок NaCl был отфильтрован, продукт очищен вакуумной перегонкой. Получилось 2.9 г продукта (выход 63%).

В качестве ионофоров применяли 1,1'-бис(дициклогексилфосфорил)-метилового эфира диэтиленгликоля (П1); 0,0-ди-(2-этилгексил)-1-метил-1-(N-бензил)-аминоэтилфосфонат (П2); 0,0-дипентил-1-(N-бензил)-аминоцикло-гексилфосфонат (П3). На основе поданда (П1) были приготовлены мембраны 1.1–1.7; на основе (П2) – 2.1–2.3 и на основе (П3) – 3.1–3.4.

Структурные формулы ионофоров приведены ниже:



Чувствительность электродов характеризуется величиной, называемой пределом обнаружения ионов (минимальная концентрация определяемого иона, при которой сохраняется зависимость электродвижущей силы от концентрации). Зависимость между концентрацией определяемого в растворе иона и электродвижущей силой электрохимической ячейки описывается уравнением Нернста. Селективность электрода означает возможность определения ионов в присутствии других ионов, к кото-

рым электрод менее чувствителен. Коэффициент селективности $K_{A/B}$ может быть рассчитан на основании измерения ЭДС элемента с мембраной в растворах, содержащих либо один электролит (чистые растворы, один из которых содержит ионы A^+ , а другой – ионы B^+), либо смесь электролитов (смешанные растворы). Крутизна электродной функции показывает чувствительность мембраны к данному иону. Чем ближе крутизна электродной функции к нернстовскому наклону, тем чувствительнее мембрана. Линейность электродной функции свидетельствует о рабочем диапазоне, в котором мембрана имеет зависимость от изменения концентрации определяемого иона [6].

Найдено, что мембрана на основе ионофора (П1) имеет линейность электродной функции в пределах $10\text{--}10^{-4}$ моль/л, мембрана на основе ионофора (П2) в интервале $10\text{--}10^{-3}$ моль/л, мембрана на основе ионофора (П3) $10\text{--}10^{-4}$ моль/л ИСЭ, в которых используются с пластифицированными мембранами на основе подандов могут применяться для аналитического определения ионов Ca^{2+} и Mg^{2+} , а также производственного контроля общей жесткости воды.

Электрохимические свойства ионселективных мембран на основе подандов

Калибровочные кривые мембран на основе подандов представлены на рис. 1. Результаты электродных характеристик ПВХ мембран сведены в таблице 1.

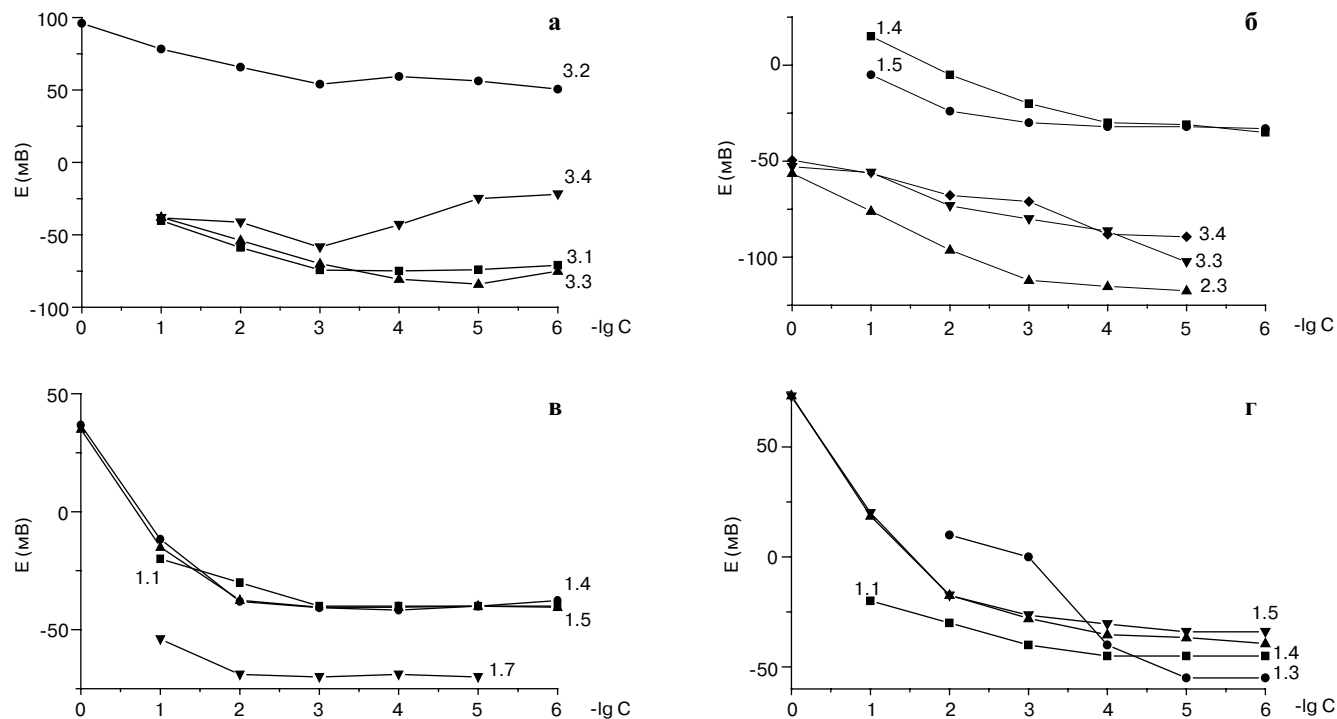


Рис. 1. Градуировочные графики ПВХ-мембран в чистых растворах CaCl_2 (а), MgCl_2 (б), NaCl (в) и KCl (г). C – концентрация иона. Числа у кривых соответствуют номерам мембран.

Таблица 1. Электродные характеристики мембран на основе подандов.

Номер мембраны	Наклон (мВ/декада)	Характеристика электрода				Интервал линейности (моль/л)	Коэффициент селективности		
		Предел обнаружения (10 ⁻⁴ моль/л)					<i>K</i> _{Ca/Mg}	<i>K</i> _{Ca/K}	<i>K</i> _{Ca/Na}
		<i>C</i> _{Ca}	<i>C</i> _{Mg}	<i>C</i> _K	<i>C</i> _{Na}				
1.5	30	1	50	50	250	10–10 ⁻⁴	0.020±0.004	0.02±0.004	0.004±0.008
2.3	20	2	13	—	—	10 ⁻¹ –10 ⁻⁴	0.158±0.008	—	—
3.3	20	1.6	6.3	—	—	10 ⁻¹ –10 ⁻⁴	0.250±0.012	—	—

Таким образом, проведены экспериментальные измерения концентрации ионов Ca, Mg, Na и K в калибровочных водных растворах ионселективными электродами, для изготовления которых использованы ионселективные мембраны на основе подандов. Лучший образец (мембрана 1.5) дал следующие характеристики: предел обнаружения ионов Ca^{2+} $10-10^{-4}$ моль/л, $K_{Ca/Mg} = 0.02$; $K_{Ca/K} = 0.02$; $K_{Ca/Na} = 4 \cdot 10^{-3}$. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования подандов в качестве ионофоров для Ca-селективных электродов.

Литература

1. Bakker E., Pretsch E., Buhlmann P.: Anal. Chem. **72**, 1127–1133 (2000)
2. Bakker E.: Anal. Chem. **69**, 1061–1069 (1997)
3. Buhlmann P., Pretsch E., Bakker E.: Chem. Rev. **98**, 1593–1687 (1998)
4. Bochenska M.: J. Mol. Str. no. 107, 450–467 (1998)
5. Каттралл Р.В.: Химические сенсоры. М.: Научный мир 2000. 144с.
6. Власов Ю.Г., Колодников В.В., Ермоленко Ю.Е., Михайлова С.С.: Журн. аналит. хим. **51**, 805–816 (1996)

Высокопроизводительный кластер на базе процессоров Athlon XP

С. К. Черников, А. Н. Ашихмин

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Приведено описание принципиальной схемы и компоновки вычислительного кластера АРКО-9А2200. Описана технология и приведены результаты исследования характеристик производительности кластера.

В настоящее время существуют две основные архитектуры параллельных компьютеров: симметричные мультипроцессорные системы с общей памятью (SMP) и мультипроцессорные системы с распределенной памятью (MPP).

SMP-компьютеры – это наиболее распространенные сейчас параллельные вычислители, а двух- и четырех-процессорные персональные компьютеры на основе Pentium III и Xenon, Athlon MP стали уже массовым товаром. Однако общее число процессоров в SMP-системах, как правило, не превышает 16, а их дальнейшее увеличение не дает выигрыша из-за конфликтов при обращении к памяти. Основное преимущество SMP – относительная простота программирования. Значительная часть вычислительных алгоритмов, разработанных для последовательных компьютеров, может быть адаптирована для работы на SMP-компьютере с помощью распараллеливающих и векторизирующих трансляторов.

Альтернатива SMP – архитектура MPP. Каждый процессор имеет доступ лишь к своей локальной памяти, а если программе нужно узнать значение переменной, расположенной в памяти другого процессора, то задействуется механизм передачи сообщений. Процессор, в памяти которого находятся нужные данные, посылает сообщение тому процессору, которому они требуются, а последний – принимает его. Этот подход позволяет создавать компьютеры, включающие в себя тысячи процессоров. На нем основаны все машины, имеющие производительность в сотни миллиардов операций в секунду. Но эта архитектура имеет ряд существенных недостатков. Во-первых, требуется быстродействующее коммуникационное оборудование, обеспечивающее среду передачи сообщений. Во-вторых, при создании программ необходимо учитывать топологию системы и специальным образом распределять данные между процессорами, чтобы минимизировать число пересылок и объем пересылаемых данных. Последнее обстоятельство и мешает широкому внедрению подобных архитектур. Поставщики традиционных коммерческих суперкомпьютеров достаточно быстро улучшают производительность, надежность и простоту использования своих продуктов.

Однако у этих компьютеров есть один большой недостаток – цена, подчас недоступная для многих образовательных и научно-исследовательских организаций, у которых имеется потребность в мощных вычислительных ресурсах.

Эффективным резервом снижения стоимости MPP-компьютеров является отказ от нестандартного коммуникационного оборудования в пользу обычного сетевого. Прогресс в области сетевых технологий (начиная с 1992 года, по скорости роста производительности сетевое оборудование обгоняет процессоры) способствует использованию компьютерных сетей в качестве параллельных вычислителей. Компьютерные сети не могут соревноваться по скорости вычисления с суперкомпьютерами-рекордсменами, но они на один-два порядка дешевле, их можно использовать там, где объемы расчетов велики, а суперкомпьютеры экономически не оправданы.

Производительность персональных компьютеров на базе процессоров AMD в последние годы значительно выросла. Такие компьютеры стали создавать серьезную конкуренцию рабочим станциям на базе RISC, особенно по показателю цена/производительность. В силу сказанного, идея создания параллельных вычислительных систем (кластеров) из общедоступных компьютеров на базе AMD и недорогих Ethernet-сетей с установкой на эти компьютеры одной из бесплатно распространяемых коммуникационных библиотек (например, MPICH), представляется очень заманчивой. Мировой опыт эксплуатации кластеров показал, что при достаточном числе узлов для многих классов задач такие системы дают производительность, сравнимую с суперкомпьютерной [1].

Описание функционального макета кластера АРКО-9А2200

Кластер АРКО-9А2200 представляет собой девятипроцессорный вычислительный комплекс, построенный на базе процессоров AMD Athlon.

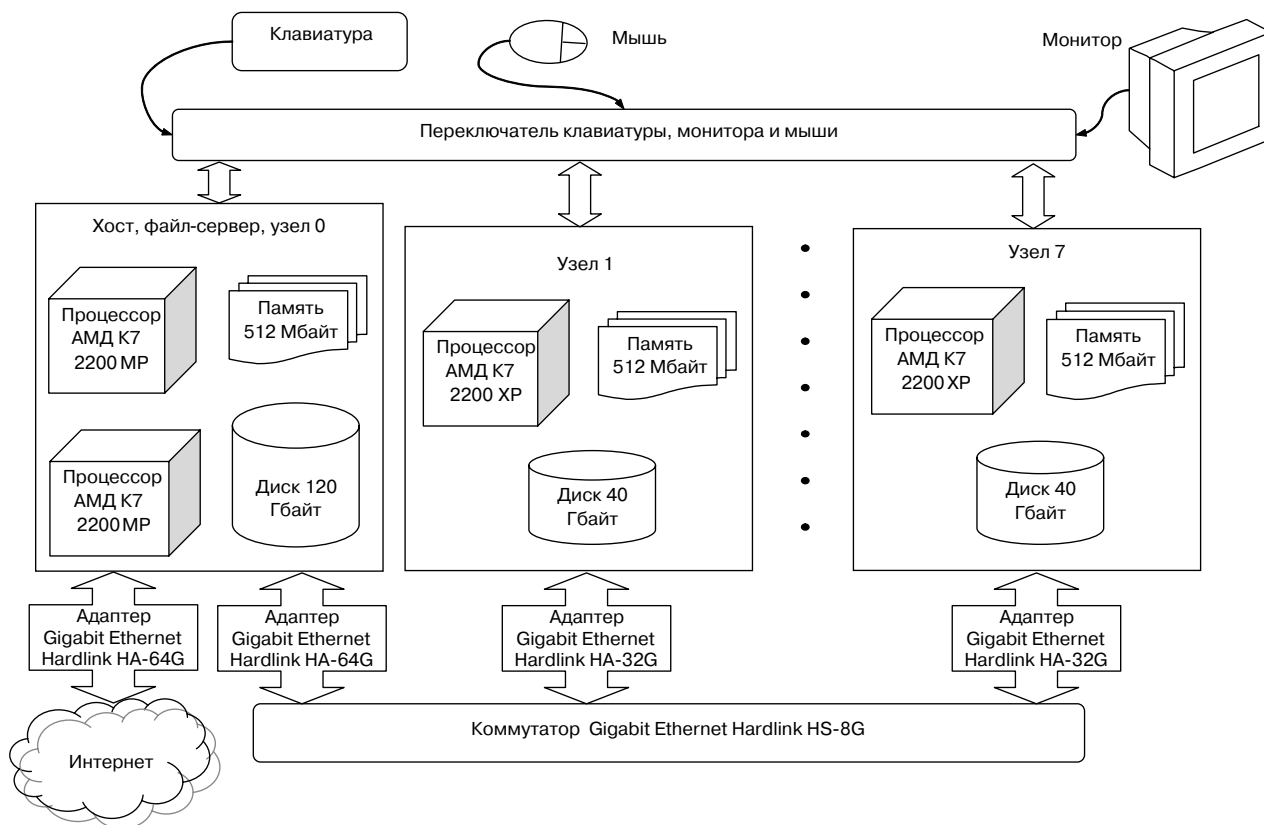


Рис. 1. Функциональная схема кластера APKO-9A2200.

Комплекс включает в себя:

- двухпроцессорный системный блок на базе системной платы Tyan Tiger с двумя процессорами Athlon MP 2200+ и сетевым адаптером Gigabit Ethernet Hardlink HA-64G, установленным на шине PCI64 (узел 0);
- семь однопроцессорных системных блоков на базе системной платы Microstar MS-6570 (chipset nForce 2) с процессором Athlon XP 2200+ и сетевым адаптером Gigabit Ethernet Hardlink HA-32G, установленным на шине PCI32 (узлы 1–7);
- восьмипортовый коммутатор Gigabit Ethernet Hardlink HS-8G;
- шестнадцатипортовый переключатель консоли Edimax EK-16RO с возможностью управления с консоли;
- источник бесперебойного питания APC Smart-UPS 3000;
- пульт управления (монитор, клавиатура, манипулятор “мышь”).

Все элементы кластера смонтированы в открытой стойке. На всех однопроцессорных узлах установлена операционная система Windows 2000 Workstation SP3, на двухпроцессорном узле установлена операционная система Windows 2000 Advanced server SP3. В качестве коммуникационной среды используется библиотека MPICH 1.2.5, свободно распространяемая Техническим университетом г. Аахена, Германия.

Схема кластера приведена на рис. 1. Внешний вид функционального макета кластера показан на рис. 2.



Рис. 2. Внешний вид функционального макета кластера APKO-9A2200.

Тестирование кластера

Для определения вычислительных возможностей кластера и оптимизации его структуры был проведен ряд тестов, в ходе которых оценивались следующие величины:

- производительность отдельного вычислительного узла (число элементарных арифметических операций с плавающей точкой в секунду – гигафлоп);
- производительность сетевого оборудования при различных способах коммутации узлов (скорость передачи информации в Мб/с);
- интегральная производительность кластера (гигафлоп) при одновременном использовании нескольких узлов.

При тестировании кластера использовались программы из распространенных тестовых пакетов: тестовый набор, разработанный в Московском государственном университете (пакет МГУ) и тесты пакета PLAPACK. При оценке производительности сети использовалась утилита Netpipe. Производительность (как интегральная, так и отдельного вычислительного узла) определялась при решении системы линейных алгебраических уравнений заданной размерности, для которой можно заранее определить число потребных элементарных арифметических операций с плавающей запятой. Производительность определялась путем деления потребного числа операций на время решения системы. На данном этапе тестирования использовался модуль Linpack пакета PLAPACK. Производительность сетевого оборудования определялась при передаче пакета данных заданной величины при коммутации узлов типа УЗЕЛ-УЗЕЛ (однаправленная передача данных), а так же ЗВЕЗДА и КОЛЬЦО (двухнаправленная передача данных). При коммутации узлов типа УЗЕЛ-УЗЕЛ использовались утилита Netpipe, модули Transfer и Nettetst тестового набора МГУ. При остальных типах коммутации узлов использовался модуль Nettetst.

Кроме перечисленных исследований, проводилось исследование производительности кластера в зависимости от числа используемых вычислительных узлов при определении перемещений конструкции методом конечных элементов.

Тестирование узлов кластера

Производительность отдельного узла кластера определялась при помощи модуля Linpack в зависимости от размерности решаемой задачи, точности вычислений и степени оптимизации вычислений под тип центрального процессора. Под точностью вычислений в данном случае понималось использование четырехбайтного или восьмибайтного представления числа с плавающей точкой. Оптимизация вычислений для данного типа процес-

сора представляла собой использование библиотеки подпрограмм базовых операций линейной алгебры (BLAS) с дополнительным набором команд процессора (SSE), предназначенным для векторных арифметических операций. Рассматриваемый тип процессора (Athlon XP) имеет расширенный набор команд только для обработки чисел с плавающей точкой в четырехбайтовом представлении. Таким образом, для проведения указанных тестов были откомпилированы три различных исполняемых модуля, реализующих вычисления с восьмибайтовой и четырехбайтовой точностью, и четырехбайтовой точностью с оптимизацией.

На рис. 3 представлены результаты тестирования узла кластера описанными выше модулями в зависимости от размерности задачи. Из представленных зависимостей видно, что производительность узла максимальна (2.23 гигафлоп для четырехбайтовой точности и 1.38 гигафлоп для восьмибайтовой точности) при использовании всей оперативной памяти и резко падает с началом виртуализации памяти. Увеличение размерности задачи снижает влияние накладных расходов операционной системы.

Тестирование сетевого оборудования

В процессе тестирования сетевого оборудования производилось определение его характеристик в режимах обмена УЗЕЛ-УЗЕЛ и коллективного обмена.

При тестировании в режиме обмена УЗЕЛ-УЗЕЛ производилось сравнение производительности двух различных сетевых адаптеров, которые предполагалось использовать на рядовых узлах. Рассматривались адаптеры Gigabit Ethernet 3Com 3C996B-T и Gigabit Ethernet Hardlink HA-32G. Для двухпроцессорного узла был выбран сетевой адаптер Gigabit Ethernet Hardlink HA-64G. Тестирование сетевых адаптеров производилось при подключении типа УЗЕЛ-УЗЕЛ (использовалось непосредственное соединение сетевых адаптеров двух узлов сетевым

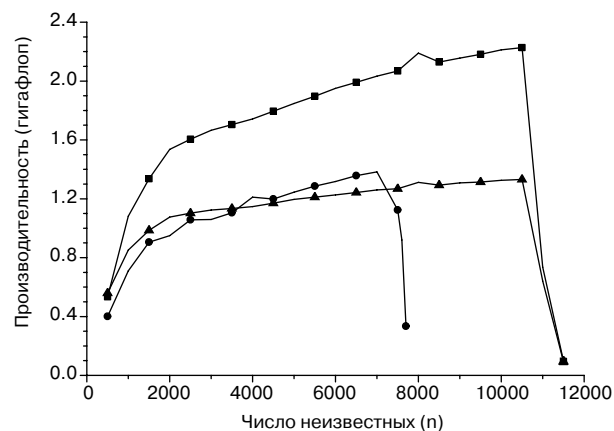


Рис. 3. Производительность узла кластера в зависимости от размерности задачи и точности вычислений: ● – 8 байт, ▲ – 4 байта, ■ – 4 байта с оптимизацией.

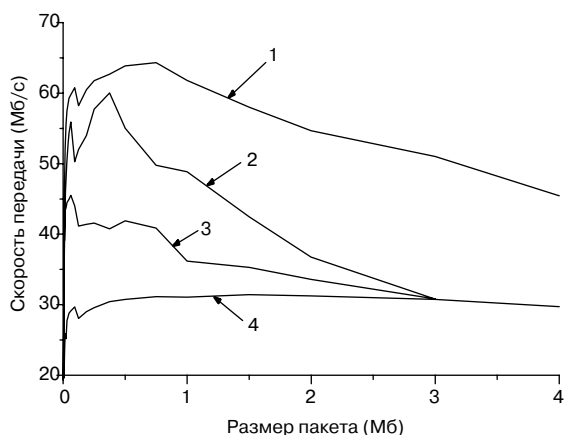


Рис. 4. Скорость передачи данных в зависимости от размера пакета: 1 – 3C996B-T/3C996B-T, 2 – HA-64G/3C996B-T, 3 – HA-64G/HA-32G и 4 – HA-32G/HA-32G.

кабелем категории 5е длиной 1.5 м). В качестве инструмента использовалась утилита Netpipe. Оценивалась латентность и скорость передачи данных. Латентность оценивалась на соединении двух однотипных адаптеров временем передачи пакетов минимальной длины и составила: для 3C996B-T – 64 мкс, HA-64G – 104 мкс, HA-32G – 170 мкс.

Скорость передачи оценивалась в зависимости от величины передаваемого пакета данных для четырех комбинаций пар: 3C996B-T/3C996B-T, HA-32G/HA-32G, HA-64G/3C996B-T и HA-64G/HA-32G. На рис. 4 приведена зависимость скорости передачи величины передаваемого пакета данных для указанных пар адаптеров.

Как видно из приведенного графика, адаптер 3Com практически в полтора раза превосходит по своим показателям адаптеры Hardlink. Однако, если оценивать показатель цена/производительность, использование адаптеров Hardlink выглядит предпочтительнее.

На рис. 5 приведены результаты тестирования сетевого оборудования модулем Transfer в зависимости от

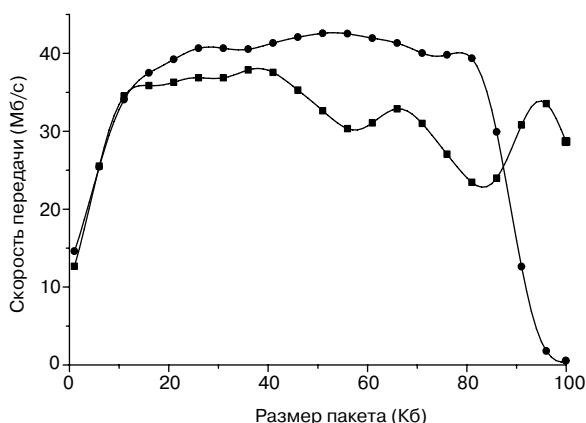


Рис. 5. Скорость передачи данных в зависимости от размера пакета при коммутации узлов попарно: ■ – HA-64G-HA-32G, ● – HA-32G-HA-32G.

Таблица 1. Тип оборудования и скорость передачи данных для разных вычислительных кластеров.

Кластер	Тип оборудования	Скорость передачи данных (Мб/с)
НИВЦ (г. Нижний Новгород)	SCI	26.08
	Fast Ethernet	3.46
	SPP1600	17.36
	Parsytec	1.08
КазНЦ	Fast Ethernet	3.137
АРКО-9A2200	Gigabit Ethernet	9.421

величины передаваемого пакета данных. Эти результаты получены при использовании неблокирующего двуправленного режима приема-передачи для операций Isend/Irecv при коммутации обменивающихся узлов попарно.

В таблице 1 приводится сравнение скорости обмена при величине пакета 1 Кб кластера АРКО-9A2200 и некоторых кластеров, производительность которых была оценена утилитой Transfer, а полученная информация опубликована в сети интернет.

В режиме коллективного обмена тестирование сетевого оборудования кластера производилось при соединении через коммутатор всех восьми узлов. Определение производительности сетевого оборудования проводилось для нескольких вариантов коммутации узлов: звезда (один узел производит обмен со всеми остальными), кольцо (каждый узел обменивается только с двумя соседними узлами), хаос (каждый узел обменивается со всеми остальными узлами). Этот тест производился при помощи модуля Nettest. На рис. 6 приведены зависимости пропускной способности сетевого оборудования от величины передаваемого пакета данных.

Тестирование интегральной производительности кластера

Как и для случая одного узла, производительность кластера определялась при решении системы уравнений утилитой Linpack пакета PLAPACK в зависимости от размерности решаемой задачи, точности вычислений и степени оптимизации вычислений под тип используемого процессора. На рис. 7 приведены графики этих зависимостей, полученные в ходе тестирования. Как и в случае одного узла, максимальная производительность кластера достигается при использовании всей доступной оперативной памяти и составляет 15.05 гигафлоп для четырехбайтовой точности решения и 8.11 гигафлоп для восьмибайтовой точности. С началом использования странного файла производительность кластера резко снижается. Пиковая производительность кластера (сумма производительностей всех узлов кластера) при использовании для вычислений 8 узлов составит 17.84 гига-

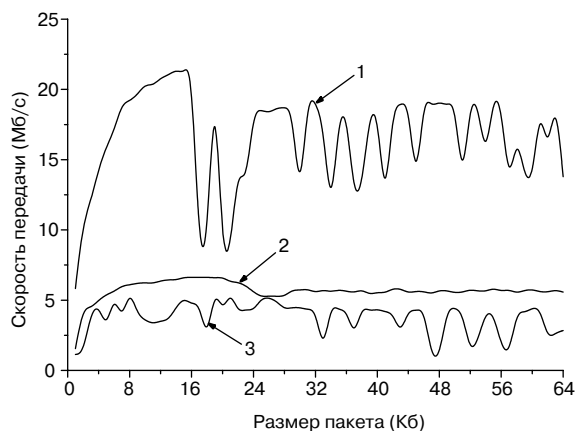


Рис. 6. Скорость передачи данных в зависимости от размера пакета и схемы коммутации узлов кластера: 1 – кольцо, 2 – звезда, 3 – хаос.

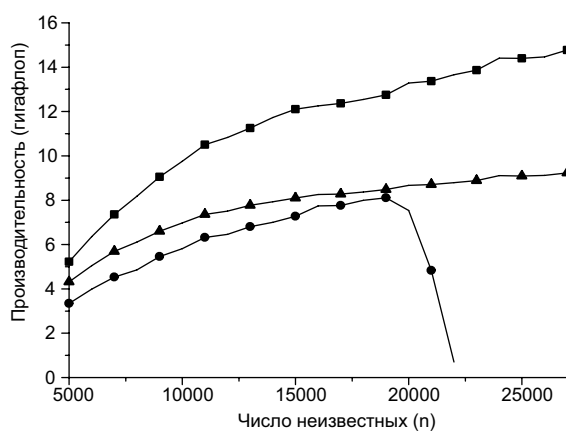


Рис. 7. Производительность кластера в зависимости от размерности задачи и точности вычислений: ● – 8 байт, ▲ – 4 байта, ■ – 4 байта с оптимизацией.

флп для четырехбайтовой точности решения и 11.04 гигафлп для восьмибайтовой. Степень эффективности использования узла кластера составит в первом случае – 0.84, и во втором – 0.73.

Производительность при конечно-элементном анализе

Исследование производительности кластера проводилось и при определении методом конечных элементов напря-

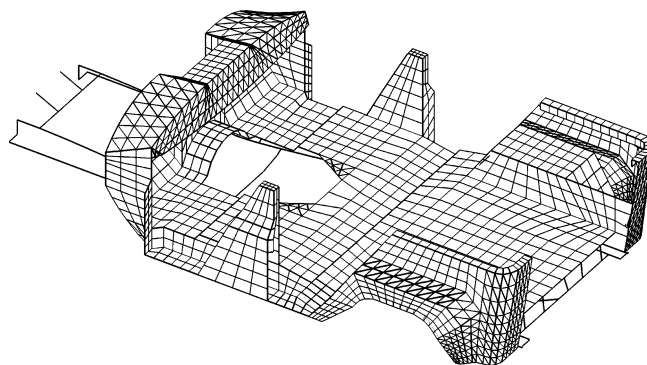


Рис. 8. Расчетная схема конструкции.

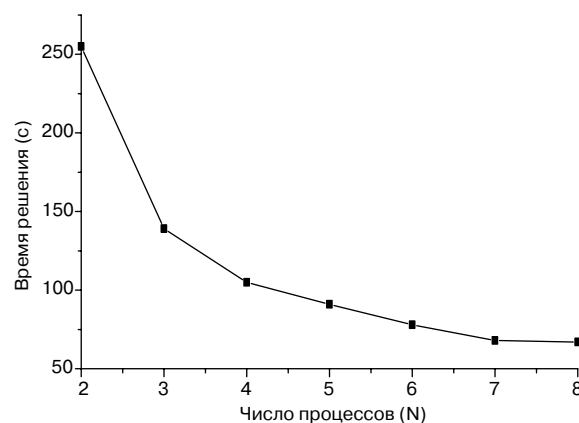


Рис. 9. Время решения задачи в зависимости от числа процессов.

женно-деформированного состояния конструкции, схема которой приведена на рис. 8.

Задача содержала 16050 неизвестных при ширине полуленты 594. Время решения при использовании различного количества узлов кластера приведено на рис. 9.

Литература

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.: Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург 2002. 608 с.

Математическое моделирование при проектировании и доводке рам автомобилей повышенной проходимости

Ю. В. Садчиков, С. К. Черников

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Рассмотрена методика определения напряженно-деформированного состояния (НДС) в рамах автомобилей повышенной проходимости. Показана возможность использования элементов тонкой оболочки для оценок общего и локального НДС конструкции.

При проектировании несущих систем автомобилей повышенной проходимости большое внимание уделяется вопросам прочности и жесткости рам, поскольку они воспринимают большинство из действующих на автомобиль нагрузок. Высокая жесткость рам таких автомобилей обеспечивается применением профилей закрытого сечения для лонжеронов и наиболее нагруженных поперечин, а также использованием сварки при сборке рамы. Настоящая работа посвящена исследованию влияния различных методических аспектов моделирования рам полноприводных грузовых автомобилей на результаты численной оценки общего и локального напряженно-деформированного состояния (НДС) этих конструкций.

Исследования проводились на примере несущей системы полноприводного грузового автомобиля малой грузоподъемности Ульяновского автомобильного завода (рис. 1). При расчетном анализе НДС рама автомобиля рассматривалась как композиция плоских конечных элементов оболочки. Использовались элементы с различной схемой интегрирования сдвиговой составляющей, описанные в работе [1]. НДС конструкции определялось на четырех равномерно сгущающихся сетках. Первый вариант модели насчитывал 1493 элемента при 8943 неизвестных, четвертый вариант – 9954 элемента при 60585 неизвестных.

Достоверность разработанной модели изолированной рамы проверялась сравнением расчетных оценок

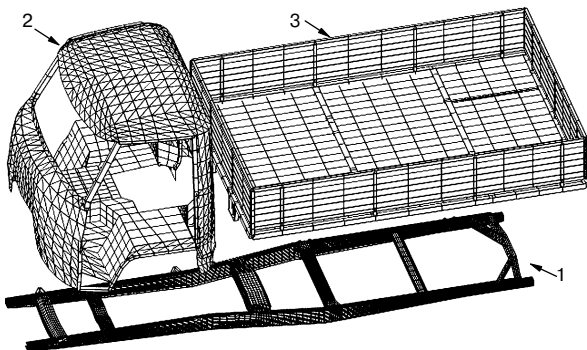


Рис. 1. Математическая модель несущей системы автомобиля. 1 – рама, 2 – кабина, 3 – платформа.

характеристик общего НДС рамы для случаев изгиба и кручения с оценками, полученными в процессе натурального эксперимента, проведенного авторами [2]. Погрешность численного определения перемещений для четвертого варианта модели при использовании элементов с сокращенной схемой интегрирования составила менее 5% при изгибе и менее 9% при кручении. Напряжения в контрольных точках для обоих вариантов нагружения определялись с погрешностью, не превышающей 30%. Таким образом, проведенные расчетно-экспериментальные исследования подтвердили корректность математической модели рамы, позволяющей получить расчетные оценки общего НДС рамы с достаточной для практического использования точностью.

Сложившаяся в нашей стране практика проектирования предполагает проведение расчетов рам грузовых автомобилей без учета влияния надстройки (кабины и платформы) в предположении, что рама целиком воспринимает действующие на автомобиль нагрузки. В этом случае полезную нагрузку и массу надстройки прикладывают непосредственно к раме, распределяя ее пропорционально “грузовым площадкам”. При имитации вывешивания одного из колес автомобиля расчет рассматриваемой рамы в подобной постановке выявил напряжения чрезмерной величины. Так, в местах соединения лонжеронов рамы с первой и второй поперечинами наблюдались напряжения, превышающие 3000 МПа, что на порядок выше предела прочности материала рамы. Учитывая подтвержденную экспериментально достоверность используемой конечно-элементной модели, можно заключить, что изолированная рама при полной нагрузке не способна выдерживать вывешивания одного из колес автомобиля. Для получения более корректных оценок НДС рамы автомобиля необходим учет упругого взаимодействия рамы с элементами надстройки: кабины и грузовой платформы.

Для исследования совместного деформирования элементов несущей системы потребовалось включение в расчетную модель надстройки автомобиля. Кабина автомобиля моделировалась преимущественно при помощи конечных элементов тонкой оболочки. Отдельные элементы силового каркаса моделировались элементами

балки. Открытая бортовая платформа также моделировалась элементами тонкой оболочки и балки. При моделировании в болтовых и шарнирных соединениях деталей платформы допускались относительные повороты и перемещения в соответствующих направлениях. Степень дискретизации моделей кабины и платформы выбиралась из условия достаточности для определения их интегральной жесткости. Модели кабины и платформы автомобиля с нанесенной сеткой конечных элементов показаны на рис. 1.

Учет упругого взаимодействия рамы с надстройкой внес существенные изменения в картину НДС рамы при вывешивании колеса. Величина максимального прогиба уменьшилась в 5.22 раза. В передней части лонжеронов рамы существенно (до 5 раз) снизился общий уровень напряжений. Максимальные напряжения, наблюдаемые в местах соединения лонжеронов с 1-й и 2-й поперечинами, не превышали 350 МПа. В таблице 1 приведены величины усилий, возникающих в узлах крепления к раме элементов надстройки. В этой же таблице приведены значения нагрузок, которые прикладывались к изолированной раме при её нагружении по грузовым площадкам. Очевидно, что реакции взаимодействия рамы с кабиной (точки 1–4) и платформой (точки 5–12) значительно отличаются от усилий, которые прикладывались к раме при нагружении по грузовым площадкам. При этом в точках 2 и 3 реакции отличаются не только по величине, но и по направлению.

Таким образом, кабина и грузовая платформа вносят существенный вклад в характеристики жесткости несущей системы автомобиля при кручении, и пренебрежение их влиянием может привести к серьезным ошибкам как при определении жесткостных характеристик несущей системы, так и при анализе напряжений, возникающих в раме. Для случая изгиба заметного влияния надстройки рассматриваемого автомобиля на НДС рамы отмечено не было.

При деформировании рамы в узлах рамы (зонах соединения лонжеронов и поперечин) возникают области повышенных напряжений. Это обусловлено как стес-

нением деформаций сечений лонжеронов и поперечин в узлах рамы, так и наличием в этих местах зон конструктивной неоднородности (сварные швы, отбортовки, вырезы и т.п.). Недостаточная детализация и неполный учет особенностей взаимодействия соединяемых элементов в этих зонах может привести к неправильным результатам при оценке локального НДС конструкции. На примере зоны соединения правого лонжерона рамы со второй поперечиной рассмотрим влияние на численные оценки НДС в узле рамы следующих методических факторов: количества конечных элементов в расчетной сетке, степени детализации геометрии и наличия эффектов “трехмерности” НДС. На рис. 2 показаны поля интенсивности напряжений в рассматриваемой зоне, полученные при исследовании кручения рамы с учетом упругого взаимодействия с надстройкой для четвертого варианта модели. Вычисленная величина интенсивности напряжений в верхней отбортовке поперечины достигает 340 МПа (зона А).

Для исследования достаточности сетки конечных элементов в расчетной модели было проведено её дальнейшее сгущение без изменений геометрии модели рамы. Модель рамы с этой сеткой насчитывала 47103 элемента при 277446 неизвестных (увеличение репрезентативности более чем в 4.5 раза). На рис. 3 показана сетка конечных элементов в исследуемой зоне после сгущения. Анализ полей напряжений при кручении рамы, полученных по этой модели, показал, что в зоне А величина максимальных напряжений увеличилась до 370 МПа. Следовательно, при заметном измельчении сетки картина НДС изменяется не существенно.

Ранее, при моделировании зон соединения поперечин с лонжеронами, отбортовки поперечин моделировались в виде плоских переходных участков. В действительности форма отборонок представляет собой цилиндрическую поверхность с некоторым радиусом. Учет в расчетной модели этого радиуса в соединении 2-й поперечины с лонжероном, а также радиусов закругления верхних ребер 2-й поперечины привел к увеличению максимальных напряжений в зоне А до 490 МПа. Рост величины максимальных напряжений в отбортовке мо-

Таблица 1. Усилия, действующие на раму при кручении.

Номер точки	Усилие (Н)	
	Без надстройки	С надстройкой
1	–1025	–4111.25
2	–1025	2554.84
3	–1025	1136.4
4	–1025	–3681.08
5	–1133.35	–2281.59
6	–1133.35	–120.86
7	–1996.7	–1391.35
8	–1996.7	–2679.83
9	–1726.7	–969.31
10	–1726.7	–865.53
11	–863.35	–552.31
12	–863.35	–2581.51

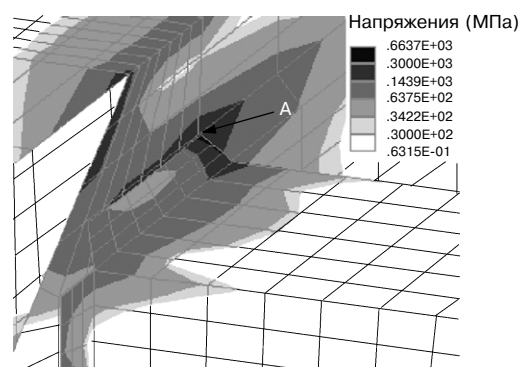


Рис. 2. Поля интенсивности напряжений в зоне соединения правого лонжерона рамы и поперечины № 2. А – зона максимальных напряжений.

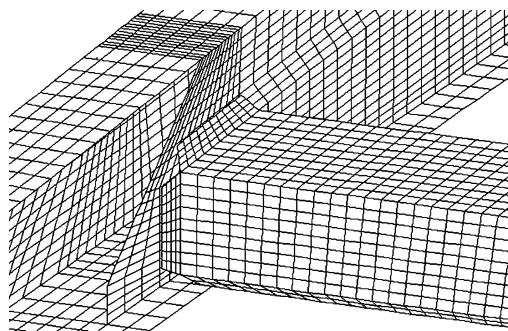


Рис. 3. Фрагмент сетки конечных элементов после сгущения.

жет свидетельствовать как о локальном изгибе, который в случае плоской отбортовки не наблюдался, так и о некорректном использовании плоских четырехугольных элементов в исследуемой области. Дело в том, что использованные четырехугольные элементы весьма чувствительны к отклонению формы элемента от плоской, и при наличии таких отклонений могут демонстрировать значительное снижение точности, в том числе и в виде появления фиктивных зон концентрации напряжений. Треугольные конечные элементы оболочки, использованные в работе [3], свободны от этого недостатка, хотя обладают существенно меньшей скоростью сходимости. Моделирование отбортовок 2-й поперечины треугольными элементами привело к снижению величины максимальных напряжений в зоне А до 390 МПа.

При анализе сложных тонкостенных конструкций в ряде случаев возникают ситуации, когда при соединении частей конструкции их срединные поверхности не совпадают. В конструкциях автомобильных рам такая ситуация часто возникает в соединениях лонжеронов с поперечинами (рис. 4).

Такая особенность конструкции позволяет различным образом моделировать область стыка. Можно предположить, что в местах соединения сопрягаемые узлы отстоят друг от друга на величину эксцентриситета, равного полусумме толщин соединяемых подконструкций, а соответствующие компоненты перемещений каждой пары сопрягаемых узлов равны между собой. Од-

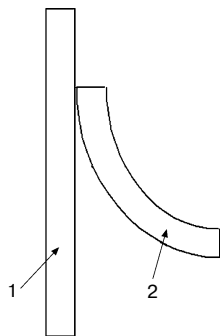


Рис. 4. Схема соединения лонжерона и поперечины. 1 – стенка лонжерона, 2 – отбортовка поперечины.

нако можно представить себе и другую модель, в которой эксцентриситет полагается равным нулю. Проведенные исследования зоны соединения 2-й поперечины с правым лонжероном показали, что заметного изменения характера напряженного состояния при использовании обеих модификаций расчетной модели не произошло, а напряжения в зоне А находятся в пределах 370–380 МПа.

При Т-образном соединении тонкостенных деталей сваркой, в зоне соединения могут возникать эффекты трехмерности НДС, не описываемые в рамках модели оболочки Кирхгоффа-Лява. Места соединений отбортовок поперечин с лонжероном представляют собой пример таких конструкций. Ситуация усугубляется еще и тем, что в этих зонах наблюдаются повышенные уровни напряжений. Для исследования природы этих зон повышенных напряжений и возможности использования для их анализа моделей тонкой оболочки было проведено сравнительное исследование фрагмента рамы при помощи трехмерных конечных элементов сплошной среды и четырехугольных конечных элементов тонкой оболочки. НДС определялось при изгибе и кручении конструкции под действием сил, показанных на рис. 5. Свободные кромки полок фрагмента лонжерона считались защемленными. При решении задачи по трехмерной модели использовались два варианта сетки конечных элементов: первый насчитывал 50970 элементов при 182412 неизвестных, второй – 126348 элементов при 438840 неизвестных.

При решении задачи по оболочечной модели также использовались два варианта сетки. Модель первого варианта насчитывала 2723 элемента (16344 неизвестных). Второй вариант модели отличался увеличением количества элементов до 6132 при 36738 неизвестных.

Анализ результатов расчетов показал, что при изгибе величина максимальных напряжений, полученная по оболочечной модели, превышает соответствующую величину, полученную при помощи трехмерной модели, не более чем на 10%. Для случая кручения максимальные напряжения практически совпадают. Эффекты трехмерности НДС хотя и наблюдаются, но незначительные,

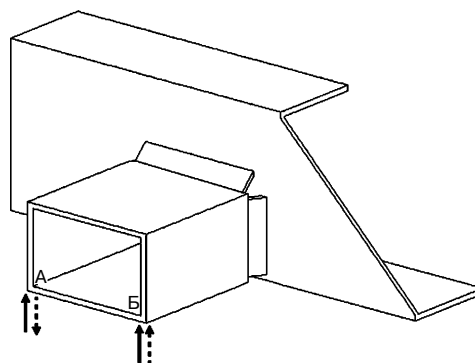


Рис. 5. Фрагмент рамы автомобиля. А и Б – точки приложения нагрузки. Сплошные стрелки – нагрузки при изгибе, пунктирные – при кручении.

и ими можно пренебречь. Существенного изменения картины распределения напряжений при сгущении сетки не происходит ни для оболочечной, ни для трехмерной модели. Таким образом, модель тонкой оболочки Кирхгоффа-Лява достаточно точно отражает параметры локального НДС узла.

Проведенные исследования позволяют утверждать, что при достаточной густоте сетки использование конечных элементов тонкой оболочки для моделирования рамы автомобиля, включая зоны соединения лонжеронов и поперечин рамы, позволяет с приемлемой точностью определять как жесткостные параметры, так и возника-

ющие в конструкции напряжения. При этом обязателен учет надстройки, особенно при кручении рамы.

Литература

1. Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Автомобиль и техносфера, тр. III Междунар. науч.-практ. конф., с. 269–278. Казань 2003.
2. Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Проблемы машиностроения и надежности машин № 3, 117–121 (1998)
3. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ильченко Б.В.: Казанский физико-технический институт им. Завойского 2001. Ежегодник, с. 194–200. Казань: ФизтехПресс 2002.

Объектно-ориентированная постановка и некоторые особенности реализации поспроцессора комплекса для анализа конструкций методом конечных элементов

С. К. Черников, И. В. Русских

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Изложены базовые принципы построения объектно-ориентированного кода поспроцессора для программного комплекса, реализующего метод конечных элементов (МКЭ). Отмечены недостаточно отраженные в литературе особенности использования библиотеки OpenGL для реализации некоторых функций поспроцессора.

Структуры данных и алгоритмы, возникающие при программной реализации метода конечных элементов для исследований прочности, жесткости и динамических характеристик конструкций автомобилей, являются идеальным полем для приложений технологии объектно-ориентированного программирования (ООП) [1]. Особенно это касается поспроцессорной обработки результатов анализа. Здесь ООП в совокупности с графической библиотекой OpenGL [2–4] позволяет создать компактный и многофункциональный код, позволяющий визуально контролировать данные сложных объектов и просматривать результаты вычислений, включающие сотни тысяч значений.

Предлагаемый в настоящей работе подход к проектированию и реализации кода поспроцессора опирается на концепцию объекта, т.е. некоторой структуры данных, объединенной с операциями, манипулирующими этими данными (инкапсуляция), и обладающей свойствами наследования и полиморфизма. Наследование является эффективным механизмом расширения возможностей базового объекта, а полиморфное присваивание позволяет оперировать объектом-потомком, как базовым объектом. При изложении материала авторы используют нотацию языка программирования DELPHI [5], однако сказанное в равной мере может быть использовано и с любым другим объектно-ориентированным языком, например C++ [1].

В качестве базового объекта поспроцессора TGraphElement используется структура данных, общих для всех графических элементов, и виртуальный метод визуализации – Draw. Конкретный алгоритм визуализации графического элемента определяется его потомками, в том числе и не прямыми.

При визуализации сложная конструкция (структура) рассматривается нами как множество подструктур, каждая из которых, представляет собой подмножество элементов. Элементами являются узел, линия, поверхность, нагрузка, граничное условие, балка, элемент оболочки, элементарный объем, сосредоточенная масса, соединительный элемент. Список элементов может быть по необходимости легко расширен. В иерархии

объектов все перечисленные элементы являются потомками TGraphElement, дополняя, где это необходимо, структуру данных и конкретизируя метод визуализации.

Еще одним потомком объекта TGraphElement является объект TGraphElementCol, в котором поля предка дополняются списком указателей на объекты типа TGraphElement:

```
TGraphElementCol=Class(TGraphElement)
Public
  Components:TList; {Список указателей на
                    объект}
  . . . . .
  procedure Draw; override;
end;
```

Метод визуализации этого объекта представляет собой последовательное выполнение процедур визуализации элементов списка:

```
procedure TGraphElementCol.Draw;
Var
  i:integer;
Begin
  for i:=0 to Components.Count-1 do
    TGraphElement(Components[i]).Draw;
  end;
```

Объект TGraphElementCol используется в качестве базового для построения объектов структуры TStructure и подструктуры TSubStructure, которые включают необходимые поля данных и процедуры инициализации элементов списков. Отметим, что в потомках объекта TGraphElementCol метод визуализации не переопределяется.

В качестве элемента списка TStructure используются указатели на объекты типа TSubStructure, а элементами списка TSubStructure являются указатели на объекты TNodeElement, TLineElement, TSubReg, TLoadElement и TBndCndElement, соответствующие узлам, линиям, поверхностям, нагрузкам и граничным условиям. Таким образом, для визуализации геометрии конструкции дос-

таточно просто вызвать процедуру визуализации объекта TStructure.

Рисование сетки на поверхностях конструкции осуществляется использованием в методе Draw объекта TSubReg, являющегося потомком TGraphElement и описывающего произвольную поверхность конструкции, процедур `glPolygonOffset(factor,units)` и `glEnable(GL_POLYGON_OFFSET_LINE)`. Значения параметров `factor` и `units` функции `glPolygonOffset` определяют смещение контура по нормали к плоскости, определяемой координатами вершин треугольника. Их величины зависят от множества факторов и подбираются экспериментально.

Фрагмент кода процедуры рисования треугольной ячейки сетки на поверхности конструкции приведен ниже.

```
{Рисование поверхности}
glPolygonMode(GL_FRONT_AND_BACK, GL_FILL);

{Вызов процедуры рисования треугольника}
glBegin(GL_TRIANGLES);
. . . . .
glEnd;

{Рисование контура}
glColor3f(0.0, 0.0, 0.0);
glPolygonOffset(-1.0, 1.0);
glEnable(GL_POLYGON_OFFSET_LINE);
glPolygonMode(GL_FRONT_AND_BACK, GL_LINE);

{Вызов процедуры рисования треугольника}
glBegin(GL_TRIANGLES);
. . . . .
glEnd;
glDisable(GL_POLYGON_OFFSET_LINE);
```

Пример визуализации поверхности кузова автомобиля УАЗ-3160 с нанесенной на неё сеткой приведен на рис. 1.

При создании объекта типа TStructure определяют координаты узлов изображаемой недеформированной конструкции. Схему деформированного состояния конструкции можно визуализировать, добавив к этим

координатам величины упругих перемещений, предварительно умноженные на некоторый масштабный коэффициент f . Эти действия происходят при создании объекта TDefStructure и только они отличают его от предка TStructure. Визуализация схемы деформированного состояния сводится к вызову метода Draw объекта TDefStructure. Последовательный вызов этого метода с различными значениями коэффициента f достаточно просто позволяет получать анимированное изображение. Пример визуализации деформированного состояния несущей системы автомобиля УАЗ-2315 при вывешивании левого переднего колеса приведен на рис. 2.

Информация о различных полях, заданных в узлах конструкции, очень наглядно представляется в форме изополюс на поверхности конструкции. Для реализации этой функции при создании экземпляра объекта TFieldStructure, являющегося потомком TDefStructure, в узлах задаются значения поля. Рисование поверхностей конструкции с нанесенными на них изополюсами осуществляется вызовом метода Draw этого объекта. Пример изополюса интенсивностей напряжений в поперечине рамы автомобиля КамАЗ приведен на рис. 3.

Для отображения конечно-элементной структуры расчетной модели конструкции используется метод Draw объекта TElmStructure, являющегося потомком TStructure. От своего предка он отличается только тем, что при инициализации его список заполняется указателями на объект типа TElmSubStructure, образованными от TSubStructure. Список объекта типа TElmSubStructure, в свою очередь, формируется из указателей на объекты TBeamElement, TShellElement, TBodyElement, TMassElement и TConnectElement, соответствующих конечным элементам балки, оболочки, элементарного объема, сосредоточенной массы и соединительного элемента. Необходимость переопределения метода инициализации предка в объекте типа TElmStructure возникает вследствие того, что обычно информация о геометрии модели и её физическом наполнении (о типах конечных элементов и их свойствах) организована различным образом. В качестве примера

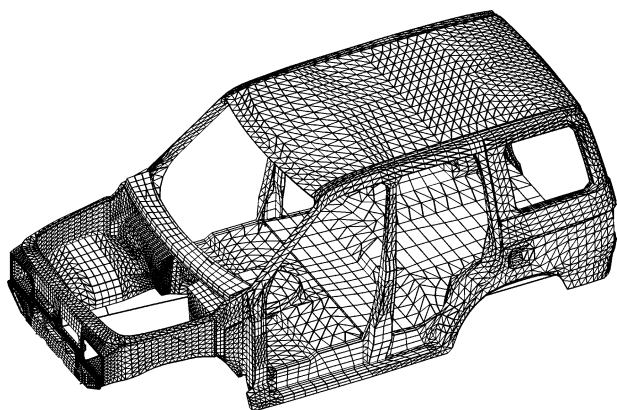


Рис. 1. Геометрическая модель кузова автомобиля с нанесенной на поверхностях сеткой.

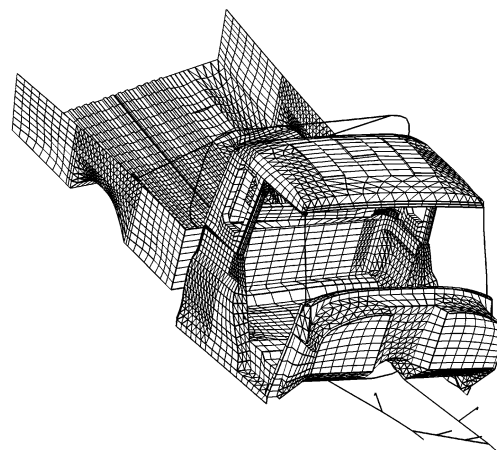


Рис. 2. Схема деформированного состояния конструкции.

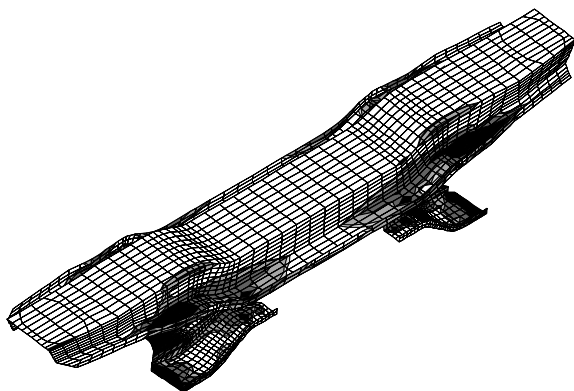


Рис. 3. Изополю интенсивностей напряжений на поверхности поперечины рамы грузового автомобиля.

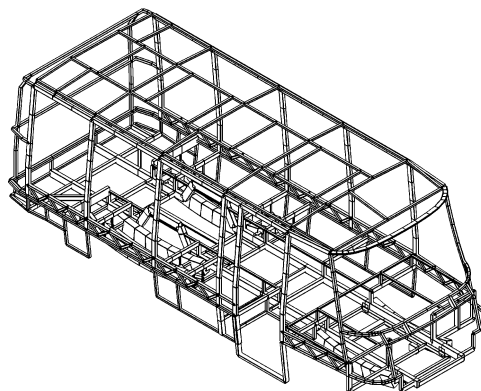


Рис. 4. Конечно-элементная схема каркаса кузова автобуса.

на рис. 4 приведена конечно-элементная схема каркаса автобуса КАМАЗ-2375.

Схема иерархии описанных объектов постпроцессора приведена на рис. 5.

Все функции управления сценой (выбор проекции, перемещение изображения, его поворот и масштабирование, анимация) инкапсулированы в объекте типа TScene, манипулирующим объектом типа TStructure. Используя полиморфное присваивание, т.е. присваивая объекту типа TStructure значения объектов типа TDefStructure, TFieldStructure или TElmStructure, можно реализовать те или иные функции постпроцессора. Таким образом, с объектом типа TStructure TScene позволит отображать только геометрию конструкции, с объектом типа TDefStructure – геометрию и деформи-

рованное состояние, а с объектом TFieldStructure – геометрию, деформированное состояние и изополю узловых параметров. С объектом типа TElmStructure TScene сможет визуализировать схему конечных элементов расчетной модели конструкции. Механику этого процесса проиллюстрируем на примере фрагмента кода модуля постпроцессора, отображающего схему конечно-элементной модели. При создании окна приложения производятся операции:

```
{создается объект отображения}
Structure:=TElmStruct.Create;
{создается объект сцены}
Scene:=TScene.Create(Handle);
{производится полиморфное присваивание}
Scene.Structure:=Structure;
```

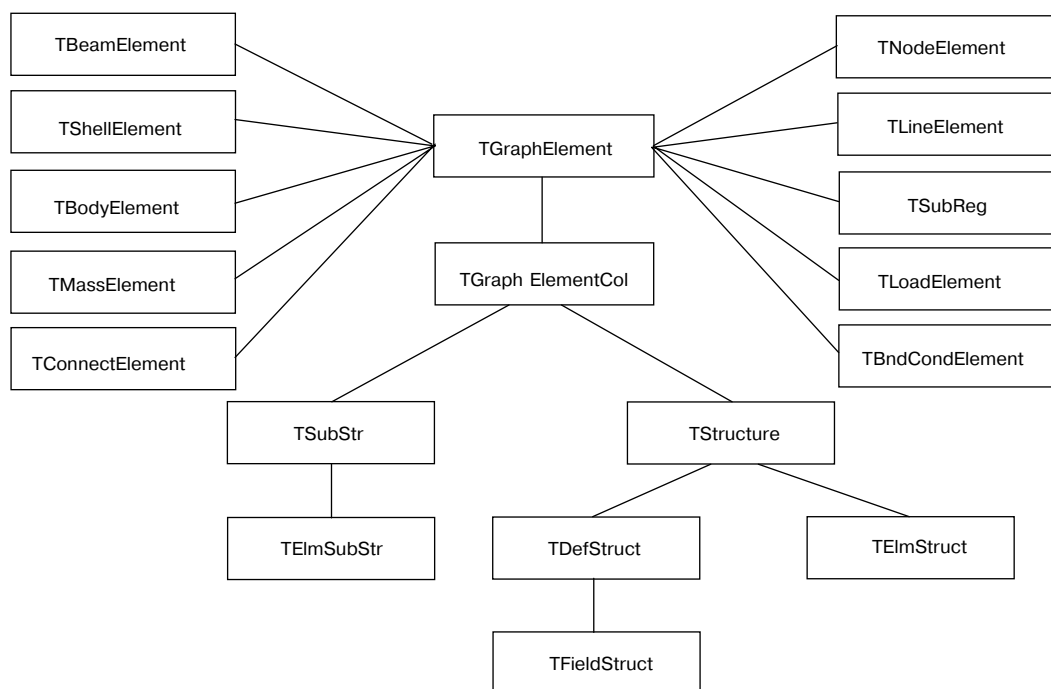


Рис. 5. Иерархия объектов постпроцессора.

Теперь при вызове метода Scene.Draw отображение конструкции будет происходить в соответствии с алгоритмом, реализованном в методе TEImStruct.Draw.

Отметим особенности начальной загрузки сцены. Для выбора удобного масштаба изображения размеры сцены целесообразно сделать соизмеримыми с максимальным линейным размером конструкции Lmax. При использовании ортогональных проекций это легко сделать, задав параметры функции glOrtho аналогично нижеследующему примеру кода:

```
If Rect.Right-Rect.Left<=Rect.Bottom-Rect.Top
then
begin
    ratio:=(Rect.Bottom-Rect.Top) /
            (Rect.Right-Rect.Left);
    GlOrtho(-Lmax,Lmax,-Lmax*ratio,
            Lmax*ratio,-Lmax*8,Lmax*8);
end
else
begin
    ratio:=(Rect.Right-Rect.Left) /
            (Rect.Bottom-Rect.Top);
    GlOrtho(-Lmax*ratio,Lmax*ratio,
            -Lmax,Lmax,-Lmax*8,Lmax*8);
end;
```

В приведенном примере Rect – структура, определяющая размеры области вывода. Отметим, что кроме выбора удачного начального масштаба, приведенный фрагмент обеспечивает сохранение пропорций при изменении размеров области вывода. Последующие модификации вида изображения (перемещение, поворот, масштабирование) производятся путем преобразования матрицы видов. Отметим, что для поворота объекта на угол α вокруг произвольной точки O с координатами X, Y, Z необходимо до начала поворота совместить начало координат с этой точкой, осуществить поворот, а затем переместить объект на прежнее место. Ниже приведен фрагмент кода, в котором осуществляются эти операции.

```
glPushMatrix;
glLoadIdentity;

{Установка точки наблюдения}
. . . . .

{Совмещение начала координат с точкой O}
glTranslated(X,Y,Z);

{Изменение масштаба}
glScalef(scale,scale,scale);

{Корректировка положения нормали к отображаемым поверхностям}
glEnable(GL_NORMALIZE);

{Поворот объекта на угол  $\alpha$  вокруг оси X}
glRotatef( $\alpha$ ,1,0,0);

{Восстановление начала координат}
glTranslated(-X,-Y,-Z);
```

```
{Рисование объекта}
Structure.draw;
glPopMatrix;
```

Необходимо обратить внимание на вызов glEnable(GL_NORMALIZE) после изменения масштаба изображения. Необходимость этого вызова продиктована тем, что вызов glScalef(scale,scale,scale) с масштабным фактором $scale \neq 1$ приводит в OpenGL к неправильному вычислению нормали к поверхности и, как следствие, к неправильной её освещенности.

Несколько слов о процедуре экспорта изображений, построенных средствами OpenGL, в другие графические стандарты, например, BITMAP, JPEG и т.п., и практически не описанной в официальных источниках [3, 4]. Рассмотрим возможную технологию экспорта на примере экспорта сцены в BITMAP. Для этого в начале создадим DIB-объект с дескриптором Buf. Дальнейшие действия по экспорту приведены ниже:

```
{Создаем контекст устройства newDC, совместимый с контекстом окна приложения - DC}
newDC:=CreateCompatibleDC(DC)

{Помещаем DIB-объект в контекст newDC}
SelectObject(newDC,buf);

{Устанавливаем флаги OpenGL и выбираем формат пикселя}
. . . . .

{Освобождаем старый и устанавливаем новый текущий контекст отображения HRC}
wglMakeCurrent(0,0);
HRC:=wglCreateContext(newDC);
wglMakeCurrent(newDC,HRC);

{Осуществляем рисование на текущем контексте}
. . . . .

{Создаем объект bmp типа TBitmap}
Bmp:=TBitmap.Create;

{Устанавливаем размеры Bmp равными размерам DIB-объекта и копируем с помощью функции StretchDIBits DIB-объект в bmp}
. . . . .

{Сохраняем изображение в файле с именем FileName}
Bmp.SaveToFile(FileName);

{Удаляем Bmp}
Bmp.Free;

{Освобождаем текущий контекст воспроизведения, удаляем контекст HRC, удаляем DIB-объект}
wglMakeCurrent(0,0);
wglDeleteContext(HRC);
DeleteObject(Buf);
```

Экспорт изображения в другие форматы (JPEG, WMF) осуществляется аналогично.

Авторы выражают глубокую благодарность А. Н. Ашихмину за помощь в программной реализации некоторых функций поспроцессора.

Литература

1. Цимбал А.А., Майоров А.Г., Козодаев М.А.: Турбо С++: язык и его применение. М.: Джен Ай Лтд 1993. 512 с.
2. Краснов М.В.: OpenGL. Графика в проектах Delphi. СПб.: БХВ-Санкт-Петербург 2000. 352 с.
3. Шрайнер Д.: OpenGL. Официальный справочник. СПб: ООО "ДиаСофтЮП" 2002. 512 с.
4. Ву М., Нейдер Д., Девис Т., Шрайнер Д.: OpenGL. Официальное руководство программиста. СПб: ООО "ДиаСофтЮП" 2002. 592 с.
5. Калверт Ч.: DELPHI-2. Энциклопедия пользователя. Киев: НИПФ "ДиаСофт Лтд" 1996. 736 с.

Кинетика НДС области вершины трещины при ползучести

В. Н. Шлянников, Н. В. Бойченко, Б. В. Ильченко

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Проведен анализ напряженно-деформированного состояния (НДС) области вершины трещины для нескольких стадий долговечности при различных значениях коэффициента двухосности. Использована аддитивная декомпозиция полных деформаций на компоненты упругости, пластичности и ползучести. Представлен анализ кинетики упруго-пластического состояния в зависимости от значения коэффициента двухосности и длительности выдержки под нагрузкой при ползучести.

В настоящей работе поставлена цель проанализировать кинетику напряженно-деформированного состояния (НДС) по стадиям долговечности в области вершины трещины для среды, сочетающей свойства упругости, пластичности и ползучести в зависимости от условий двухосного нагружения. В плоской задаче, как правило, условия внешнего нагружения тела с трещиной характеризуются соотношением номинальных напряжений, действующих по взаимно перпендикулярным направлениям или коэффициентом двухосности $\eta = \sigma_{xx}^\infty / \sigma_{yy}^\infty$. При этом используется аддитивное разложение деформаций на упругую и нелинейные составляющие так, что суммарная скорость деформаций является суммой скоростей деформаций соответствующей природы [1]. Поведение вязко-упруго-пластической среды описывалось константами диаграмм деформирования и ползучести роторной стали 25X1M1Ф (P2). Считаем, что при одноосном растяжении соотношение между напряжениями и деформациями аппроксимируется моделью Рамберга-Осгуда

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_y} = \frac{\sigma}{\sigma_y} + \alpha \left(\frac{\sigma}{\sigma_y} \right)^m, \quad (1)$$

которая для общего случая сложного напряженного состояния приводится к виду:

$$\frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_y} = (1 + \nu) \frac{S_{ij}}{\sigma_y} + \frac{1 - 2\nu}{3} \frac{\sigma_{pp}}{\sigma_y} \delta_{ij} + \frac{3}{2} \alpha \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_y} \right)^{m-1} \frac{S_{ij}}{\sigma_y}. \quad (2)$$

В этих формулах α и m – константы упрочнения, E – модуль упругости, ν – коэффициент Пуассона, σ_y – предел текучести и $\varepsilon_y = \sigma_y / E$, S_{ij} – девиатор напряжений, σ_{pp} – гидростатическое напряжение, δ_{ij} – символ Кронекера, $\sigma_e = (3/2 S_{ij} S_{ij})^{1/2}$ – эквивалентное напряжение.

Уравнение (2), согласно теории течения, может быть представлено в компонентах скоростей деформации $\dot{\varepsilon}_{ij}$ и напряжений $\dot{\sigma}_{ij}$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = (1 + \nu) \dot{\sigma}_{ij} - \nu \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} + \frac{3}{2} m \alpha \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_y} \right)^{m-2} \frac{S_{ij}}{E} \frac{\dot{\sigma}_e}{\sigma_y}. \quad (3)$$

Для упруго-нелинейно-вязкого материала взаимосвязь между напряжением и скоростью деформаций при одноосном растяжении описывается по теории течения следующими соотношениями:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\sigma}}{E} + \dot{\varepsilon}_0 \left[\frac{\sigma}{\sigma_0} \right]^n \quad \text{или} \quad \dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\sigma}}{E} + B \sigma^n, \quad (4)$$

где B и n – коэффициент и показатель изохронной кривой ползучести при данной температуре, σ_0 и $\dot{\varepsilon}_0$ – взаимосвязанные характеристики для одной конкретной кривой ползучести при данной температуре. Конституционные соотношения (4) могут быть обобщены на ситуацию сложного напряженного состояния аналогичным уравнению (3) образом

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1 + \nu}{E} \dot{S}_{ij} + \frac{1 - 2\nu}{3E} \dot{\sigma}_{pp} \delta_{ij} + \frac{3}{2} \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0} \right)^{n-1} \frac{S_{ij}}{\sigma_0}, \\ \dot{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1 + \nu}{E} \dot{S}_{ij} + \frac{1 - 2\nu}{3E} \dot{\sigma}_{pp} \delta_{ij} + \frac{3}{2} B \sigma_e^{n-1} S_{ij}. \end{aligned}$$

Суммарные скорости деформации, согласно правилу аддитивной декомпозиции для ситуации упругости, ползучести и изотропного многоосного упрочнения, рассчитываются по формуле

$$\dot{\varepsilon}_{\text{total}} = \dot{\varepsilon}_{\text{elastic}} + \dot{\varepsilon}_{\text{creep}} + \dot{\varepsilon}_{\text{plastic}}$$

или с учетом (3), (5) и (6) получим

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1 + \nu}{E} \dot{S}_{ij} + \frac{1 - 2\nu}{3E} \dot{\sigma}_{pp} \delta_{ij} + \frac{3}{2} \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0} \right)^{n-1} \frac{S_{ij}}{\sigma_0} \\ &\quad + \frac{3}{2} m \alpha \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_y} \right)^{m-2} \frac{S_{ij}}{E} \frac{\dot{\sigma}_e}{\sigma_y}, \\ \dot{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1 + \nu}{E} \dot{S}_{ij} + \frac{1 - 2\nu}{3E} \dot{\sigma}_{pp} \delta_{ij} + \frac{3}{2} B \sigma_e^{n-1} S_{ij} \\ &\quad + \frac{3}{2} m \alpha \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_y} \right)^{m-2} \frac{S_{ij}}{E} \frac{\dot{\sigma}_e}{\sigma_y}. \end{aligned}$$

Для каждой из стадий и состояний деформирования используются соответствующие модели, описывающие НДС в области вершины трещины [2–7]. Упругое НДС описывается уравнением:

$$\sigma_{ij} = \frac{K_1}{\sqrt{2\pi r}} \tilde{\sigma}_{ij}^I(\theta) + \frac{K_2}{\sqrt{2\pi r}} \tilde{\sigma}_{ij}^{II}(\theta);$$

упруго-пластическое НДС:

$$\sigma_{ij} = \sigma_e \left(\frac{J}{\alpha \sigma_y \varepsilon_y I r} \right)^{\frac{1}{m+1}} \tilde{\sigma}_{ij}(\theta, m, M_p),$$

$$\varepsilon_{ij} = \alpha \varepsilon_e \left(\frac{J}{\alpha \sigma_y \varepsilon_y I r} \right)^{\frac{m}{m+1}} \tilde{\varepsilon}_{ij}(\theta, m, M_p);$$

ползучесть:

$$\sigma_{ij} = \sigma_0 \left(\frac{C(t)}{\sigma_0 \dot{\varepsilon}_0 I r} \right)^{\frac{1}{n+1}} \tilde{\sigma}_{ij}(\theta, n, M_p),$$

$$\varepsilon_{ij} = \dot{\varepsilon}_0 \left(\frac{C(t)}{\sigma_0 \dot{\varepsilon}_0 I r} \right)^{\frac{n}{n+1}} \tilde{\varepsilon}_{ij}(\theta, n, M_p).$$

Здесь безразмерная константа I и θ -распределения являются соответствующим образом нормализованными функциями $\tilde{\sigma}_{ij}$, $\tilde{\varepsilon}_{ij}$, зависящими или от показателя деформационного упрочнения m , или от показателя ползучести n . Амплитудный коэффициент $C(t)$ характеризует интенсивность близлежащих полей в упруго-нелинейно-вязком материале точно таким же образом, как и J -интеграл характеризует близлежащие поля в упруго-пластическом материале без учета временных эффектов. Значение $C(t)$ может быть оценено путем использования линейного интеграла:

$$C(t) = \int_{\Gamma} \left(\frac{n}{n+1} \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} n_i - \sigma_{ij} n_j \dot{u}_{i,1} \right) ds,$$

где Γ – исчезающе малый контур обхода против часовой стрелки вершины трещины, n_i и n_j – вектор единичной нормали к внешнему контуру, ds – длина дуги вдоль Γ и $\dot{u}_{i,1}$ – скорость градиента перемещения (по отношению к x_i). При длительном времени приложения нагрузки зона ползучести распространяется на всю область, и поведение материала подобно идеально вязкому телу.

В настоящей работе исследование полей напряжений в вершине трещины, находящейся в вязко-упруго-пластическом материале, основано на применении метода конечных элементов (МКЭ). Все расчеты полей параметров НДС проводились с использованием системы ANSYS [8, 9]. Рассматривался объект в виде пластины бесконечных размеров с центральной трещиной в условиях мягкого нагружения (рис. 1). Моделирование области бесконечных размеров в рамках МКЭ осуществля-

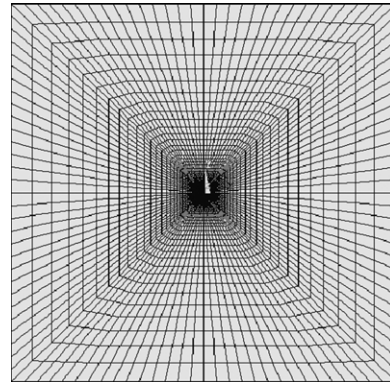


Рис. 1. Расчетная схема МКЭ пластины с центральной трещиной.

лось по определенным правилам [10]. В данной работе поведение тела с трещиной проанализировано для трех различных значений коэффициента двухосности: $\eta = 1$ (равнодвухосное растяжение), $\eta = 0$ (одноосное растяжение) и $\eta = -1$ (равнодвухосное растяжение-сжатие) для двух уровней приложенного номинального напряжения $\sigma = 100$ и 150 МПа.

Исследование проводилось с использованием свойств пластичности и ползучести роторной стали Р2 при температуре 550°C в условиях плоской деформации. Путем аппроксимации экспериментальных диаграмм деформирования и кривых ползучести найдены коэффициент деформационного упрочнения $m = 3.96$ и константы ползучести по теории течения $B = 1.4 \cdot 10^{-10}$ и $n = 2.47$. Диапазон времени выдержки под нагрузкой или время ползучести последовательно увеличивалось от 100 до $3 \cdot 10^4$ ч.

Все полученные результаты интерпретировались в виде полярных распределений компонент безразмерных напряжений. При этом значения компонент напряжений определялись для узлов расчетной схемы, принадлежащих окружности, расположенной на расстоянии от вершины трещины, равном $\bar{r} = r \sigma_0 / J = 6$ и нормировались на значение приложенных номинальных напряжений. Полученные результаты представлялись в виде графиков зависимости компонент напряжений от полярного угла, отсчитываемого от нижней поверхности трещины.

Кинетика радиальной составляющей безразмерных напряжений в зависимости от времени ползучести для различных значений коэффициента двухосности нагружения представлена на рис. 2. Из представленных данных следует, что из рассмотренных условий двухосного нагружения наибольшая вариация распределений радиальных напряжений в зависимости от долговечности достигается при значении коэффициента двухосности $\eta = 1$ (равнодвухосное растяжение) (рис. 2а). При этом меняются не только численные значения радиальной составляющей, но и форма кривой распределений напряжений в области вершины трещины. На эти же графики для сравнения нанесено соответствующее решение для упруго-пластического состояния по модели Хатчинсона-

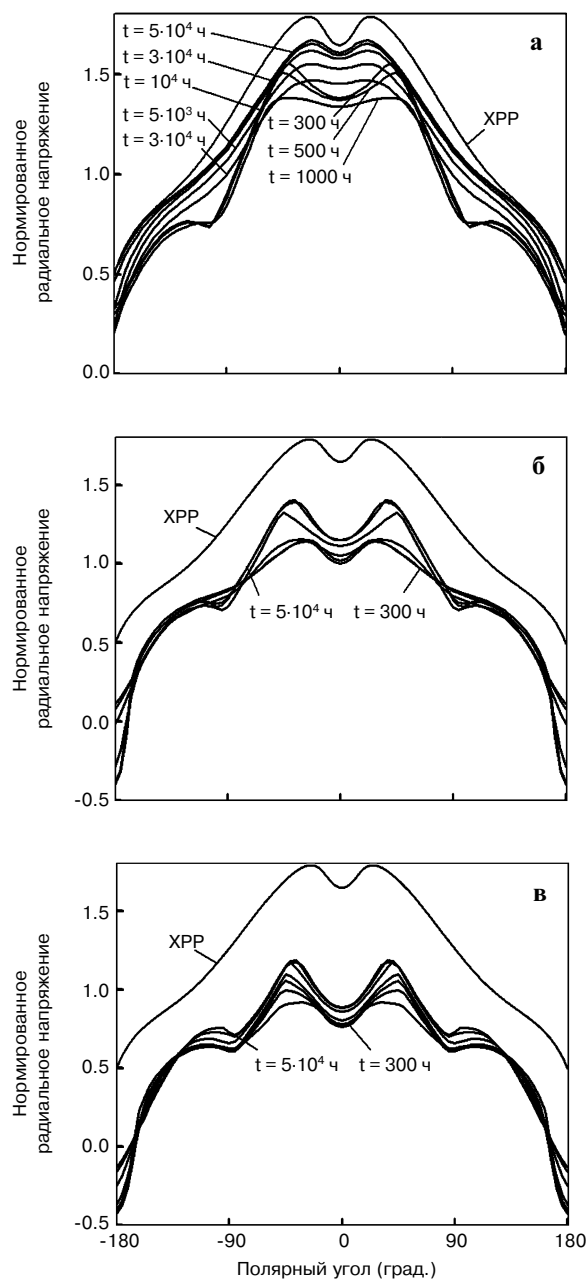


Рис. 2. Полярное распределение радиальной компоненты напряжений по стадиям долговечности для $\eta = 1$ (а), $\eta = 0$ (б), $\eta = -1$ (в). $\sigma = 100$ МПа.

Райса-Розенгрена (ХРР) [3, 4]. Необходимо отметить, что по мере перехода от равнодвухосного растяжения ($\eta = 1$) к равнодвухосному растяжению-сжатию ($\eta = -1$) эффект влияния времени выдержки под нагрузкой уменьшается (рис. 2).

На рис. 3 представлены распределения всех компонент тензора напряжений для плоской задачи при фиксированном значении долговечности $t = 1000$ ч для двух различных значений номинальных напряжений 100 и 150 МПа. Сравнительная оценка влияния коэффициента двухосности нагружения и уровня приложенных напряжений между собой показывает, что эти два фактора внеш-

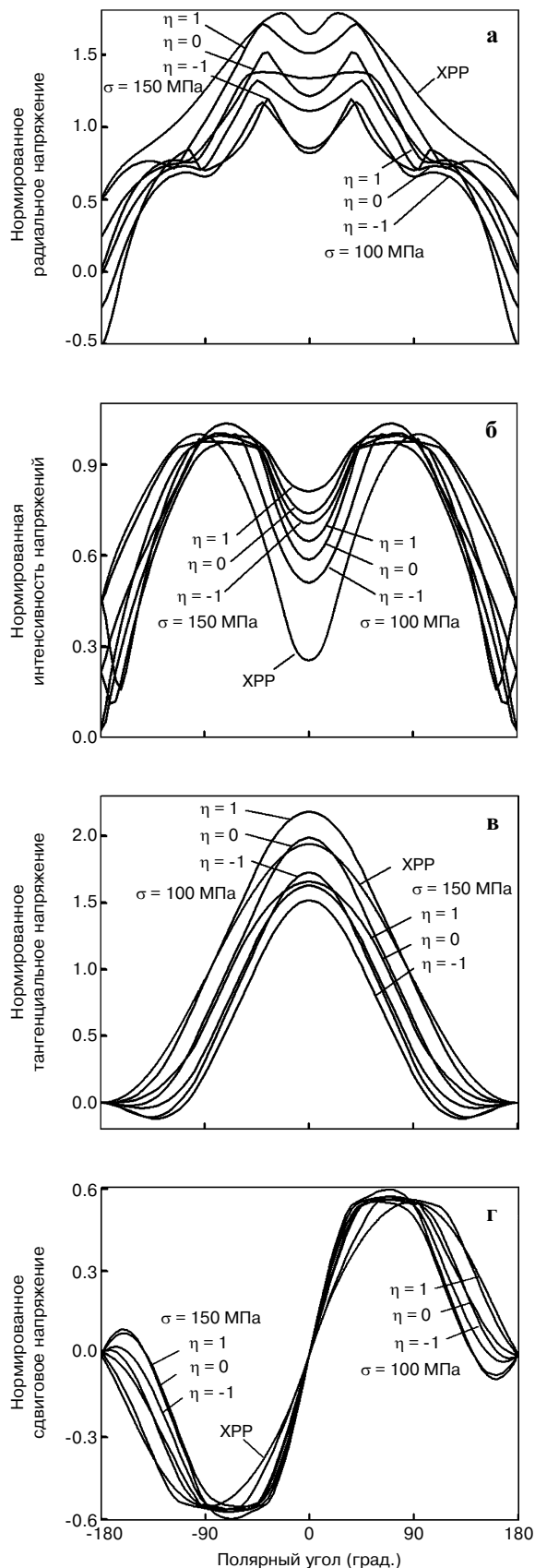


Рис. 3. Полярное распределение радиальной компоненты напряжения (а), интенсивности напряжений (б), окружных напряжений (в) и сдвиговых напряжений (г) для различных значений коэффициента двухосности η и номинального напряжения σ . $t = 1000$ ч.

него нагружения имеют примерно равную степень существенного воздействия на характер распределения компонент напряжений в области вершины трещины при ползучести.

Из сопоставления численных результатов, полученных МКЭ, с аналитическими данными по модели ХРР следует, что только в одном частном случае равнодвухосного растяжения подобные результаты близки между собой. Этот факт указывает на четкие ограничения применения одночленного решения ХРР при интерпретации результатов, относящихся к многоосному нагружению и на необходимость постановки подобных исследований в деформационной трактовке, которая является особенно актуальной для ползучести.

Литература

1. Голованов А.И., Кузнецов С.А.: Модели механики сплошной среды. Тр. мат. центра им. Н.И. Лобачевского, с. 5–27. Казань: КГУ 2002.
2. Eftis J., Subramonian N.: The Engng. Fract. Mech. **10**, 43–67 (1978)
3. Hutchinson J.W.: J. Mech. Phys. Solids **16**, 13–31 (1968)
4. Rice J.R., Rosengren G.F.: J. Mech. Phys. Solids **16**, 1–12 (1968)
5. Riedel H., Rice J.R.: ASTM STP **700**, 112–130 (1980)
6. Li F.Z., Needleman A., Shih C.F.: Int. J. Fracture **36**, 163–186 (1988)
7. Hutchinson J.W.: Acta metal. **31**, 1079–1088 (1983)
8. ANSYS Structural Analysis Guide. 001245. Fifth Edition. SAS IP, Inc., 1999.
9. ANSYS Theory Reference. 001242. Eleventh Edition. SAS IP, Inc., 1999.
10. Шлянников В.Н., Бойченко Н.В., Ильченко Б.В.: Изв. ВУЗов. Проблемы энергетики № 11/12, 135–149 (2003)

АСПИРАНТЫ И МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ

Аспирантура

В 2003 году аспирантуру закончили 5 человек:

1. Калинин Александр Александрович
(с представлением кандидатской диссертации)
2. Мурсалимов Ленар Рустемович
3. Яковлева Наталья Михайловна
4. Нурутдинов Рустем Маратович
5. Лапаев Дмитрий Викторович

В 2003 году в аспирантуру поступили 8 человек:

1. Арсланов Наркис Мусавирович
01.04.05 “Оптика”,
руководитель Моисеев С.А.
2. Денисов Алексей Игоревич
01.04.02 “Теоретическая физика”,
руководитель Тейтельбаум Г.Б.
3. Ириняков Евгений Николаевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель Фалин М.Л.
4. Карягина Ирина Валерьевна
01.04.17 “Химическая физика, в т.ч.
физика горения и взрыва”,
руководитель Салихов К.М.
5. Курбатов Борис Александрович
01.04.07 “Физика конденсированного состояния”,
руководитель Салихов К.М.
6. Рязанов Игорь Владимирович
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель Тарасов В.Ф.
7. Фаттахов Максим Зиннурович
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель Гарифуллин И.А.
8. Хабибуллин Николай Жавдатович
01.04.07 “Физика конденсированного состояния”,
руководитель Фаттахов Я.В.

На 1.12.03 число аспирантов института с очной формой обучения составило 23 человека (аспирантов заочного обучения нет).

Премии и награждения

- Бородин П.А. стал лауреатом стипендии КФТИ им. Н. С. Гарифьянова для аспирантов 2003 года.
- Петрушкин С.В. награжден поощрительной премией им. Е. К. Завойского, учрежденной администрацией г. Казани для молодых ученых и специалистов за достижения в экспериментальной, теоретической физике и её применениях.
- Никифоров В.Г. стал победителем конкурса по программам поддержки студентов, аспирантов и молодых ученых, проведенного фондом “Династия” в 2003 году при содействии Международного центра фундаментальной физики в Москве.
- Можанова А.А. награждена грамотой победителя III научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета “Материалы и технологии XXI века”.

Гранты

Победители конкурса научных проектов молодых ученых РАН по фундаментальным и прикладным исследованиям

1. Гайнутдинова Т.Х., к.б.н.: Исследование мембранных механизмов долговременных модификаций поведения у виноградной улитки (№ 289)
2. Еремина Р.М., к.ф.-м.н.: Медно-кислородные кластеры переменной валентности в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ (№ 21)
3. Попов Е.А., к.ф.-м.н.: Ядерная суперфлуоресценция в $^{178\text{m}_2}\text{Hf}$ при распространении гамма-импульса в гамма-оптической среде произвольной плотности (№ 277)

Гранты РФФИ для молодых ученых, аспирантов и студентов

1. Алимбекова А.Ш. (№ 03-02-06499): Фундаментальные проблемы оптической фазовой памяти и коге-

рентные эффекты, основанные на интерференции квантовых состояний

2. Баталов Р.И. (№ 03-02-06394): Структурно-фазовые переходы в полупроводниках в сильно неравновесных условиях воздействия мощными импульсами ионизирующего излучения
3. Гайнутдинова Т.Х. (№ 03-04-06581): Исследование ионных механизмов долговременной сенситизации и ассоциативного обучения у виноградной улитки
4. Герасимов К.И. (№ 03-02-06418): Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в диэлектрических кристаллах
5. Латыпов В.А. (№ 03-02-06419): Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в диэлектрических кристаллах
6. Носков М.И. (№ 03-03-06595): Квантовая когерентность в молекулярной динамике сверхбыстрых фотохимических процессов
7. Петрушкин С.В. (№ 03-02-06498): Фундаментальные проблемы оптической фазовой памяти и когерентные эффекты, основанные на интерференции квантовых состояний
8. Тихонов Д.А. (№ 03-02-06319): Исследование возможности создания спинового клапана на основе мультислоев сверхпроводник/ферромагнетик

Победители конкурса для молодых ученых и аспирантов "Гранты КФТИ"

1. Коновалов А.А.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия кристалла $\text{LaGaO}_3:\text{Mn}^{3+}$
2. Муранова Л.Н., Исмаилова А.И.: Количественное определение оксида азота в органах крыс методом ЭПР спектроскопии
3. Захаров М.В.: Исследования in-situ процессов рекристаллизации и плавления на поверхности имплантированного кремния при облучении импульсами света различной длительности
4. Можанова А.А.: Изучение межмолекулярного взаимодействия на поверхности с помощью сканирующей силовой спектроскопии

Индивидуальные гранты CRDF REC-007 по программе "Фундаментальные исследования и высшее образование" (BRHE) на 2003–2005 гг.

1. Еремина Р.М., к.ф.-м.н.: Исследование магнитных свойств низкоразмерных соединений переходных металлов методом ЭПР
2. Петрушкин С.В., к.ф.-м.н.: Радиационнобалансированный лазер и лазерное охлаждение твердотельных носителей информации оптических эхо-процессоров

Участие сотрудников института в гранте НОЦ КГУ CRDF BRHE REC-007

1. Баталов Р.И.: Формирование микро- и наноразмерных структур на основе кремния, излучающих в области 1.5 мкм
2. Житейцев Е.Р.: Механизмы образования, молекулярные структуры и свойства кластеров ян-теллеровских примесных ионов группы железа в кристаллах структурного типа флюорита
3. Захаров М.В.: Применение оригинальной дифракционной методики в исследованиях динамики структурных дефектов имплантированного кремния при импульсном фотонном облучении
4. Коновалов А.А.: Изучение парамагнитных центров Mn^{3+} в кристаллах LaGaO_3 методом высокочастотной ЭПР спектроскопии
5. Никифоров В.Г.: Исследование кластеров в органических жидкостях методами фемтосекундной спектроскопии
6. Носков М.И.: Разработка методов фемтосекундной квантовой и ближнеполевой спектроскопии молекул и техники квантовой памяти на основе эффекта фотонного эха в газовых средах
7. Нургазизов Н.И.: Разработка методики по изучению межмолекулярного взаимодействия при помощи атомно-силового микроскопа
8. Садыков М.Ф.: Разработка новых методов исследования диэлектрических свойств материалов с высокой проводимостью
9. Туранов А.Н.: Исследование жидкокристаллических магнитоэлектриков

Юрий Васильевич Яблоков. К 70-летию со дня рождения

10 сентября 2003 года исполнилось 70 лет со дня рождения профессора, доктора физико-математических наук Юрия Васильевича Яблокова.

Юрий Васильевич в 1956 г. с отличием окончил физико-математический факультет Казанского государственного университета. С 1956 по 1959 гг. учился в аспирантуре Физико-технического института КФАН СССР. С 1959 по 1964 гг. работал младшим научным сотрудником лаборатории магнитной спектроскопии КФТИ КФАН СССР. В 1964 г. защитил кандидатскую диссертацию. С 1964 по 1968 гг. был ученым секретарем института, а с 1968 по 1978 гг. – старшим научным сотрудником. В 1978 году избран заведующим сектором ЭПР твердого тела КФТИ КФАН СССР, с 1979 года – заведующим лабораторией ЭПР твердого тела. С 1993 по 2000 гг. – главный научный сотрудник лаборатории молекулярной радиоспектроскопии.

С 1961 г. Юрий Васильевич начал изучение димеров двухвалентной меди, синтезируемых в лаборатории А. В. Аблова в Кишиневе и В. В. Зеленцова в МФТИ. Разработка методов расшифровки спектров ЭПР магнитных центров со спином $S = 1$ в порошкообразных образцах, эксперименты с разнообразными карбоксилатами меди (производные ацетата, бензоаты, бикарбоксилаты, комплексы со смешанными лигандами) и другими двухядерными соединениями были направлены на изучение зависимости обменных взаимодействий от характера химических связей в мостиковых фрагментах. Были обнаружены и изучены мигрирующие триплетные возбуждения – триплетные экситоны – в неорганических полимерных цепочках, построенных из слабосвязанных димеров. Следующим шагом было изучение трехядерных обменных кластеров Cr^{3+} и Fe^{3+} . Выяснение природы расщепления двух нижних спиновых дублетов, роли промежуточного спина в свойствах нижнего спинового дублета троек разноименных ионов $\text{M}'\text{M}_2$, установление критического влияния на спектр ЭПР ничтожно малых деформаций триад – эти результаты позволили понять данные о магнитной вос-



Юрий Васильевич Яблоков

приимчивости и теплоемкости симметричных троек, не нашедшие до этого времени объяснения в литературе. Итогом многолетних исследований, посвященных развитию возможностей метода электронного парамагнитного резонанса для изучения обменных эффектов в двух- и трехядерных кластерах, явилась докторская диссертация, которую Юрий Васильевич защитил в 1974 году. В 1981 г. ему присвоено ученое звание профессора.

Начиная с 70-х годов, Ю. В. Яблоков со своими учениками занимается соединениями с вырожденными (псевдовырожденными) орбитальными состояниями, совокупность свойств которых называют эффектом Яна-Теллера. Интерес к этим соединениям продолжается до сих пор. Экспериментальные спектры ЭПР ян-теллеровских комплексов, подверженных влиянию слабых возмущений (решеточные деформации за счет понижения симметрии, деформации при фазовых переходах, кооперативные взаимодействия), составили основу современных представлений в соответствующих разделах учения об эффекте Яна-Теллера. Яблоковым Ю.В. и его

сотрудниками было убедительно доказано, что ЭПР позволяет исследовать процесс формирования кооперативных взаимодействий в магнитных материалах, если выстроить цепочку исследований по схеме: изолированные центры – обменно связанные пары – системы с кооперативными свойствами. В рамках этой концепции, была показана возможность моделирования магнитной и кристаллической структуры квазиодномерных магнетиков на примере CsCoCl_3 и CsCuCl_3 , установлена доминирующая роль локального эффекта Яна-Теллера в формировании структурного и магнитного упорядочения K_2CuF_4 и $\text{Cs}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cu}_x(\text{ZrF}_6)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Проводимые в лаборатории исследования вибронных взаимодействий в комплексах Cu^{2+} и низкоспинового Ni^{3+} сделали ее одним из ведущих экспериментальных центров в стране по изучению эффекта Яна-Теллера методом ЭПР. Исследование особенностей эффекта Яна-Теллера в октаэдрических комплексах Cu^{2+} при наличии низкосимметричных искажений, обнаружение и изучение явления близких и далеких корреляций ян-теллеровских комплексов, обнаружение и исследование эффектов электрон-фононного взаимодействия низкоспинового Ni^{3+} в оксидных керамиках – эти оригинальные результаты несомненно способствуют пониманию проблемы электронно-колебательных эффектов в целом.

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости и напряженная работа ученых всего мира по выяснению природы этого явления также нашли отражение в тематике лаборатории. Поскольку в самих сверхпроводящих керамиках ЭПР не наблюдается, было предложено исследовать структурные аналоги высокотемпературных сверхпроводников, допускающие любую степень диамагнитного разбавления. Изучение этих модельных систем позволило обнаружить явление ранней кластеризации в керамиках $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_4$ ($\text{Me} = \text{Cu}^{2+}, \text{Ni}^{3+}, \text{Cr}^{3+}$), приводящее к их микрофазовому расслоению; предложить модель ян-теллеровских дырочных центров CuO_6^- и магнитных ян-теллеровских поляронов в $\text{LaSrAl}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_4$ и доказать целесообразность подобных исследований для моделирования свойств сверхпроводящих купратов. Полученные результаты четыре раза отмечались в числе важнейших по Академии наук.

Яблоков Ю.В. – известный ученый в области радиоспектроскопии твердого тела, получивший признание в нашей стране и за рубежом. Он опубликовал свыше 200 научных работ в центральных отечественных и зарубежных журналах, монографию “Парамагнитный резонанс обменных кластеров” (совместно с В. К. Воронковой и Л. В. Мосиной), выступал с приглашенными пленарными докладами на многих международных конференциях, подготовил 12 кандидатов наук, двое из них стали докторами наук. Яблоков Ю.В. являлся членом Научного совета АН СССР по проблеме “Радиоспектроскопия конденсированных сред” и специализированного совета по присуждению ученых степеней по физике магнитных явлений Казанского государственного университета.

За успешную научную и общественную работу Яблоков Ю.В. награжден орденом “Знак почета” и медалью “За доблестный труд”. Научные исследования Ю. В. Яблокова, проводимые им с 1956 года, внесли заметный вклад в развитие тематики института. Юрий Васильевич по праву является хранителем истории и традиций института. Им опубликованы очерки о научной и педагогической деятельности Е. К. Завойского, Б. М. Козырева и, в соавторстве с Б. И. Кочелаевым, книга “The Beginning of Paramagnetic Resonance”, изданная в издательстве World Scientific (Singapore-London-New York).

В настоящее время Юрий Васильевич работает в Институте молекулярной физики Польской АН (г. Познань). Круг его научных интересов по-прежнему широк, он полон энергии и творческих замыслов. Его научные работы демонстрируют уникальные возможности метода ЭПР для решения актуальных вопросов физики твердого тела. В молекулярном кристалле $\text{Cs}_2\text{Cu}(\text{ZrF}_6)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, испытывающем ферроэластический фазовый переход, обнаружено явление пластичности координационной сферы ян-теллеровского комплекса, выражающееся в изменениях направлений главных ян-теллеровских деформаций под воздействием температуры и давления. В последние годы начаты исследования спиновых переходов в соединениях класса тиосемикарбазонатов Fe^{3+} . Уже первые эксперименты показали, что процесс перехода высокий спин-низкий спин происходит через образование доменов низкосимметричной фазы. Изучение процессов создания и разрушения доменов в опытах с изменением температуры и давления позволяет количественно анализировать эффекты близко- и дальнедействующих корреляций между ионами в определенном спиновом состоянии.

Коллеги, ученики и друзья желают Юрию Васильевичу хорошего здоровья и дальнейших творческих успехов.

*И. В. Овчинников,
Т. А. Иванова*

Нияз Рахметьянович Яфаев. К 70-летию со дня рождения

4 февраля 2003 года исполнилось 70 лет старшему научному сотруднику, кандидату физико-математических наук Ниязу Рахметьяновичу Яфаеву, который в течение 20 лет – с мая 1968 г. по сентябрь 1988 г. – был ученым секретарем Казанского физико-технического института.

Нияз Рахметьянович закончил с серебряной медалью знаменитую школу № 19 им. В. Г. Белинского в Казани, выпускники которой прославились своими достижениями в науке и культуре. В 1951 г. он поступил на физико-математический факультет КГУ и закончил его с отличием в 1956 году. Работать начал еще студентом пятого курса – преподавал физику в средней школе № 80. Затем, после окончания университета, Нияз Рахметьянович Яфаев недолго работал в Казанском сельскохозяйственном институте и в Казанском государственном университете. В 1957 г. он начал работать в ГИПО. В 1960 г. Нияз Рахметьянович Яфаев был направлен в Ленинград в аспирантуру при Государственном оптическом институте. В 1961 г., еще находясь в аспирантуре, Н. Р. Яфаев совместно с сотрудниками КФТИ начал исследования стекол методом ЭПР. В течение 1964 года он был прикомандирован в лабораторию Б. М. Козырева для завершения диссертационной работы. В 1965 г. Нияз Рахметьянович завершил работу над диссертацией “Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных металлов в стеклах”, которую защитил в 1966 году.

Еще до официального поступления на работу в КФТИ, им было опубликовано несколько статей в ЖЭТФ и ФТТ в соавторстве с В. М. Винокуровым, М. М. Зариповым, Ю. В. Яблоковым, Н. С. Гарифьяновым. В сентябре 1966 г. Н. Р. Яфаев зачислен младшим научным сотрудником в отдел радиоспектроскопии КФТИ, в мае 1968 г. его избирают ученым секретарем КФТИ. В ноябре 1973 г. он получил ученое звание старший научный сотрудник. С сентября 1988 г. по февраль 1993 г. Н. Р. Яфаев работает старшим научным сотрудником лаборатории ЭПР твердого тела, а затем лаборатории молекулярной радиоспектроскопии, с этой должности он ушел на пенсию в феврале 1994 года.

Н. Р. Яфаевым опубликовано 56 научных работ, из них 29 статей, получено 5 авторских свидетельств на изобретения.

С начала своей научной деятельности Нияз Рахметьянович был связан с исследованием стеклообразных систем. Избрав в качестве инструмента исследований ЭПР, он основные усилия направил на выяснение особенностей структуры стекла, используя в качестве зондов центры, содержащие элементы переходных групп. Выбрав



Нияз Рахметьянович Яфаев

мало исследованные ионы Ti^{3+} , Zr^{3+} , Nb^{3+} , W^{5+} , спектры ЭПР которых наиболее чувствительны к изменениям симметрии ближайшего окружения, он получил результаты, ценные для спектроскопии, магнетизма, теории стеклообразного состояния. Разработанные им представления о неупорядоченности окружения парамагнитных ионов в структурной сетке стекла и о роли парамагнитных ионов как стеклообразователей получили признание научной общности.

После защиты диссертации Нияз Рахметьянович занимался научными исследованиями стеклообразных материалов вместе с более молодыми сотрудниками института. Под его руководством в разное время работали Е. А. Туриянский, В. С. Лобков, А. А. Бухараев. Яфаев Н.Р. был руководителем и соруководителем кандидатских диссертаций, защищенных Л. В. Токаревой, А. А. Бухараевым и А. В. Голенищевым-Кутузовым. Нияз Рахметьянович является одним из инициаторов проведения в КФТИ оптических исследований в твердых телах. Много энергии и сил потратил он на “пробивание”, закупку и запуск оптических спектрометров и другого, необходимого для таких исследований, оборудования.

В 70-е годы он вместе с А. А. Бухараевым исследовал центры окраски и парамагнитные ионы в необычном валентном состоянии (Zn^{+} , Cd^{+}), полученные в стекле с помощью ионизирующего излучения. Одним из интересных результатов было обнаружение в стекле светочувствительных радиационных центров и их использование для записи трехмерных голограмм.

Большое внимание Нияз Рахметьянович уделял научно-организационной работе, тут он был профессионалом самого высокого уровня. Недаром Нияз Рахметьянович занимал должность ученого секретаря КФТИ в течение 20 лет. Его работу отличали высокая организованность, интеллигентность, умение найти общий язык с сотрудниками не только при подготовке планов и отчетов института, но и по широкому кругу вопросов, связанных с деятельностью института.

Особенно следует отметить оптимизм и жизнеутверждающий взгляд Нияза Рахметьяновича на многие проблемы. Его увлечение горнолыжным спортом и вообще спортивный образ жизни помогали раньше и помогают сейчас преодолевать трудности, встречающиеся у него на пути.

Пожелаем Ниязу Рахметьяновичу и в дальнейшем сохранять бодрость духа и хорошую физическую форму.

А. А. Бухарев

Слово об учителе.

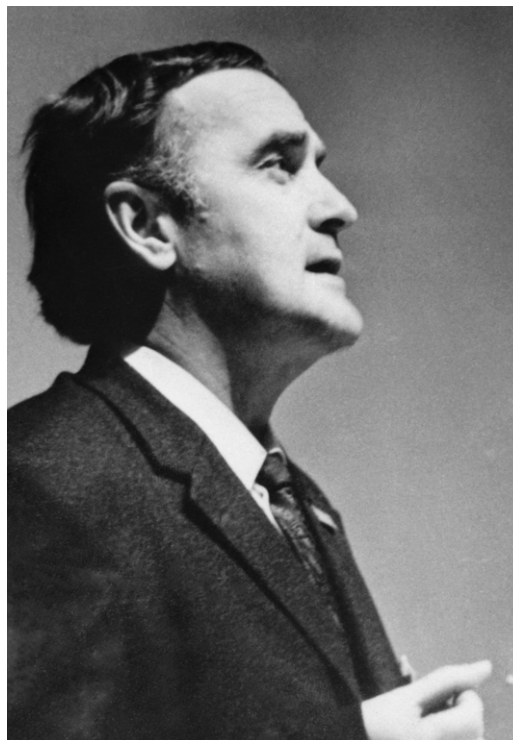
Памяти Уно Германовича Копвиллема

4 октября 2003 года выдающемуся ученому Копвиллему Уно Германовичу исполнилось бы 80 лет. Многие годы он проработал в нашем институте и сделал ряд основополагающих научных работ, наиболее крупными среди которых являются предсказание явления светового эха и принципа действия фоновонного мазера.

Сердце этого замечательного ученого перестало биться 23 сентября 1991 года. Ушел из жизни яркий, интеллигентный человек, всецело посвятивший себя науке. Его работы в областях нелинейной оптики, квантовой акустики, радиоспектроскопии и гравитации признаны во всем мире.

Уно Германович родился 4 октября 1923 года в Таллинне. Там же он учился в школе, где изучил несколько иностранных языков. Увлекался авиамоделизмом, был даже чемпионом Эстонии. В 1941 г. он разделил судьбу многих сограждан Эстонии – всю семью выслали в Кировскую область.

У. Х. Копвиллем начинал трудовую жизнь трактористом. После неоднократных просьб в 1947 году ему разрешили поступить в Кировский пединститут, который он закончил в 1951 году, что дало ему возможность работать учителем физики в школе. Четыре года он просил разрешения поступить в аспирантуру Казанского университета, и ко времени зачисления в нее в 1955 г., по сравнению с другими аспирантами, был достаточно зрелым человеком. Он поражал многих трудолюбием и незаурядными способностями. В 1958 г. он блестяще защитил кандидатскую диссертацию по проблемам маг-



Уно Германович Копвиллем
(4.10.1923–23.09.2003)

нитного резонанса в твердых телах и был приглашен на работу в Казанский физико-технический институт КФАН СССР.

Вскоре Уно Германович стал заведующим сектором теоретической физики этого института, где вокруг молодого и энергичного руководителя постепенно образовался широкий круг соратников и учеников. Область научных интересов этого коллектива определила тематику будущего отдела квантовой акустики, созданного благодаря поддержке директора института, известного

советского ученого Х. М. Муштари. В то же время Копвиллем находился под влиянием открытия лазерной генерации и перспектив ее приложений. Именно в начале шестидесятых годов, он вместе с В. Д. Корепановым предсказал и научно обосновал возможность создания фононного мазера. В те годы он разработал физические принципы акустического сверхизлучения. В 1962 году У. Х. Копвиллем вместе со своим учеником В. Р. Нагибаровым сделал еще одно открытие – предсказал световое (фотонное) эхо, которое через год и было обнаружено американскими исследователями Н. Кёнитом, А. Абеллой и С. Хартманом. В настоящее время это открытие дало начало двум мощным направлениям в нелинейной оптике: оптической эхо-спектроскопии и резонансной информатике. А в те далекие шестидесятые годы неистовый У. Х. Копвиллем со своими учениками активно работал над физикой других когерентных явлений, и, прежде всего, – оптического сверхизлучения. Я помню научные семинары отдела того периода. Какая творческая атмосфера царила на них! Как росла на них молодежь! Работы Уно Хермановича начинали получать мировое признание, он стал приглашаться для чтения лекций за рубежом, но из-за своего “буржуазного” происхождения не мог этими приглашениями воспользоваться. Но он не унывал, а продолжал активно работать в различных областях физики и, в частности, – в гравитации, где получал поддержку от самого А. З. Петрова – выдающегося ученого, автора классификации пространств Эйнштейна.

В общем, это было счастливое время творчества! Как он радовался жизни в туристических походах в различные уголки Татарии и Марийской республики, как хороши были встречи Нового года в лесу всем отделом, душой которых был Уно Херманович! Последний раз такая поездка в лес, в любимую им Айшу, состоялась в октябре 1973 года, где весь отдел поздравил его с пятидесятилетием.

А затем он с группой соратников уехал в Прибалтику, в Калининград, где несколько лет в университете занимался физическими методами исследования морей и океанов. Но заниматься наукой в вузе в той мере, как он это привык делать в Казанском физтехе, было трудно, и он вновь вернулся в систему Академии наук, но уже во Владивостоке, где начал работать в институте океанологии ДВНЦ АН СССР.

Около пятнадцати лет он заведовал отделом, занимающимся физическими процессами в океане и методами их исследования. Там он тоже воспитал много талантливых учеников, написал две известные монографии и уже не раз побывал за рубежом, но всегда с душевной теплотой вспоминал Казань. Его звездным часом был выход в США в 1976 году книги Дж. Д. Макомбера “Динамика спектроскопических переходов”, где отражены его заслуги в науке.

Нелегкая судьба досталась этому сильному и волевому человеку. Часто она была к нему неблагоприятна. Но он вновь возрождался и вновь посвящал себя творческому поиску, давая пример мужества молодым. И, мне кажется, он был счастлив в этой борьбе.

Сильным, волевым, порядочным и добрым человеком он остался в памяти своих учеников и многих, кто его знал.

В. В. Самарцев

Памяти

Александра Рахмиэлевича Кесселя

23 июня 2003 г. на 67 году оборвалась жизнь выдающегося физика, профессора, заслуженного деятеля науки РФ, заведующего лабораторией резонансных явлений КФТИ КазНЦ РАН и просто чуткого, отзывчивого, талантливое человека Александра Рахмиэлевича Кесселя.

А. Р. Кессель пришел в КФТИ в 1958 году после окончания физико-математического факультета Казанского государственного университета, где он проходил специализацию по теоретической физике и был учеником С. А. Альтшулера. Вся его дальнейшая жизнь была связана с институтом, где он прошел путь от аспиранта до заведующего крупной лабораторией.

Можно отметить основные результаты, полученные Александром Рахмиэлевичем в первоначальный период его работы:

- Предсказаны переходные процессы нового типа в спин-системах (электрическая дипольная и квадрупольная индукция и эхо от парамагнитных ионов, индуцированное звуком спиновое эхо ядер в ионных кристаллах и антиферромагнетиках, селективная спиновая прозрачность металлов для сигналов индукции и эха электронов проводимости) большинство из которых обнаружено в экспериментальных лабораториях КФТИ и за рубежом.
- Высказана идея о существовании квантования спинов в поле сильной акустической волны (обнаружено в КФТИ) и рабочих степеней свободы квантового генератора в электромагнитном поле генерации. Обнаружено электроакустическое эхо в пьезоэлектрических материалах и установлена его природа. Получен диплом на открытие № 220 совместно с И. А. Сафинным, проводившим эксперимент, а также с Н. Н. Крайником и С. Н. Поповым из Петербургского ФТИ АН.

Этот этап деятельности завершился написанием монографии “Акустический резонанс”, впоследствии переведенной на немецкий язык.

Следующий этап научной деятельности А. Р. Кесселя связан с развитием теории кинетических процессов в спин-системах с обменным взаимодействием, допускающим строгое квантово-статистическое описание. Совместно со своими сотрудниками М. П. Желифоновым, Р. З. Бариевым, Г. О. Беримом, Александр Рахмиэлевич изучал неравновесные свойства магнетиков с изинговским обменным взаимодействием. Вещества с сильным обменным взаимодействием широко распространены в природе и интенсивно изучаются как экспериментально, так и теоретически. В описании спиновых систем с сильным обменным взаимодействием достигнут значительный



Александр Рахмиэлевич Кессель
(20.11.1935–23.06.2003)

прогресс, обусловленный успешной “моделизацией” задач такого рода. Одной из таких хорошо разработанных многочастичных моделей является модель Изинга. Гамильтонианы многих задач из различных областей естествознания оказывается возможным сформулировать в виде гамильтонианов обобщенной модели Изинга. Двухмерная модель Изинга является одной из немногих нетривиальных моделей статистической механики, допускающей точное аналитическое описание фазового перехода в равновесном случае.

Значительно более сложные проблемы возникают при попытке описать неравновесное поведение многочастичных моделей. Трудности связаны как с выводом линейных уравнений, описывающих временную эволюцию физических параметров, так и с их решением. В связи с этим, изучение неравновесных свойств модели Изинга представляет особый интерес, поскольку в рамках этой модели удастся преодолеть многие из принципиальных трудностей теории. А. Р. Кессель и Г. О. Берим являются авторами книги “Магнитный резонанс изинговских магнетиков”, в которой развита точная теория магнитного резонанса магнетиков такого типа, найдены резонансные частоты и точные выражения для интегральных интенсивностей и параметров формы резонансных линий через корреляционные функции модели. Методом неравновесного статистического оператора точно получены замкнутые кинетические уравнения. На основании этих точных результатов дано аналитическое подтверждение двух

известных гипотез статистической механики – о существовании спиновой температуры и сокращенного статистического описания.

Оригинальность постановки задачи и выбора их решения, умение разрабатывать методы решений, переключаться на отдаленные для себя научные проблемы и математическое их моделирование – черты научного почерка А. Р. Кесселя. Характерный пример – успешная работа по тематике совместно с отделом энергетики КазНЦ РАН. Идеи, заложенные в основу модели Изинга, используются для рассмотрения процессов эволюции свойств нефтяных пластов в процессе фильтрации. А. Р. Кессель предложил динамическую модель вытеснения нефти из пласта. Дано квазиквантовомеханическое описание перкаляционной решетки посредством введения функции состояния и гамильтониана, отображающих процесс замещения нефти водой. В результате были изучены общие черты такой эволюции и с помощью экспериментов на ЭВМ определены корреляционные длины, число и размер кластеров запертой нефти, фрактальная размерность водного кластера и т.д. Еще одной проблемой, успешно решенной в рамках стохастического подхода, явилось создание модели фильтрации нефтяных пластов, основанной на теории перкаляции и физики фракталов. Эта серия работ была поддержана государственной программой РФ “Недра России”.

Особой чертой А. Р. Кесселя была способность объединять вокруг себя молодых, активно работающих сотрудников. Все начинания и идеи учеников всегда им поддерживались и оказывалась всяческая помощь в их реализации. В 1975 году был организован сектор теоретической физики, который дал институту четырех докторов наук, ставших впоследствии самостоятельными способными руководителями лабораторий.

В девяностые годы Александром Рахмизлевым совместно с сотрудниками было обращено внимание на то обстоятельство, что оптические двухуровневые системы (ДУС) можно описывать с помощью формализма спинов и, следовательно, попытаться приложить к оптическим системам накопленный багаж изучения кинетических спиновых процессов. Получен гамильтониан косвенного электрического дипольного взаимодействия ДУС. Если при выводе оператора косвенного взаимодействия в качестве гамильтониана взаимодействия двух подсистем взят оператор электрического квадрупольного взаимодействия с полем излучения, то косвенное взаимодействие псевдоспинов двухуровневой оптической системы через электромагнитное поле содержит члены типа изинговского обменного взаимодействия. Следует ожидать, что парное взаимодействие ДУС проявится в виде неоднородной ширины оптического перехода и в кинетике неравновесных оптических процессов. Методом, заимствованным из магнитного резонанса, но являющимся достаточно общим, были выведены на основе нового гамильтониана кинетические уравнения для оптических систем.

В последние годы А. Р. Кессель работал в области квантовой информатики. Он понимал, что, благодаря сочетанию развитой теории и изощренной техники эксперимента, существует возможность реализовывать простейшие квантовые алгоритмы на серийно выпускаемых спектрометрах ЯМР. Его поиск был направлен на создание новых принципов кодирования и обработки информации для квантового компьютера. Совместно с В. Л. Ермаковым, им был предложен формализм виртуальных спинов и показана возможность применения многоуровневых квантовых систем с дискретным неэквидистантным спектром для физической реализации набора квантовых вентилях, необходимого для построения произвольного алгоритма для квантового компьютера. Было показано, что такой набор вентилях, включая двухкубитные, можно построить на ядре со спином $3/2$.

Другой предложенный им подход состоит в том, чтобы сопоставить кубитам квантовой информатики, основанной на ЯМР, не состояния отдельных спинов, а их коллективные состояния с учетом взаимодействия между ними. Такой подход позволяет ввести устойчивый вычислительный базис в ЯМР твердого тела и на его основе – универсальный набор логических вентилях. Рассмотрен эффект фотонного эха от одного фотона для изучения парадоксов квантовой механики и новая среда для функционирования квантового компьютера.

Александр Рахмизлевич является ярким примером самоотверженной и эффективной жизни в науке. За успешную научно-педагогическую работу и вклад в науку Кесселю А.Р. была присуждена медаль им. П. Л. Капицы Российской Академии наук, и он был избран академиком РАН.

Александр Рахмизлевич пользовался заслуженным авторитетом среди сотрудников института. Он был избран членом Президиума КазНЦ РАН и членом Научного совета “Физика твердого тела” при Президиуме РАН.

А. Р. Кессель был высокообразованным человеком с широкой эрудицией и глубоким пониманием литературы, живописи, музыки. Посещение музыкальных концертов, литературных вечеров и выставок живописи составляло важную часть его образа жизни: на встречах с друзьями особенно ярко раскрывалось его поэтическое дарование, свойственное ему чувство юмора и просто любовь к жизни во всех её проявлениях.

Он оставался верным своим научным и жизненным принципам до конца своих дней.

*И. С. Донская,
И. В. Овчинников*

* * *

* * *

В августе 2003 года в Казани состоялась международная конференция “Новая геометрия природы”. Одним из организаторов этой конференции был А. Р. Кессель. По его инициативе в программу конференции была включена секция “Квантовые компьютеры”. Но ему не суждено было увидеть свое детище, заседание секции прошло уже без него. Это заседание было посвящено памяти проф. А. Р. Кесселя. Председатель секции проф. Бинг Фунг (США) открыл заседание словами большого уважения к памяти А. Р. Кесселя, он дал высокую оценку научным результатам А. Р. Кесселя в области квантовой информатики. О вкладе Александра Рахмиевича в науку рассказали его коллеги и ученики. В докладе “Профессор Александр Кессель – ученый и мыслитель” И. С. Донская представила всю панораму научной деятельности А. Р. Кесселя. К. М. Салихов в докладе “Подход Кесселя к квантовому исчислению” кратко изложил основную идею Александра Рахмиевича – многоуровневость вместо многочастичности при построении квантового компьютера. Аспирантка А. Р. Кесселя Н. Яковлева рассказала об одной из последних его идей в докладе “Элементы квантовой информатики в модели с равными спин-спиновыми взаимодействиями”.

Тихо, когда умру!

Гарсиа Лорка

Сыграй мне на бис, маэстро,
О жизни моей сыграй,
Пускай замолчал оркестр,
Ты скрипку не убирай.

Сыграй что-нибудь из Баха,
О смерти и о любви,
Уже мы не знаем страха,
Раз столько всего позади.

Пускай это будет “Чакона”,
И пусть нам поведает Бах,
Что нам суждено исконно
И что обернулось в прах.

Мы оба – профессионалы,
В делах не кривили душой,
Вот женщин любили немало,
Но это – грех небольшой.

Стыдиться тут нет причины,
Любовь так свойственна людям...
Всевышний, он тоже мужчина,
Поймет нас и не осудит.

Но что там за тема бегло
Мелькнула как тень в окне?
Allegro, allegro, allegro...
Нет, это не обо мне.

Опять наступает рьяно
Затмением на фоне дня.
Piano, piano, piano...
Вот это теперь про меня...

А. Р. Кессель
март–апрель 2002

Памяти

Ильдара Гумеровича Бикчантаева

6 ноября 2003 года на пятьдесят седьмом году скоропостижно оборвалась жизнь старшего научного сотрудника нашего института, кандидата физико-математических наук, лауреата Государственной премии Республики Татарстан Ильдара Гумеровича Бикчантаева.

Ильдар Бикчантаев в 1970 году с отличием закончил физический факультет Казанского государственного университета. Выбрав в студенческие годы радиоспектроскопию в качестве своей специальности, Ильдар Бикчантаев остался верен этому выбору всю жизнь. После окончания университета в 1970 году он поступает на работу в Казанский физико-технический институт Академии наук СССР на должность младшего научного сотрудника. Первые годы он работает под руководством профессора А. И. Ривкинды, исследуя методом ЭПР биологические объекты, облучаемые рентгеновскими лучами. После смерти руководителя в 1973 году Ильдар Гумерович приступает к изучению диамагнитных жидких кристаллов, используя в качестве спиновых зондов парамагнитные комплексы и в 1977 году успешно защищает диссертацию на тему “ЭПР комплексов меди, ванадила и хрома в жидких кристаллах”. Начиная с 1982 года, он активно начинает исследовать новый класс металлосодержащих жидких кристаллов на основе парамагнитных комплексов. При работе над этой темой полностью раскрылся талант Ильдара Бикчантаева как высококлассного, вдумчивого экспериментатора, способного осуществлять и теоретические расчеты. Он мог с одинаковой легкостью предложить оригинальную методику, сконструировать приставку для ориентирования жидкокристаллических объектов в магнитном поле, участвовать в разработке теории формы линии ЭПР для частично-упорядоченных систем. Высокий профессионализм, “железная” логика, отточенность и обдуманность каждой фразы всегда отличали его статьи. Ильдари Бикчантаевым впервые была начата разработка оригинальной методики ЭПР исследования парамагнитных металлomezоенов в тонких ячейках. В результате была предложена расширенная структурная классификация парамагнитных смектиков и обнаружена новая низкосимметричная фаза. Весьма интересными оказались работы по корреляции данных ЭПР и магнитной анизотропии мезогенных комплексов меди и исследования Ильдара Бикчантаева в Техническом университете г. Дармштадта по изучению магнитных свойств жидких кристаллов на основе редкоземельных соединений. Дважды его приглашали работать в лабораторию “Диэлектрики и магнетизм” в Варшавский университет, где он проводил совместные исследования с польскими коллегами. Его работа, выполненная в Варшавском уни-



Ильдар Гумерович Бикчантаев
(30.09.1946–6.11.2003)

верситете, по идентификации методом ЭПР гексатической смектической мезофазы, по праву могла бы войти в любой учебник по ЭПР благодаря своей наглядности и простоте реализации идеи. Очень удачным оказалось его предложение: использовать мезогенный комплекс гадолиния в качестве зонда для исследования особенностей свойств лантаноид-содержащих жидких кристаллов непосредственно в мезофазе. К сожалению, для полной реализации этой идеи Ильдари Гумеровичу не хватило времени.

В памяти всех, кто знал Ильдара Бикчантаева, он останется первоклассным спектроскопистом, первым исследователем парамагнитных металлomezоенов, принципиальным человеком и интересным собеседником, имеющим по всем вопросам свое оригинальное суждение, прекрасным семьянином. Очень жаль, что жизнь Ильдара так рано и неожиданно оборвалась, не дав возможности до конца проявиться всей многогранности его таланта.

*И. В. Овчинников,
Н. Е. Домрачева*

НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ

О работе Ученого совета

В 2003 году было проведено 38 заседаний Ученого совета КФТИ, на которых в соответствии с Уставом института обсуждались научно-организационные и научные вопросы. Если говорить о том, что отличало работу Ученого совета в 2003 году от работы в предыдущие года, то прежде всего надо отметить, что, поскольку 2003 год был первым годом подготовки планов научных исследований на конкурсной основе, Ученый совет активно обсуждал как принципы подготовки планов, так и предложения по формированию плана института на 2004 год.

Кроме того, в 2003 году Ученый совет дважды рассматривал вопрос о реорганизации лабораторий.

На заседании 5 февраля К. М. Салихов выступил с предложением о реорганизации лаборатории радиационной физики в отдел и об организации новых лабораторий в составе этого отдела. Учитывая, что лаборатория РФ в последние годы интенсивно развивалась, появилась новая тематика, новые доктора наук, Ученый совет единогласно поддержал это предложение и постановил создать на базе лаборатории радиационной физики отдел радиационных воздействий на материалы в составе лаборатории радиационной физики (ЛРФ), лаборатории радиационной химии и радиобиологии (ЛРХБ) и лаборатории интенсивных радиационных воздействий (ЛИРВ). Отдел возглавил член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин, он же остался заведующим лаборатории радиационной физики. Заведующими двух вновь созданных лабораторий были избраны д.ф.-м.н. В. Ю. Петухов и д.ф.-м.н. Р. М. Баязитов.

Вторая реорганизация связана с печальным событием – летом 2003 г. скоропостижно скончался Александр Рахмиэлевич Кессель, заместитель председателя Ученого совета, заведующий лаборатории резонансных явлений. В октябре 2003 г. Ученый совет принял решение организовать на основе лаборатории резонансных явлений лабораторию магнитоакустики и лабораторию радиоспектроскопии диэлектриков. Исполняющими обязанности заведующих этих лабораторий были назначены д.ф.-м.н. В. Ф. Тарасов и д.ф.-м.н. М. М. Шакирзянов. Новым заместителем председателя Ученого совета был избран проф., д.ф.-м.н. И. В. Овчинников.

В соответствии с установленным порядком были проведены заседания по обсуждению и утверждению отчетов о работе лабораторий, ежеквартальных отчетов дирекции о финансовой деятельности института, вопросов обеспечения научных исследований, работы научно-вспомогательных подразделений и т.д.

Как и в предыдущие годы, одно из заседаний было посвящено конкурсу на именные стипендии. В 2003 году была присуждена только одна именная стипендия, и лауреатом стипендии имени Н. С. Гарифьянова стал П. Бородин. Ученый совет рассматривал также вопрос о присуждении грантов института для молодых ученых на конкурсной основе.

Ученый совет представил старшего научного сотрудника Б. П. Водопьянова к присвоению звания “доцент по специальности”, которое было ему в том же году присвоено решением ВАКа. Сотрудники Р. М. Еремина, Б. З. Рамеев и Е. П. Жеглов были выдвинуты на должности старших научных сотрудников, Х. Г. Богданова – на должность главного научного сотрудника. Ученый совет выдвинул кандидатуры В. Ф. Тарасова и В. Ю. Петухова на присвоение почетного звания “Заслуженный деятель науки Республики Татарстан”, а также поддержал кандидатуры, выдвинутые другими Учеными советами на присвоение почетных званий РТ и РФ.

По решению Ученого совета к награждению Почетными грамотами РАН представлены Л. В. Воронова, В. А. Зуйков и М. М. Шакирзянов.

На заседаниях, посвященных научным вопросам, кроме докладов сотрудников по статьям, подготовленным к опубликованию, было доложено шесть кандидатских диссертаций, представленных к защите.

Бюро ОФН РАН поддержало ходатайство Ученого совета об открытии аспирантуры по новой специальности и Решением от 1 октября 2003 года в КФТИ КазНЦ РАН была открыта аспирантура по специальности “биофизика”.

*В. К. Воронкова
ученый секретарь*

Развитие материально-технической базы института

В 2003 году продолжалось развитие материально-технической базы института. Среди наиболее значительных приобретений можно выделить следующие:

1. Сканирующий зондовый микроскоп Solver-Bio, изготовленный для института фирмой НТ-МДТ за счет Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (Генеральный директор Фонда И. М. Бортник). Такой микроскоп позволяет исследовать, в частности, свойства биологических объектов в условиях, максимально близких к естественным.

2. На средства, выделенные Президиумом РАН, были приобретены: новый сканер зондового микроскопа Smena (фирма НТ-МДТ), впоследствии дооснащенный магнитом, позволяющим проводить исследования в режиме магнитно-силовой микроскопии в поле до 2500 Э; сканирующий ближнепольный оптический микроскоп SNOM, использующий в качестве зонда заостренный световод, и дополнительное оборудование, позволившее расширить возможности микроскопа Solver-Bio.

3. На средства, выделенные Министерством промышленности, науки и технологий РФ и Президиумом РАН в рамках программы поддержки молодых ученых, а также за счет гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-1905-2003.2 была проведена модернизация фемтосекундного лазерного спектрометра. В частности, были приобретены: лазер на иттрий-алюминиевом гранате YAG LOTIS LS-2136, активный элемент для аргонового лазера ЛГН-512, генератор наносекундных импульсов для ячейки Поккельса. Это позволило уменьшить длительность лазерного импульса в полтора раза и повысить его энергию до 600–650 мкДж вместо 30–40 мкДж. В результате появилась возможность запуска параметрического фемтосекундного генератора с диапазоном перестройки длин волн 550–2500 нм, что существенно расширило возможности спектрометра как по энергетическим, так и по спектральным характеристикам. При существующих в настоящее время выходных параметрах установки, наряду со спектроскопическими исследованиями с временным разрешением в вышеуказанном спектральном диапазоне можно осуществлять силовое воздействие на атомы и молекулы. В поле сфокусированного фемтосекундного импульса с энергией 0.7 мДж и длительностью 100 фс могут быть получены интенсивности 10^{15} – 10^{16} Вт/см².

4. На средства, выделенные Президиумом РАН, был приобретен твердотельный лазер на иттрий-алюминиевом гранате Brilliant b фирмы Quantel (Франция) для использования в качестве системы возбуждения в установке по исследованию спектров ЭПР с разрешением во времени. С целью более эффективного использования лазера были изготовлены новая оптическая система для фокусировки лазерного излучения на исследуемый образец, находящийся в резонаторе спектрометра, и система

регулировки интенсивности лазерного излучения. Это существенно расширило экспериментальные возможности установки по регистрации спектров ЭПР с наносекундным разрешением.

5. На средства, выделенные Президиумом РАН, был приобретен вычислительный кластер АРКО-9А2200, разработанный и изготовленный ПКБ “АРКО” при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере. Кластер предназначен для расчетов электронной структуры и молекулярной динамики сложных систем, а также математического моделирования физико-механических процессов на различных масштабных уровнях. Он позволит численно моделировать физические эксперименты в области спиновой химии, проводить квантово-химические расчеты электронной структуры наноразмерных частиц и твердых тел, численно моделировать спектры ЭПР в сложных системах, рассчитывать структуру намагниченности в микро- и нанопроволоках, моделировать процессы деформирования и разрушения материалов и конструкций высокой сложности, модели которых включают 1000000 и более неизвестных, описывают нелинейные эффекты и т.п. При этом, благодаря возможности использования сложных математических моделей, повышается достоверность получаемой информации и существенно снижаются затраты на экспериментальные исследования.

6. На средства, выделенные по программе Президиума РАН “Квантовая макрофизика”, был приобретен гелий-кадмиевый одномодовый ультрафиолетовый лазер с длиной волны 325 нм с целью создания установки для получения бифотонов в режиме параметрической люминесценции света в нелинейном кристалле йодата лития, вырезанном под углом 58 градусов к оптической оси. Полученные на установке бифотоны будут использованы в качестве триггерных сигналов в планируемых устройствах квантового счета.

7. В рамках выполнения проекта МНТЦ № 2121 закуплено оборудование для создания установки фотонного эха. Установка создана на основе перестраиваемого одночастотного кольцевого непрерывного титан-сапфирового лазера модели TIS-SF-07 отечественного производства (ЗАО “Техноскан”, г. Новосибирск), накачиваемого непрерывным одномодовым аргоновым лазером модели Ar-5.5-150 отечественного производства (Лазерный центр “Инверсия”, г. Новосибирск). Для расширения диапазона перестройки установки фотонного эха предусмотрен внешний удвоитель частоты излучения модели FD-TiSa-950 (Лазерный центр “Инверсия”, г. Новосибирск). Эта установка будет использована для создания самоохлаждающегося оптического эхо-процессора.

*В. Ф. Тарасов
заместитель директора по науке*

Кафедра химической физики

В 2003 году на кафедре обучалось 19 студентов. Студенты кафедры весьма успешно защитили свои магистерскую (Н. М. Арсланов) и дипломные работы (Е. Ю. Бородинова, И. В. Карягина, И. В. Рязанов, А. А. Шмыров). Все они получили отличные оценки государственной экзаменационной комиссии физфака КГУ.

Можно отметить и другие достижения студентов и выпускников кафедры в 2003 году:

- Выпускник кафедры Р. Т. Галеев защитил кандидатскую диссертацию.
- Н. М. Арсланов получил Диплом II-й степени за выступление на Российской молодежной школе по квантовой оптике (октябрь 2003, Казань).
- Н. М. Арсланов в 2002–2003 гг. выиграл стипендию Ученого совета физического факультета КГУ.
- Р. А. Алексеев в 2003 г. получал именную стипендию им. С. А. Альтшулера физического факультета КГУ.
- Студентка кафедры И. В. Карягина получила грамоту за выступление на итоговой студенческой конференции КГУ. Она также награждена грамотой за активное участие в Республиканском конкурсе научных работ среди студентов на соискание премии имени Н. И. Лобачевского.

- На итоговой научной студенческой конференции физфака КГУ победителями стали Р. А. Алексеев, Н. М. Арсланов, И. В. Карягина.
- Выпускники кафедры М. П. Цейтлин, Л. Р. Мурсалимов выиграли гранты Фонда НИОКР Татарстана.

Работа кафедры была поддержана Президиумом РАН в рамках целевой программы Российской академии наук “Поддержка молодых ученых 2003 г.” (400000 руб.).

На оборудование лабораторных работ и дальнейшее развитие компьютерного класса было выделено более 200000 руб. Более 30000 руб. было выделено на покупку расходных материалов: дискет, комплектующих, CD-writer, сетевых карт, кабелей, сетевого концентратора, коннекторов для создания сети между компьютерами на кафедре, сетевых фильтров, жестких дисков на 20–40 Гб, компьютерных мышей, канцтоваров, столов для PC, вертящихся кресел.

В настоящее время 15 выпускников кафедры являются сотрудниками нашего института.

К. М. Салихов
зав. кафедрой химической физики



Сотрудники кафедры химической физики. Слева направо: 1-й ряд: Г. П. Вишневская, К. М. Салихов, Р. М. Аминова. 2-й ряд: Л. И. Савостина, С. Б. Абдрахманова, А. А. Бухараев, Х. Л. Гайнутдинов, Ф. Л. Аухадеев, С. А. Моисеев.

Международная премия им. Е. К. Завойского 2003

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.



Уэйн Л. Хаббелл
лауреат премии 2003 года

Премия им. Е. К. Завойского присуждается за выдающийся вклад в применения или развитие электронного 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.

Выборы лауреата и церемония вручения этой престижной премии в 2003 году проходили в соответствии

с устоявшейся традицией. Лауреат был выбран Международным комитетом в следующем составе: К. М. Салихов (Казань, Россия), председатель, и члены: Б. Блини (Оксфорд, Великобритания), Дж. Фейер (Ла Хойа, США), К. Мебиус (Берлин, Германия), А. Швайгер (Цюрих, Швейцария), Ю. Д. Цветков (Новосибирск, Россия). В начале 2003 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 2003 года. В результате широкого обсуждения всех кандидатур решение комитета было единодушным – лауреатом премии 2003 был назван Уэйн Л. Хаббелл, профессор Университета Калифорнии в Лос-Анжелесе, Лос-Анжелес, США.

Профессор Хаббелл был отмечен за выдающийся вклад в развитие и приложения метода позиционно-направленных спиновых меток. Этот метод находится сейчас в стадии быстрого роста, и мерой успеха является все увеличивающееся число лабораторий во всем мире, которые его используют.

За тринадцать лет существования премии высокого звания лауреата были удостоены 15 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, а также фирма Брукер БиоСпин.

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 2003 году она проходила в период с 17 по 19 сентября. 17 сентября 2003 года Премьер-министр Республики Татарстан Р. Минниханов принял проф. У. Л. Хаббелла с супругой Шерил. Церемония вручения премии проходила 19 сентября в здании Культурного центра “Казань” под председательством проф. К. М. Салихова. В ней участвовали 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. У. Л. Хаббеллу Диплом лауреата, медаль и денежный чек. Лауреата тепло поздравили ректор КГУ проф. М. Х. Салахов, председатель КазНЦ РАН проф. А. И. Коновалов и вице-президент АН РТ проф. Ш. М. Чабдаров. Лауреату были переданы поздравления от имени Амперовского обще-



Диплом премии им. Е. К. Завойского Уэйну Хаббеллу (справа) вручают З. Р. Валеева (в центре) и К. М. Салихов (слева).

ства, Международного общества ЭПР (ЭСР) и Международного общества магнитного резонанса.

Уэйн Хаббелл прочитал лекцию, в которой рассказал о проблемах приложения метода позиционно-направленных спиновых меток в исследованиях структуры и динамики белков. Торжественное собрание сопровождалось выступлением струнного квартета “Кантилена”. Церемония завершилась банкетом в честь лауреата.

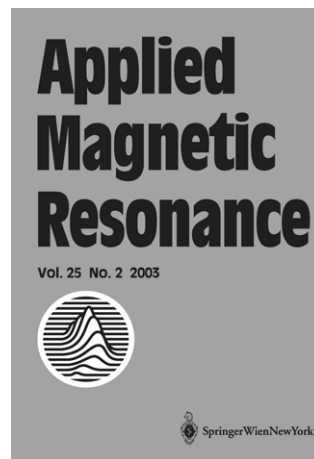
Во время своего пребывания в Казани Уэйн и Шерил Хаббелл посетили Музей истории КГУ, где экспонируется экспериментальное оборудование Е. К. Завойского, достопримечательности Казани и Раифский монастырь.

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. Редакция журнала расположена в КФТИ КазНЦ РАН. Издателем журнала является издательство Шпрингер (Вена, Нью Йорк), расположенное в Вене, Австрия.

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, выпускаются 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; 2001 – 0.737; 2002 – 0.673.

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 под редакцией известных ученых, посвященные актуальным проблемам магнитного резонанса. 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 Амперовских конгрессов, а также ряда специализированных Амперовских симпозиумов и международных конференций.

В 2003 г. редакцией осуществлен выпуск 24-го и 25-го томов журнала. Среди них – специальный выпуск “Современные тенденции в магнитном резонансе”, подготовленный профессорами Н. Пислевским и Я. Станковским (Институт молекулярной физики Польской академии наук, Познань, Польша) в рамках 31-го Амперовского конгресса.

Статьи этого выпуска демонстрируют широкий спектр приложений магнитного резонанса в исследованиях структурных и магнитных фазовых переходов, ЭПР в высоких полях, разупорядоченных и стеклообразных материалов, и других актуальных проблем физики твердого тела.

Доктор А. Н. Гарроуэй (Военноморская лаборатория США, Вашингтон, США) подготовил специальный выпуск по теме “Детектирование с помощью магнитного резонанса”. Это название подразумевает, что необходимо обнаружить некоторое известное вещество, в противоположность задаче его детального изучения. Например, в приложениях, связанных с безопасностью полетов гражданской авиации, на то, чтобы просканировать багаж пассажира с целью обнаружения взрывчатого вещества, отводится около 10 с, что требует экспресс-методов детектирования. Статьи отвечают следующим главным направлениям: детектирование взрывчатых веществ и наркотиков методами ЯКР и ЯМР, разведка запасов воды и каротаж нефтяных пластов методом ЯМР. Статьи включают в себя несколько обзоров ранних работ, которые не получили широкой известности, и самые последние работы, которые содержат теоретические основы для лучшего понимания и усовершенствования методов детектирования.

Л. В. Мосина
заместитель главного редактора

***EPR newsletter* на родине электронного парамагнитного резонанса**

Начиная с 2003 года, редакция *EPR newsletter*, вестника Международного общества ЭПР (ЭСР), работает в Казанском физико-техническом институте.

Поясню, что такое Международное общество ЭПР (ЭСР) (МОЭ). МОЭ было создано в июле 1989 года во время 12-го Международного симпозиума по ЭПР в Денвере (Колорадо, США). Инициатором создания этого общества стал профессор Харольд М. Сворц (Университет Иллинойса, Урбана, Иллинойс, США), который и был избран первым Президентом МОЭ. В своем программном меморандуме Харольд Сворц назвал главной причиной для создания такого общества то, что уже существующие общества по магнитному резонансу главным образом ориентированы на ядерный магнитный резонанс [1].



Идея об организации МОЭ была встречена с большим энтузиазмом, и в настоящее время в этом обществе состоят около 1000 членов из почти всех стран мира. Общество поддерживают 13 корпоративных спонсоров. На финансовые средства МОЭ содержится база данных о

примерно 3000 ученых, которые применяют метод ЭПР в своих исследованиях.

Общество наметило для себя следующие цели и задачи:

1. Стимулировать развитие спектроскопии электронного парамагнитного резонанса (ЭПР)/электронного спинового резонанса (ЭСР).
2. Способствовать обмену информацией и новостями об ЭПР и его применениях между членами общества и служить клиринговой палатой (организацией по сбору, классификации и распространению информации) по ЭПР для ученых в академических заведениях, правительстве и промышленности.
3. Поощрять применение ЭПР в широком диапазоне областей исследований, включая физику, химию, биологию, медицину, сельское хозяйство, геологию и т.д.
4. Служить выразителем интересов международного сообщества ЭПР, способствуя поддержке исследований, использующих метод ЭПР, посредством взаимодействия с другими обществами, правительственными финансовыми агентствами и международными научными организациями.
5. Развивать образовательные программы по ЭПР и родственным спектроскопическим методам (организация школ, симпозиумов и семинаров).

Детальную информацию о МОЭ можно найти на веб-сайте www.ieprs.org.

В качестве официального печатного органа МОЭ Харольд Сворц предложил использовать *Electron Spin Resonance Centers Newsletter*, вестник Центров по ЭСР в США, который издавался с 1987 года под редакцией профессора Линна Белфорда (Университет Иллинойса, Урбана, Иллинойс, США). Под новым именем *EPR newsletter*, за период с 1989 по 2002 гг. маленький буклет превратился в полноценное печатное издание. В нем публиковались объявления и отчеты о локальных и международных конференциях, информация об экспериментальной технике, компьютерные программы и методы, объявления об обмене оборудованием, о наличии вакансий и поиске работы, реклама спонсоров, новости МОЭ и т.д.

В 2002 году МОЭ приняло решение прекратить издавать *EPR newsletter* в Урбане (Иллинойс, США). Об этом на страницах *EPR newsletter* сообщил тогдашний Президент МОЭ, профессор Джон Пилброу (Университет Монаш, Виктория, Австралия) [2]. Для меня это не было неожиданностью, поскольку к тому времени я уже получила от него письмо с предложением рассмотреть возможность сменить Линна Белфорда на посту редактора *EPR newsletter*. Не скрою, моей первой мгновенной реакцией было желание ответить, что это большая честь для меня и большая ответственность, я польщена и счастлива, что Президент МОЭ подумал о моей кандидатуре, но я сомневаюсь, что справлюсь с этим. Однако, поразмыслив в тишине, я пришла к другому выводу. Решающим фактором стала мысль о том, что, если редакция должна покинуть Урбану, Казань – это тот самый город, где должен издаваться вестник МОЭ, он принад-

лежит нашему городу по праву. Казань – родина электронного парамагнитного резонанса, древний город на берегах Волги, где встречаются Восток и Запад, признанный исторический, научный и культурный центр. Предложение Президента МОЭ свидетельствовало о высокой оценке казанской школы радиоспектроскопии. Поэтому я приняла это предложение, и академик РАН Юрий Дмитриевич Цветков (Институт химической кинетики и горения, СО РАН, Новосибирск), новый Президент МОЭ, утвердил мою кандидатуру как редактора *EPR newsletter* с января 2003 года.

Будучи членом МОЭ, я получала *EPR newsletter* все эти годы, читала его от начала до конца и всегда находила что-то интересное или поучительное. В нашей повседневной жизни мы имеем множество источников информации. Местные газеты позволяют нам ощущать себя членами сообщества своих соседей. Газеты масштаба страны дают нам возможность чувствовать себя гражданами страны. Знакомство с общемировыми новостями делает нас частью человечества. Мы живем в разных странах и используем различные методы и технику ЭПР для изучения огромного разнообразия проблем, мы участвуем в различных конференциях по магнитному резонансу, но мы члены одного и того же общества, МОЭ. Именно *EPR newsletter* объединяет нас и дает нам ощущение, что мы “одной крови”.

Таково мое понимание места и роли *EPR newsletter* в жизни сообщества ЭПР. Команда Линна Белфорда хорошо поработала эти годы. Не было смысла революционно трансформировать *EPR newsletter*. Разумно было сохранить колонки информации о жизни МОЭ, различных премиях, новых книгах и журналах, компьютерных программах и методах, экспериментальных ноу-хау, объявления и отчеты о конференциях, объявления о вакансиях и желающих найти работу, информация о продаже и обмене оборудования. Однако, времена меняются и жизнь вносит свои коррективы. Назрела необходимость некоторых перемен как в содержании этого издания, так и в его внешнем виде.

Мне хотелось, чтобы публикации в *EPR newsletter* позволили нашим читателям узнать больше о людях, которые делают науку, и таким образом придать науке человеческие черты. Прежде всего, этой цели служит новая колонка “Другая страсть”. Талантливые люди обычно талантливы во многом. Эта колонка о тех людях, которые достигли успеха в научных ЭПР исследованиях, но также имеют страсть к чему-то абсолютно другому. И, реализуя эту страсть, они также достигли успеха. Например, в выпусках 2003 года профессор Джордж Фейер (Университет Калифорнии, Сан Диего, Калифорния, США), третий призер Американского чемпионата по покеру 1992 года, раскрыл нам тайны и психологию этой игры [3], а Йозеф Хайнцер (Федеральная техническая высшая школа, Цюрих, Швейцария), профессиональный композитор, поделился деталями своего творческого процесса [4]. Колонка о пионерах ЭПР, которую редактирует Джон Пилброу, рассказывает о наших великих

учителях и их пути и жизни в науке. Открывая эту рубрику, Джон Пилброу живо описал Кларендонскую лабораторию в Оксфорде (Великобритания) начала шестидесятых годов XX века [5], а в следующем номере воспоминания сотрудников профессора Клайда А. Хатчисона Мл. (Университет Чикаго, Чикаго, Иллинойс, США) позволили почувствовать творческую атмосферу этого научного коллектива [6]. Наталия Евгеньевна Завойская в своем интервью рассказала о личности своего отца, Евгения Константиновича Завойского, открывшего явление ЭПР в 1944 году в Казани [7]. Артур Швайгер, профессор Федеральной технической высшей школы (Цюрих, Швейцария), любезно согласился быть персональным гидом для наших читателей в безбрежном океане литературы по ЭПР, редактируя колонку “Для Вашего внимательного чтения”. Профессора Грэм Тимминс (Университет Нью Мексико, Альбукерк, США), Такеджи Такуи (Университет города Осака, Осака, Япония) и Томас Приснер (Институт физической химии, Франкфурт, Германия), мои помощники по Северной и Южной Америке, Азиатско-тихоокеанскому региону и Европе, соответственно, должны обеспечивать поток информации из разных стран мира.

Что же касается внешнего вида, хотелось сделать это печатное издание отвечающим современным требованиям: с более высоким качеством иллюстраций и дизайна, а также в цветной обложке, иллюстрирующей научные результаты лауреатов различных премий в области магнитного резонанса (премии им. Е. К. Завойского, премий МОЭ, Брукеровской премии). Не следует забывать и еще об одной проблеме, возникшей в результате смены дислокации редакции: поскольку печатные копии вестника распространяет филиал фирмы Bruker BioSpin в Биллерике (Массачусетс, США), необходимо было найти типографию в непосредственной близости от этой фирмы, чтобы сэкономить на почтовых расходах.

Надо отметить, что в этом смысле *EPR newsletter* сильно повезло. Фирма Bruker BioSpin согласилась оплачивать дополнительные расходы по изготовлению цветной обложки и нашла для нас типографию LaPlume and Sons Printing в своем регионе. Сергей Михайлович Ахмин (редакция *Applied Magnetic Resonance*, КФТИ), технический редактор *EPR newsletter*, обеспечивает великолепный дизайн и качество оригинал-макета. Он сумел найти взаимопонимание с заокеанскими типографскими работниками, готовя для них файлы для печати, представляющие по их собственной оценке “мечту печатника”.

Pdf-версия *EPR newsletter* размещается на вебсайте www.epr-newsletter.ethz.ch (с любезного согласия руководства Федеральной технической высшей школы, Цюрих, Швейцария). Ее сотрудник Мориц Келин, веб-мастер, создал и поддерживает сайт, демонстрирующий хороший вкус и интеллигентность.

Наш первый двойной номер, *EPR newsletter* 13/1-2 (2003), который мы подготовили к Общему собранию МОЭ во время 26-го Международного симпозиума по ЭПР в Денвере (Колорадо, США), произвел эффект разорвавшейся бомбы (простите за злободневное сравнение). Это – общедоступный выпуск, и читатель ежегодника может сам сравнить с ним предыдущие выпуски, подготовленные командой Линна Белфорда, если заглянет на вебсайт www.epr-newsletter.ethz.ch. Мы получили множество восторженных откликов (в диапазоне от “замечательно” до “шедевр”) от руководства МОЭ и других читателей этого номера *EPR newsletter*. Мы расцениваем эту высокую оценку наших усилий как стимул для дальнейшей работы. До нас также дошло несколько скептическое замечание: “великолепно, но посмотрим, смогут ли они удержать эту высокую планку...”. Да, вопрос интересный. Наш следующий номер, *EPR newsletter* 13/3 (2003), позволит читателю ежегодника самому ответить на этот вопрос. Однако прочитать этот номер могут только члены МОЭ. По-моему, неплохой дополнительный аргумент в пользу вступления в МОЭ.

Наряду с международным журналом *Applied Magnetic Resonance* и Международной премией им. Е. К. Завойского, *EPR newsletter*, официальный орган МОЭ, создаваемый в стенах нашего института, является еще одним весомым доказательством высокого авторитета КФТИ КазНЦ РАН как мирового центра по радиоспектроскопии.

Л. В. Мосина
главный редактор

Литература

1. Swartz H.M.: Electron Spin Resonance Centers Newsletter **1**, nr. 1, 1 (1968)
2. Pilbrow J.R.: EPR newsletter **12**, no. 3, 3 (2002)
3. Feher G.: EPR newsletter **13**, no. 1-2, 10 (2003)
4. Heinzer J.P.: EPR newsletter **13**, no. 3, 9 (2003)
5. Pilbrow J.R.: EPR newsletter **13**, no. 1-2, 16 (2003)
6. Heiss A.H., Weber R.T., Weil J.A.: EPR newsletter **13**, no. 3, 16 (2003)
7. Zavoiskaya N.E.: EPR newsletter **13**, no. 1-2, 13 (2003)

IX Международные чтения по квантовой оптике

Уже девятый раз собрались специалисты в области квантовой оптики на Международные чтения. На этот раз они проходили осенью (12–17 октября 2003 г.) в Санкт-Петербурге, в одном из зданий Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена на набережной реки Мойки. В качестве организаторов IX Международных чтений по квантовой оптике выступили: Казанский физико-технический институт КазНЦ РАН и Российский государственный педагогический университет. Программа этих Чтений была построена так, чтобы не было параллельных секций и чтобы их участникам не приходилось перемещаться из одной аудитории в другую, нарушая четкий ритм протекания заседаний. Поэтому, чтобы не перегружать программу устными докладами, два дня работала стендовая секция. Ежедневно, с утра, проходили пленарные заседания, на которых ведущими российскими и зарубежными учеными было прочитано 32 лекции по актуальным проблемам современной квантовой и когерентной оптики. После перерыва участники Чтений выступали с устными докладами по результатам собственных научных исследований. В целом, состоялось 90 докладов, из которых: 32 – лекции и 33 – устные двадцатиминутные доклады. Лекции были рассредоточены по дням таким образом, что на одном пленарном заседании, как правило, обсуждались близкие проблемы. Так, первое пленарное заседание было посвящено проблемам квантовой голографии, томографии квантовых состояний света и реализации квантовых изображений. Среди выступлений этого заседания выделим лекцию проф. Мигеля Сервантеса (Хермосило, Мексика) об особенностях записи голограмм с помощью фемтосекундных лазерных импульсов, лекцию проф. А. В. Масалова (ФИ РАН, Москва, Россия) по поляризацион-

ной томографии квантовых состояний света и лекцию проф. С. В. Чекалина (ИС РАН, Троицк, Россия) о результатах исследования структуры ближнего поля с помощью лазерного фемтосекундного микроскопа. Следующее пленарное заседание было посвящено квантовой оптике бозе-конденсата. Среди ярких выступлений этого заседания отметим лекцию проф. Ю. Е. Лозовика (ИС РАН, Троицк, Россия) по оптике экситонного бозе-конденсата, лекцию проф. Е. Д. Трифонова (РГПУ, Санкт-Петербург, Россия) по сверхизлучению на бозе-конденсате разреженного газа, лекцию проф. Н. Н. Розанова (ГИТМО, Санкт-Петербург, Россия) по солитонным состояниям атомарного бозе-конденсата. Способам реализации перепутанных состояний в квантовой оптике было посвящено еще одно пленарное заседание. Наиболее интересные лекции здесь были прочитаны проф. С. П. Куликом (МГУ, Москва, Россия) по использованию бифотонов в протоколах квантовой информации, И. Е. Проценко (ФИ РАН, Москва, Россия) по результатам анализа функционирования логической ячейки на основе интерференции квантовых состояний атомов при спонтанном излучении, А. И. Трубилко (ИМГУП, Санкт-Петербург, Россия) по изучению оптических схем для приготовления перепутанных квантовых состояний. Обсуждение проблем оптической квантовой памяти было продолжено на следующем пленарном заседании в лекциях проф. С. А. Моисеева (КФТИ КазНЦ РАН, Казань, Россия) и проф. Э. А. Маныкина (РНЦ Курчатовский институт, Москва, Россия), посвященных квантовым вычислениям в технике фотонного эха. Кроме того, проходило обсуждение и других близких проблем: когерентного контроля нестационарных явлений (проф. Н. Н. Рубцова, ИФПП СО РАН, Новосибирск, Россия), плотного кодирования



Участники IX Международных чтений по квантовой оптике.

информации в сжатом свете (проф. Ю. М. Голубев, ГОИ, Санкт-Петербург, Россия), усиления импульсов сжатого света в режиме триггерного сверхизлучения (А. А. Калачев, КФТИ КазНЦ РАН, Казань, Россия), оптической прозрачности среды в условиях резонанса (проф. С. В. Сазонов, КГТУ, Калининград, Россия), электромагнитно индуцированной прозрачности и замедления света (А. С. Трошин, РГПУ, Санкт-Петербург, Россия). Последнее пленарное заседание было посвящено гамма-оптике. Эта секция запомнилась яркими выступлениями Р. Н. Шахмуратова (КФТИ КазНЦ РАН, Казань, Россия) по электромагнитно индуцированной прозрачности гамма-импульсов и Г. А. Скоробогатова (СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия) по результатам экспериментов по коллективному спонтанному гамма-распаду.

Интересные доклады можно было услышать и на вечерних заседаниях. Запомнились выступления С. Н. Андрианова (ГИПО, Казань, Россия) по проблеме квантовой телепортации, О. Х. Хасанова (ИФТТ и ПП АН Беларуси, Минск, Беларусь) о возможности наблюдения некогерентной самоиндуцированной прозрачности в оптически плотных средах, А. В. Горохова (СГУ, Самара, Россия) о фрактальных свойствах квантовых суперпозиций, В. В. Овсянкина (ГОИ, Санкт-Петербург, Россия) о спонтанном излучении пространственно модулированного бозе-конденсата экситонов, Ю. А. Аветисяна (СГУ, Саратов, Россия) о многомодовой структуре сверхизлучательного рассеяния света на бозе-конденсате разреженного газа, Е. Б. Хворостова (ИФПП СО РАН, Новосибирск, Россия) по интерференции квантовых состояний в фотонном эхо, И. И. Попова (МарГУ, Йошкар-Ола, Россия) о возможности квантовых вычислений в технике фотонного эха.

В целом, IX Международные чтения по квантовой оптике удалась. На них царила творческая атмосфера и неравнодушие всех участников к обсуждаемым проблемам. Особенно порадовали молодые казанские участники Чтений, представившие хорошие доклады: А. А. Коновалов, А. А. Калинин, С. В. Петрушкин, А. В. Шкалков, А. С. Низамутдинов, Д. Д. Власова, Н. М. Яковлева, В. В. Аринин.

Запомнилась культурная программа, подготовленная организаторами. Участники Чтений посетили Екатерининский дворец в г. Пушкине и имели удовольствие увидеть восстановленную Янтарную комнату. На следующий день многие из нас были на балете в Мариинском театре. Все мы почувствовали большую работу, проведенную в Санкт-Петербурге ко дню его трехсотлетия.

Семнадцатого октября прошло заключительное заседание, на котором было принято Решение участников IX Международных чтений по квантовой оптике, в котором проведенные Чтения признаны успешными, а их организация – хорошей. Следующие Чтения будут проведены в Самаре в 2007 году.

Устные и стендовые доклады будут опубликованы в SPIE Proceedings, том 5402 (2004), а пленарные доклады – в журнале Известия РАН, серия физическая, том 67, № 9 (2004).

*В. В. Самарцев
председатель организационного и программного
комитетов Международных чтений
по квантовой оптике*

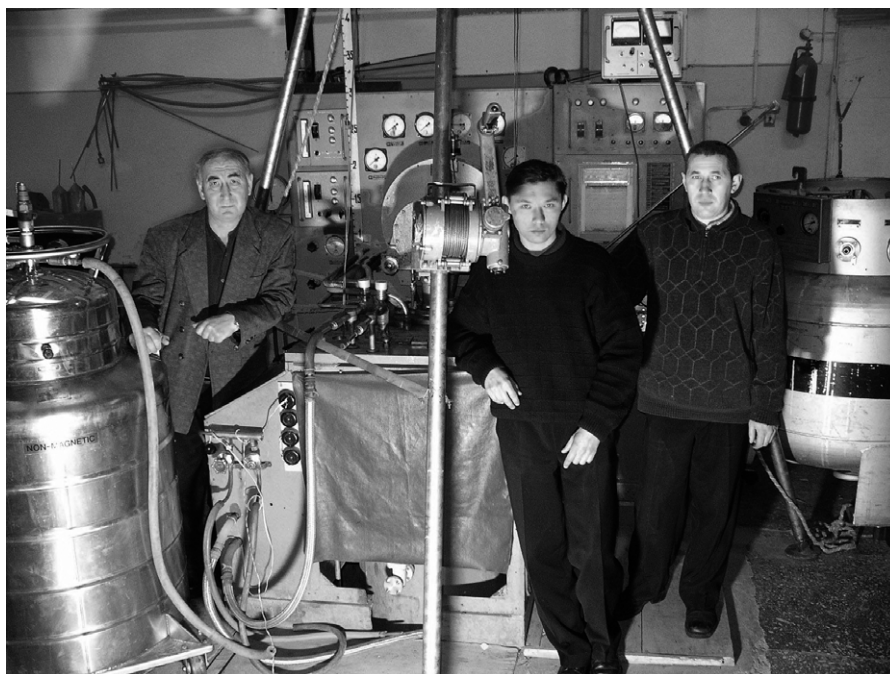
К 40-летию получения жидкого гелия в КФТИ: история, настоящее, перспективы

В истории Казанского физтеха важным является период становления криогеники. Перелистать страницы этой истории весьма уместно теперь, поскольку в этом году исполнилось 40 лет со дня получения жидкого гелия в институте. Об этом свидетельствуют архивные материалы: приказ № 188 (§ 8) от 20 декабря 1963 года по Казанскому филиалу АН СССР о премировании группы сотрудников КФТИ за пуск гелиевой установки. Ответственным за монтаж и пуск гелиевой станции (ГС-2) был назначен недавний выпускник кафедры физики низких температур Московского госуниверситета Эдуард Георгиевич Харахашьян, который блестяще справился с поставленным Учёным советом института заданием.

Первому ожигению гелия предшествовали немаловажные для развития криогенной техники в КФТИ события:

пуск азотной станции ЖАК-80 в 1960 году, а затем водородной ожигательной станции (ВОС-3) в 1961 году. Однако ВОС-3 долго не проработала: Гостехнадзор запретил эксплуатировать станцию в центре города. Тем не менее, проделанная работа сыграла положительную роль в приобретении опыта криогенного монтажа, а кроме того, часть блоков ВОС-3 в дальнейшем была использована для гелиевой станции ГС-2.

Сохранилась рукопись выступления Э. Г. Харахашьяна на Учёном совете, членом которого он являлся, будучи младшим научным сотрудником. Он пишет: “Работы по монтажу и пуску станции ГС-2, начатые весной 1962 года, успешно завершены к концу 1963 года.” Далее он обращает особое внимание на проблемы по соблюдению норм техники безопасности и небезоснова-



Сотрудники гелиевой станции возле установки КГУ-40. Слева направо: С. Я. Хлебников, А. А. Закиров, И. А. Арсланов

тельно. Технологический цикл станции ГС-2 построен по методу каскадного охлаждения. Сжатый до 20 атм гелий охлаждается в ванне с жидким азотом, а затем в ванне с вакууммированным водородом при температуре 15 К для увеличения дроссель-эффекта и после дросселирования сливается в сборник. Фактически здесь заложен самостоятельный замкнутый водородный цикл с рабочим давлением до 150 атм. Нельзя не восхищаться смелости и аккуратности персонала, работавшего в столь экстремальных условиях. Последующие 10 лет работы станции ГС-2 прошли без чрезвычайных происшествий.

Производительность ГС-2 была небольшая, а желающих проводить исследования, используя жидкий гелий, было предостаточно. Экспериментаторы приносили свои криостаты в гелиевый зал, и криостаты заливались, как говорится, из-под аппарата. Иногда очередь доходила до 8 криостатов в день. Несмотря на то, что производительность ГС-2 не обеспечивала полностью потребность КФТИ в жидком гелии, работа гелиевой станции позволила физикам получать хорошие результаты. Так, например, в 1969 году Э. Г. Харахашьян, Т. А. Хлебникова и я на самодельном криостате методом адиабатического размагничивания парамагнитной соли получили спиновую температуру 20 мК.

В 1972 году институт переехал в новое здание по ул. Сибирский тракт. Гелиевая станция ГС-2 была демонтирована, а ожижитель передан в КХТИ для учебных целей. В 1973 году в КФТИ была запущена новая гелиевая станция Г-3 без водородного цикла, с детандером и имеющая производительность 35 л в час. Физики получили возможность экспериментировать в новых условиях: в институте появилась гелиевая сеть, криостаты стали стационарными. 70-ые годы запомнились мне как годы значительного расширения криогенных экспериментов в институте. Ге-

лиевая станция иногда работала в две смены для обеспечения экспериментальных исследований. В 1975 году мы с сотрудниками лаборатории физики металлов создали и запустили рефрижератор растворения He-3 в He-4 для радиоспектроскопических исследований. Эта установка была одной из первых в мире для исследований ЭПР. Она обеспечивала получение регулируемой термодинамической температуры вплоть до 30 мК. Установка работоспособна и в настоящее время.

Станция Г-3 проработала 20 лет, многократно выработав свой ресурс. Интересно было проанализировать потребление жидкого гелия в институте за последние 30 лет. Это сделано на основе данных из журналов учета работы станции с 1973 по 2003 гг. (рис. 1).

Средний уровень потребления до 1985 года составляет около 8000 литров в год. Резкий спад наблюдается в начале 90-х годов. Объясняется это несколькими причинами:

- станция Г-3 к этому времени выработала свой ресурс, и начались серьезные поломки;
- в КФТИ прекратили производство жидкого азота из-за экономической нецелесообразности;
- произошла смена сотрудников, ответственных за криогенную технику;
- возникли сложности с закупкой газообразного гелия ввиду прекращения его производства на Миннибаевском газоперерабатывающем заводе.

Ситуация усугубилась в связи с известными событиями при распаде СССР. Спад производства жидкого гелия в начале 90-х годов наблюдался во всех криогенных центрах страны. Так, в Москве, из более чем 20 гелиевых станций остались 3–4, в Поволжье остались производители в Казани и Нижнем Новгороде. В КФТИ производство жидкого гелия не было остановлено.

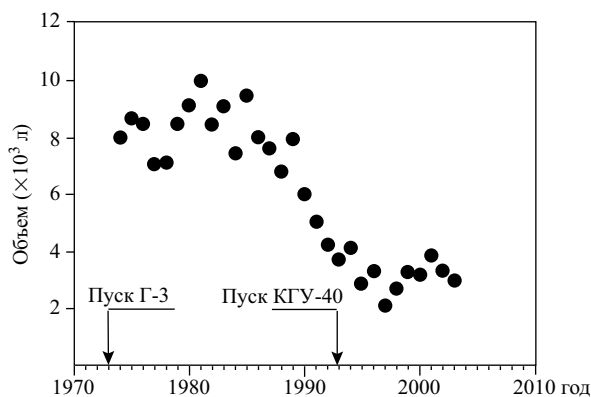


Рис. 1. График потребления жидкого гелия в КФТИ с 1973 по 2003 гг.

В 1992 году был организован отдел криогенной техники, появились новые кадры, заведующим отделом был назначен автор этих строк. Срочно был взят курс на доработку и пуск станции нового поколения КГУ-40. В 1993 году станция была успешно запущена, что позволило стабилизировать производство жидкого гелия на уровне

не 3–3.5 тысяч литров в год, обеспечивающем нормальную исследовательскую работу в институте.

В настоящее время сложно говорить о перспективах развития криогенной техники в КФТИ. Однако, предпосылки для этого имеются. Они связаны с возрастанием потребностей в жидком гелии, с появлением новых криосистем. Возможно, это новые криогенные ЯМР томографы, спектрометры ЯМР на высоких частотах (400–900 МГц), не за горами спектрометры ЭПР субмиллиметрового и оптического диапазонов, где требуется охлаждение для реализации сильных магнитных полей.

В заключение хочу отметить сотрудников физтеха, чей труд обеспечил становление и развитие криогенки института: Э. Г. Харахашьяна, В. М. Пименова, Н. И. Бурдаева, С. И. Ефремова, М. А. Тараканова, И. А. Арсланова, С. Ф. Тарасова, а также сотрудников КГУ: П. М. Голобурдова и Ф. С. Караулова за активное содействие этому процессу.

С. Я. Хлебников
зав. отделом криогенной техники

Премия им. М. Л. Блатта 2003 года

19 ноября 2003 года комитет по присуждению премии им. М. Л. Блатта для работников вспомогательных подразделений КФТИ и Ученый совет института приняли решение: за многолетний добросовестный труд, ответственное отношение к своим обязанностям, за содержание хозяйства здания КФТИ по улице Сибирский тракт, дом 10/7 и базы отдыха института в образцовом порядке, за заботу о полноценном питании сотрудников – присудить премию 2003-го года заведующей АХО Куприяновой Ольге Олеговне. В многочисленных обращениях сотрудников института в комитет по премированию Ольга Олеговна характеризуется как инициативный работник, болеющий душой за порученное дело. Ответственность за хозяйство здания – это не единственная её нагрузка. Благодаря её усилиям в новом здании института хорошо организована работа буфета.

Ольга Олеговна выполняет также большую общественную работу в качестве председателя комиссии по работе с ветеранами, тратит много сил и времени на то, чтобы пенсионеры – бывшие сотрудники института – не остались без внимания и заботы.

Ю. И. Таланов
председатель комитета по премии
им. М. Л. Блатта



Ольга Олеговна Куприянова
лауреат премии 2003 года

Архив Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН

В 2004 году архиву Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН исполняется 45 лет (Постановление Президиума АН СССР № 65 от 20 февраля 1959 года).

Архив, как структурное подразделение, прошел все этапы становления, которые прошел наш институт. До 1963 года он считался архивом Казанского филиала АН СССР, поскольку все делопроизводственные службы (канцелярия, отдел кадров, бухгалтерия и др.) были едиными для институтов филиала. В 1963 году, после прекращения деятельности КФАН СССР, архив стал именоваться архивом Казанского физико-технического института. В период с 1963 по 1972 гг. были созданы архивы в Институте органической и физической химии им. А. Е. Арбузова и Институте языка, литературы и истории им. Г. Ибрагимова. В 1972 году, после восстановления деятельности Казанского филиала АН СССР, на Физико-технический институт было возложено административно-хозяйственное обслуживание ИЯЛИ им. Г. Ибрагимова и Президиума Казанского филиала. В конце 80-х – начале 90-х годов XX века, после обретения этими структурными подразделениями самостоятельности, с Казанского физико-технического института была снята функция их административно-хозяйственного обслуживания.

В июне 1991 года была предпринята попытка создания объединенной архивной службы при Президиуме КазНЦ АН СССР, куда вошли архивы КФТИ им. Е. К. Завойского и ИОФХ им. А. Е. Арбузова. Никаких изме-

нений в работе архива, кроме изменения подчиненности, не произошло. В мае 1992 года архив вновь был возвращен в структуру Казанского физико-технического института. С этого времени архив стал обслуживать только наш институт, хотя и по настоящее время выполняются все запросы, поступающие от сотрудников и институтов КазНЦ РАН.

В декабре 2002 и сентябре 2003 годов Президиумом Казанского научного центра были изданы распоряжения (№ 99 от 26.12.02 и № 74 от 23.09.03) о передаче фондов Химического института КФАН СССР за 1946–1963 гг. и Института языка, литературы и истории им. Г. Ибрагимова КФАН СССР за 1946–1974 гг. соответствующим институтам. Институту органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН переданы 823 единицы хранения, а Институту языка литературы и искусства им. Г. Ибрагимова Академии наук Республики Татарстан – 3136 единиц хранения и научно-справочные аппараты к ним.

В 2003 году произошло важное событие в жизни архива. Было выделено помещение, приобретены стеллажи и фонды архива Казанского физико-технического института были перевезены в здание института по улице Сибирский тракт, дом 10/7.

Н. А. Карташева
главный специалист технического архива

цифры и факты

2003 год в цифрах

Кадры (на 31 декабря 2003 г.)

Уволены

1. Алимбекова А.Ш., стажер-исследователь
2. Асадуллина Н.Я., вед. инженер
3. Белов Д.А., вед. инженер
4. Бикчантаев И.Г., ст. науч. сотрудник
5. Дунаев Д.М., мл. науч. сотрудник
6. Кессель А.Р., зав. лабораторией
7. Кириллов Д.Е., гл. специалист ОГЭ
8. Макарова Е.А., зав. АХО
9. Нуруллин А.Н., гл. специалист ГКР
10. Рыбакова Л.А., вед. инженер ТБ и ОТ

Приняты

1. Калинин А.А., мл. науч. сотрудник
2. Кулыгина А.Б., стажер-исследователь
3. Лапаев Д.В., мл. науч. сотрудник
4. Мурсалимов Л.Р., мл. науч. сотрудник
5. Нурутдинов Р.М., мл. науч. сотрудник
6. Таланов Д.Ю., вед. инженер
7. Хлебникова А.Ф., вед. инженер ОТ и ТБ
8. Шипов А.И., стажер-исследователь

Численность (человек)

- Общая численность – 279 (из них 37 совместителей)
- Научных сотрудников – 173 (из них 45 совместителей)
- Действительных членов АН РТ – 2
(из них 1 совместитель)
- Член-корреспондентов АН РТ – 1
- Член-корреспондентов РАН – 2
(из них 1 совместитель)
- Докторов наук – 29 (из них 7 совместителей)
- Кандидатов наук – 68 (из них 5 совместителей)

Средний возраст (лет)

- Докторов наук – 58
- Кандидатов наук – 47
- Научных сотрудников без степени – 35

Финансирование (в тыс. руб. на 1 января 2004 г.)

- Общий объем – 70178.7
- Финансирование РАН – 29470.0 в том числе:
 - базовое – 14707.0
 - целевое – 14763.0
- Программы Президиума РАН и ОФН РАН (финансирование через головные организации) – 10/3120
- Республиканская целевая программа “Обеспечение медицинских учреждений Республики Татарстан магнитно-резонансными томографами на 2003–2005 гг.” – 5000.0
- Гранты Министерства промышленности, науки и технологий РФ – 8/4725.0
- Гранты РФФИ (включая гранты на командировки) – 43/4536.2
- Международные и зарубежные фонды – 2/119.1
- Гранты фонда НИОКР РТ – 31/1240.0
- Министерство промышленности, науки и технологий РФ (материально-техническая база) – 2160,0
- Инвестиции Республики Татарстан – 15484.0
- Интеграция – 2/207.0
- Гранты Президента РФ “Поддержка ведущих научных школ” – 2/800.0
- Государственная стипендия – 9.9
- Хозяйственные договора – 1940.9
- Другие источники – 11/1366.6

Публикации

Монографии – 4

Сборники – 3

Переводы книг иностранных авторов – 1

Статьи: всего – 136, из них:

- в зарубежных изданиях – 66
- в отечественных центральных журналах – 40
- в других изданиях – 30

Тезисы: всего – 57, из них:

- в зарубежных изданиях – 11
- в других изданиях – 46

Темы, финансируемые из госбюджета (Отделение физических наук РАН)

1. Теоретические аспекты квантовой информатики на основе спиновой динамики и кинетики в мезоскопических и молекулярных системах.
2. Экспериментальные и теоретические исследования новых проблем магнитоакустики и магнитооптики в антиферромагнетиках и магнитных полупроводниках.
3. Исследования металлов в нормальном и сверхпроводящем состояниях резонансными методами.
4. Теоретические и экспериментальные исследования сильнокоррелированных электронных систем.
5. Синтез и исследование металлосодержащих жидких кристаллов и твёрдых систем со спин-переменными и усиленными оптическими свойствами, а также растворов парамагнетиков радиоспектроскопическими методами.
6. Исследование природы и магнитных свойств парамагнитных центров в диэлектрических материалах методами радиоспектроскопии.
7. Когерентные явления в фотохимических реакциях.
8. Создание компьютерной модели медицинского магнитно-резонансного томографа.
9. Развитие новых радиоспектроскопических методов медицинской диагностики.
10. Исследование воздействия быстрых ионов и мощных энергетических импульсов на состав, кристаллическую структуру и фундаментальные свойства твердых тел (физические основы микро- и наноэлектроники).
11. 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.
12. Разработка физических принципов оптической памяти на основе фотонного эха.
13. Исследование микро- и наноструктур методами сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ).
14. Изучение электронного строения вещества методами ЯКР спектроскопии.
15. Экспериментальное исследование архитектуры и характеристик элементов нейронной сети.
16. Моделирование нелинейных процессов в сложных физико-механических системах и повреждений в структурах на различных масштабных уровнях.

Проекты, финансируемые на конкурсной основе

Для проектов, выполняемых несколькими организациями, указаны координаторы от КФТИ.

Программы фундаментальных исследований Президиума РАН

1. *Квантовая макрофизика.* Лазерное охлаждение примесных кристаллов и интерференционные эффекты квантовой оптики. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
2. *Низкоразмерные квантовые структуры.*
 - Магнитнорезистивные свойства низкоразмерных структур. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.
 - Синтез и исследование новых материалов для нано- и оптоэлектроники на основе диэлектриков с наночастицами металлов и полупроводников. Хайбуллин Р.И., к.ф.-м.н.
3. *Разработка фундаментальных основ создания научной распределенной информационно-вычислительной среды на основе технологий GRID.* Получение и исследование проводящих тонких пленок и ферромагнитных наноструктур для микро- и наноэлектроники, в том числе для квантовых компьютеров. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.; Петухов В.Ю., д.ф.-м.н.
4. *Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий.* Исследование процессов структурно-фазовых переходов в тонкопленочных системах на основе кремния и управление их свойствами при импульсных энергетических воздействиях. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.
5. *Фундаментальные проблемы физики и химии наноразмерных систем и наноматериалов. Направление: Органические и гибридные органико-неорганические наноразмерные системы и материалы на их основе для информационных технологий.* Синтез и исследование композитных полимерных материалов с целью создания на их базе устройств оптоэлектроники. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
6. *Фемтосекундная оптика и физика сверхсильных полей.* Фемтосекундная спектроскопия, включая сканирующую зондовую микроскопию наноразмерных объектов. Салихов К.М., д.ф.-м.н.

Программы фундаментальных исследований Отделения физических наук РАН

1. *Новые материалы и структуры. Направление: Новые гетероструктурированные и композитные материалы с особыми свойствами*
 - Применение пучков электромагнитного и корпускулярного излучения для создания новых материалов с уникальными свойствами в интересах нанoeлектроники, вычислительной техники, оптики и нелинейной оптики. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.
 - Формирование гетероструктур и синтез нанокристаллических слоев полупроводниковых соединений на кремнии. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.
 - Создание и исследование новых материалов (металломезогены, полимерные нанокомпозиты, углеродные нанотрубки) для оптоэлектроники и информатики. Салихов К.М., д.ф.-м.н.; Овчинников И.В., д.ф.-м.н.
2. *Оптическая спектроскопия и стандарты частоты.* Когерентная оптическая спектроскопия на основе явлений фотонного эха и сверхизлучения и ее применение к контролю примесных кристаллов, перспективных носителей информации для фазовых процессов. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
3. *Сильно коррелированные электроны в полупроводниках, металлах, сверхпроводниках и магнитных материалах.* Локальные свойства сильнокоррелированных сверхпроводящих и магнитных систем. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.
4. *Спин-зависимые эффекты в твердых телах и спинтроника.* Теоретическое и экспериментальное исследование возможностей создания спинового клапана на основе наноконтактов и слоистых гетероструктур. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.

Программы Министерства промышленности, науки и технологий РФ

Федеральная целевая научно-техническая программа “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и техники на 2002–2006 гг.”

1. Диагностические методы и оборудование для метрологии, анализа компонентов и микроструктур технологии микро- и нанoeлектроники. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.
2. Разработка ЯМР томографа с индукцией магнитного поля 0.12 Тл. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
3. Фемтосекундный мониторинг колебательно-вращательного движения молекулы в жидкости. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
4. Разработка физических принципов функционирования трехмерной оптической памяти на основе явления типа фотонного эха. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.

5. Теоретические и экспериментальные исследования оптического сверхизлучения в примесных кристаллах как перспективного метода безрезонаторной генерации. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
6. Исследование структур “кремний на диэлектрике”, имплантация мелкозалегающих p-n переходов и быстрых отжига полупроводниковых структур. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.; Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н.

Федеральная целевая научно-техническая программа “Фундаментальные исследования в области физических наук”

Методы комплексной диагностики наноструктур. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.

Федеральная целевая научно-техническая программа “Сверхпроводимость мезоскопических и сильно коррелированных систем”

Локальные свойства сильно коррелированных и мультислойных сверхпроводящих структур. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.

Федеральная целевая научно-техническая программа “Интеграция науки и высшего образования России на 2002–2006 гг.”

1. Разработка и изготовление ЯМР спектрометра повышенной чувствительности для низкочастотного медицинского магнитно-резонансного томографа. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
2. Межмолекулярный дизайн, синтез, свойства и применение предорганизованных наноразмерных структур для создания молекулярных устройств и биологически активных препаратов нового поколения. Салихов К.М., д.ф.-м.н.

Гранты Президента РФ “Поддержка ведущих научных школ России”

1. Исследование фотоиндуцированных молекулярных процессов методами радиоспектроскопии и оптической спектроскопии (НШ-1905.2003.2). Салихов К.М., д.ф.-м.н.
2. Разработка физико-химических основ ионно-лучевой модификации материалов для нанoeлектроники и спинтроники: Радиационно-стимулированный синтез магнитных и оптически активных наноструктур в диэлектриках и полупроводниках (НШ-1904.2003.2). Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.

Конкурсы Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ)*РФФИ (инициативные проекты)*

1. Альтшулер Т.С., к.ф.-м.н.: Методы магнитной радиоспектроскопии в сильнокоррелированных системах (№ 03-02-17453)
2. Андрианов С.Н., к.ф.-м.н.: Лазерное охлаждение примесных твердых тел и оптический рефрижератор (№ 01-02-17730а)
3. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.: Исследование структурных и оптических свойств светоизлучающих в области 1.5 мкм преципитатов дисилицида железа в кремнии, синтезированных в сильнонеравновесных условиях (№ 02-02-16838)
4. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.: Изучение доменной структуры и магнетосопротивления микро- и нанообъектов методами сканирующей зондовой микроскопии (№ 02-02-16686)
5. Водопьянов Б.П., к.ф.-м.н.: Влияние спиновых степеней свободы на электронный транспорт в гетерогенных структурах, содержащих сверхпроводящие и магнитные сегменты (№ 03-02-17432)
6. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Исследование ионных механизмов долговременной сенситизации и ассоциативного обучения у виноградной улитки (№ 01-04-48764)
7. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Исследование возможности создания спинового клапана на основе мультислоев сверхпроводник/ферромагнетик (№ 02-02-16688)
8. Горюнов Ю.В., к.ф.-м.н.: Исследование обусловленных андреевским отражением особенностей электронного транспорта в наноструктурах сверхпроводник-ферромагнетик (№ 03-02-16382)
9. Домрачева Н.Е., к.ф.-м.н.: Релаксационный магнитоэлектрический эффект и особенности структур низкоммерных (дискотических) металлomezогенов (№ 02-03-32179)
10. Калачев А.А., к.ф.-м.н.: Оптическое сверхизлучение и оптическая фазовая память в кристаллах ван-фleckовских парамагнетиков (№ 01-02-16333)
11. Кессель А.Р., д.ф.-м.н.; Нигматуллин Р.Ш., д.ф.-м.н.: Схемы реализации в ЯМР квантового алгоритма быстрого поиска в неупорядоченной базе данных (№ 03-01-00789)
12. Куковицкий Е.Ф.: Рост углеродных нанотрубок на поверхности металлов (№ 01-03-32272)
13. Лобков В.С., к.ф.-м.н.: Исследование механизма фототока в тонкопленочных полимерных композитах (№ 01-03-32280)
14. Мамин Р.Ф., к.ф.-м.н.: Исследование особенностей различных типов структурных фазовых переходов в сегнетоэлектриках, связанных с динамикой электронной подсистемы (№ 01-02-16350)
15. Моисеев С.А., д.ф.-м.н.: Квантовая когерентность в молекулярной динамике сверхбыстрых фотохимических процессов (№ 01-03-32730)
16. Овчинников И.В., д.ф.-м.н.: Жидкокристаллические координационные соединения со спин-переменными свойствами (№ 03-03-32571)
17. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Исследование с помощью ЭПР с разрешением по времени эффекта памяти в поляризации электронных спинов в последовательных радикальных парах (№ 03-03-32602)
18. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Фундаментальные проблемы оптической фазовой памяти и когерентные эффекты, основанные на интерференции квантовых состояний (№ 02-02-16722)
19. Таланов Ю.И., д.ф.-м.н.: Разработка методов повышения критических токов тонкопленочных высокотемпературных сверхпроводников путем создания искусственных дефектов (№ 03-02-96230)
20. Тарасов В.Ф., д.ф.-м.н.: Самоорганизация редкоземельных димеров в синтетическом форстерите (№ 03-02-16374)
21. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.: Корреляция зарядов и спинов в металлооксидах (№ 01-02-17533)
22. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.: Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в диэлектрических кристаллах (№ 02-02-16648)
23. Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н.: Исследование in situ зародышеобразования локальной жидкой фазы на поверхности полупроводников при мощных импульсных фотонных обработках (№ 03-02-96236)
24. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Структурно-фазовые переходы в полупроводниках в сильно неравновесных условиях воздействия мощными импульсами ионизирующего излучения (№ 01-02-16649)

РФФИ и Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований

- Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Фундаментальные проблемы формирования оптических переходных процессов и сверхизлучения в оптически плотных средах (№ 02-02-81011 Бел 2003а)

РФФИ и Республика Татарстан

1. Аминова Р.М., д.ф.-м.н.: Разработка методов квантовой и фемтохимии для управления фотохимической реакцией перегруппировки атомов в нитронах (№ 03-03-96214)
2. Горюнов Ю.В., к.ф.-м.н.: Реализация и исследование сверхпроводниковых микроструктур, функционирующих на основе эффекта близости и андреевской блокады проводимости по выделенному спиновому каналу (№ 03-02-96191)

3. Зарипов М.М., д.ф.-м.н.: Вибронные взаимодействия в комплексах восьми координированных примесных d-ионов: изучение методами ЭПР и ДЭЯР (№ 03-02-96207)
4. Файзрахманов И.А., к.ф.-м.н.: Влияние допирующей примеси на колебательный спектр, оптические и электрические свойства графеновых наноструктур (№ 03-02-96217)
5. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Разработка научных основ новой технологии получения драгоценных камней путем имплантации ионов различных хромофоров в бесцветные кристаллы минералов (№ 03-02-96207)
6. Шакуров Г.С., к.ф.-м.н.: Спектроскопические свойства кристалла $KPb_2Cl_5:Tb$ – перспективного материала квантовой электроники (№ 03-02-96243)

Международные гранты

1. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: От монокристаллических соединений к новым полиметаллическим супрамолекулярным архитектурам и магнетикам на молекулярной основе. Проект INTAS № 2000-00375
2. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Идентификация и функциональное изучение генов, экспрессирующихся в поведенчески идентифицированных нейронах улиток. Проект INTAS № 01-2117
3. Петухов В.Ю., д.ф.-м.н.: Разработка иммунохимических и физических тест-систем для экспресс-диагностики и прогнозирования радиационных поражений. Грант МНТЦ № 1901
4. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Исследование и разработка многоканальной оптической памяти и фотонного эхо-процессора на основе оптических переходных процессов в протяженных резонансных средах, охлаждаемых лазерным излучением. Грант МНТЦ № 2121

Региональные программы

Республиканская целевая программа “Обеспечение медицинских учреждений Республики Татарстан магнитно-резонансными томографами на 2003–2005 гг.”

Салихов К.М., член-корр. РАН, директор программы;
Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н., отв. исполнитель

Конкурс фонд НИОКР Республики Татарстан

1. Аминова Р.М., д.ф.-м.н.: Разработка методов квантовой и фемто-химии для управления фотохимической реакцией перегруппировки атомов в нитронах (№ 06-6.3-154)

2. Андрианов В.В., к.ф.-м.н.: Создание ионоселективных мембран для многофункциональной, пакетной ионометрической системы (№ 06-6.6-148)
3. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.: Исследование процессов импульсного лазерного синтеза тонкопленочных слоев силицидов железа (№ 06-6.4-159)
4. Богданова Х.Г., д.ф.-м.н.: Исследование структурных и магнитных фазовых переходов в магнитных полупроводниках типа $La-Sr-Mn-O$, обладающих эффектом колоссального магнитосопротивления, методами высокочастотной ультразвуковой спектроскопии (№ 06-6.1-146)
5. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.: Сканирующая силовая спектроскопия нанокомпозитов микрообъектов (№ 06-6.3-120)
6. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: Исследование возможности создания новых молекулярных систем с заданными свойствами на основе многоядерных смешанных кластеров с 3f-4d взаимодействием (№ 06-6.3-223)
7. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Разработка методов диагностики инфаркта миокарда на основе определения ЭПР сигналов NO-радикалов и парамагнитных комплексов железа (№ 06-6.6-225)
8. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Исследование возможности создания спинового клапана на основе мультислоев сверхпроводник/ферромагнетик (№ 06-6.2-126)
9. Гончаров В.А., к.ф.-м.н.: Создание высокочувствительного магнитометра (№ 06-6.6-197)
10. Горюнов Ю.В., к.ф.-м.н.: Реализация и исследование сверхпроводниковых микроструктур, функционирующих на основе эффекта близости и андреевской блокады проводимости по выделенному спиновому каналу (№ 06-6.2-215)
11. Зарипов М.М., д.ф.-м.н.: Вибронные взаимодействия в комплексах восьмикратно координированных примесных d-ионов: изучение методами ЭПР и ДЭЯР (№ 06-6.1-219)
12. Ильясов А.В., д.ф.-м.н.: Разработка методов ранней диагностики заболеваний человека на основе магнитной радиоспектроскопии и подавления злокачественных образований (№ 06-6.6-176)
13. Кессель А.Р., д.ф.-м.н.: Разработка схем экспериментальной реализации процессоров и алгоритмов для квантового компьютера, функционирующего на многоспиновых и мезоскопических системах, квадрупольных ядрах спина $I \geq 3/2$ (№ 06-6.1-158)
14. Коновалов А.А.: Исследование редкоземельных ионов Ho^{3+} в неупорядоченных материалах методом высокочастотной ЭПР спектроскопии (№ 06-6.1-201)
15. Коробченко Л.В.: Исследование природы ферромагнитного межмолекулярного взаимодействия в супрамолекулах с р-р связью через ароматические лиганды (№ 06-6.1-128)
16. Куковицкий Е.Ф.: Синтез нанотрубного углерода на поверхности металлического никеля, каталитически

- активированного ионной бомбардировкой (№ 06-6.4-224)
17. Мурсалимов Л.Р.: Исследование роли обменного взаимодействия в формировании эффекта химической поляризации ядер (№ 06-6.3-226)
18. Несмелова И.М.: Изучение влияния технологических режимов на электрофизические и структурные свойства эпитаксиальных слоев тройных твердых растворов кадмий-ртуть-теллур и марганец-ртуть-теллур (№ 06-6.1-206)
19. Овчинников И.В., д.ф.-м.н.: Спин-переменные жидкие кристаллы (№ 06-6.2-196)
20. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Спектроскопические исследования механизмов образования носителей тока в полимерах полупроводниковых композитов, активированных фуллеренами и другими добавками (№ 06-6.3-155)
21. Таланов Ю.И., д.ф.-м.н.: Разработка методов повышения критических токов тонкопленочных высокотемпературных сверхпроводников путем создания искусственных дефектов (№ 06-6.2-234)
22. Тарасов В.Ф., д.ф.-м.н.: Исследование димеров редкоземельных ионов в синтетическом форстерите (№ 06-6.1-143)
23. Файзрахманов И.А., к.ф.-м.н.: Влияние допирующей примеси на колебательный спектр, оптические и электрические свойства графеновых наноструктур (№ 06-6.4-208)
24. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.: Оптико-магнитная спектроскопия (ЭПР, ДЭЯР, ОДМР) редкоземельных и актинидных ионов во вторичных материалах (№ 06-6.1-246)
25. Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н.: Исследование *in situ* зародышеобразования локальной жидкостной фазы на поверхности полупроводников при мощных импульсных фотонных обработках (№ 06-6.4-240)
26. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Разработка научных основ новой технологии получения драгоценных камней путем имплантации ионов различных хромофоров в бесцветные кристаллы минералов (№ 06-6.4-162)
27. Цейтлин М.П., к.ф.-м.н.: Реализация высокочувствительных методов регистрации короткоживущих частиц (№ 06-6.3-138)
28. Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н.: Исследование физических свойств периодических магнитоупругих дифракционных решеток, индуцированных акустическими полями в легкоплоскостных антиферромагнетиках методами оптической и ультразвуковой спектроскопии (№ 06-6.1-189)
29. Шакуров Г.С., к.ф.-м.н.: Спектроскопические свойства кристалла $KPb_2Cl_5:Tb$, перспективного материала квантовой электроники (№ 06-6.1-239)

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, вошедшие в отчет о деятельности РАН в 2002 году

Физика конденсированных сред

Физика магнитных явлений

Создан виртуальный магнитный силовой микроскоп на базе персонального компьютера, позволяющий проводить компьютерный эксперимент по моделированию магнитных изображений от ферромагнитных микро- и нанообъектов, помещенных во внешнее магнитное поле. (КФТИ КазНЦ РАН)

Предложен алгоритм ЭПР томографии в средах с проводимостью и диэлектрическими потерями, позволивший осуществить визуализацию скин-эффекта. (КФТИ КазНЦ РАН)

Публикации сотрудников института

Монографии

1. Shlyannikov V.N.: Elastic-plastic mixed-mode fracture criteria and parameters. Berlin-Heidelberg-New York: Springer 2003. 246 p.
2. Гайнутдинов Х.Л., Голубев А.И., Звездочкина Н.В.: Локомоторная активность при фармакологических нарушениях дофаминергической системы мозга. Сравнительное исследование: позвоночные и беспозвоночные животные. Казань: КГУ 2003. 69 с.
3. Калачев А.А., Самарцев В.В.: Когерентные явления в оптике. Казань: КГУ 2003. 281 с.
4. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Твердотельный оптический рефрижератор: проблемы и ожидания. Казань: КГУ 2003. 183 с.

Сборники

1. Бородай В.Г., Голубев Н.В., Голованов А.И., Паймушин В.Н., Пискунов А.А., Рогов Н.В., Швецов В.А.: Математическое моделирование в мостостроении с приложением к реконструкции моста через р. Казанку и проектированию и строительству моста через р. Кама у с. Сорочьи Горы. Казань 2003. 460 с.
2. Салахов М.Х., Самарцев В.В. (ред.): Когерентная оптика и оптическая спектроскопия. Сб. стат. VII Всерос. молодежной науч. школы. 30 октября–1 ноября 2003. Казань: КГУ 2003. 408 с.
3. Салихов К.М. (ред.): Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского 2002. Ежегодник. Казань: ФизтехПресс 2003. 235 с.

Переводы книг иностранных авторов

1. Самарцев В.В. (ред. перевода): Скалли М.О., Зубайри М.С.: Квантовая оптика. М.: Физматлит 2003. 512 с.

Статьи

1. Altshuler T.S., Gorjunov Yu.V., Bresler M.S., Iga F., Takabatake T.: Ion pairs and spontaneous break of symmetry in the valence-fluctuating compound YbB_{12} . *Phys. Rev. B* **68**, 014425(1–7) (2003)
2. Anikeenok O.A., Augustyniak-Jablokow M.A., Ivanova T.A., Reiche P., Uecker R., Yablokov Yu.V.: Supertransferred hyperfine interactions in layer $\text{LaSrGa}_{0.995}\text{Cu}_{0.005}\text{O}_4$. *Physica B* **325**, 246–255 (2003)
3. Bayazitov R.M., Khaibullin I.B., Batalov R.I., Nurutdinov R.M., Antonova L.Kh., Aksenov V.P., Mikhailova G.N.:

- Structure and photoluminescent properties of SiC layers on Si, synthesized by pulsed ion-beam treatment. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* **206**, 984–988 (2003)
4. Bimbo G., Boscaino R., Cannas M., Gelardi F.M., Shakhmuratov R.N.: Stimulated nutation echo: application to the driven decoherence study. *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, no. 24, 4215–4228 (2003)
5. Bukharaev A.A., Mozhanova A.A., Nurgazizov N.I., Ovchinnikov D.V.: Measuring local elastic properties of cell surfaces and soft materials in liquid by atomic force microscopy. *Phys. of Low-Dim. Struct.* **3/4**, 31–38 (2003)
6. Cherkasov F.G., L'vov S.G., Tikhonov D.A., den Hartog H.W., Vainshtein D.I.: Ground state of metallic nanostructures in heavily-irradiated NaCl-KBF_4 . *Radiation Effects and Defects in Solids* **157**, 643–647 (2003)
7. Coussement R., Shakhmuratov R., Neyens G., Odeurs J.: Quantum optics with gamma radiation. *Europhys. News* **34/5**, 190–194 (2003)
8. Epstein O.I., Beregovoy N.A., Starostina M.V., Shtark M.B., Gainutdinov Kh.L., Gainutdinova T.Kh., Muhammedshina D.I.: Membrane and synaptic effects of anti-S-100 are prevented by the same antibodies in low concentrations. *Frontiers in Bioscience* **8**, 79–84, (2003)
9. Eremina R.M., Eremin M.V., Glazkov V.N., Krug von Nidda H.-A., Loidl A.: Anisotropic exchange interactions in CuGeO_3 probed by electron spin resonance spectroscopy. *Phys. Rev. B* **68**, 014417(1–10) (2003)
10. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M., Bill H., Lovy D.: EPR and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in CaF_2 and SrF_2 . *J. of Luminescence* **102-103**, 239–242 (2003)
11. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M.: EPR and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in SrF_2 and BaF_2 . An analysis of distortions of the crystal lattice near Yb^{3+} . *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 2833–2847 (2003)
12. Gainutdinova T.Kh., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L.: Electrophysiological studies of the effects of 5,6-dihydroxytryptamine on the acquisition of a conditioned defensive reflex in snails. *Neurosci. and Behavioral Physiol.* **33**, 623–627 (2003)
13. Ganeev R.A., Rysanyansky A.I., Stepanov A.L., Usmanov T.: Nonlinear optical susceptibilities of copper- and silver-doped silicate glasses in the ultraviolet range. *Phys. Stat. Sol. B* **238**, R5–R7 (2003)
14. Garifyanov N.N., Vavilova E.L.: High temperature magnetic anomalies in Na_2WO_3 single crystals at low sodium content. *Physica C* **383**, 417–420 (2003)
15. Gnezdilov O.I., Mambetov A.E., Obynochny A.A., Salikhov K.M.: Time-resolved EPR study of electron spin polarization and spin exchange in mixed porphyrin-stable free radical solutions. *Appl. Magn. Reson.* **25**, 157–198 (2003)

16. Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B.: Pseudogap behavior of nuclear spin relaxation in high T_c superconductors in terms of phase separation. *New Challenges in Superconductivity* (Ashkenazi J., ed.). Nato Science Series. New York: Kluwer Academic Publishers 2004 (in press)
17. Güner S., Rameev B.Z., Aktas B.: ESR study on YBiPt compound doped by Er^{3+} and Gd^{3+} . *J. MMM* **258-259**, 372–375 (2003)
18. Güner S., Rameev B.Z., Aktas B.: ESR studies on Er^{3+} doped YBiPt compound. *Phys. Stat. Sol. B* **236**, 645–650 (2003)
19. Heinrich M., Krug von Nidda H.-A., Krimmel A., Loidl A., Eremina R.M., Ineev A.D., Kochelaev B.I., Prokofiev A.V., Assmus W.: Structural and magnetic properties of CuSb_2O_6 probed by ESR. *Phys. Rev. B* **67**, 224418(1–8) (2003)
20. Horsch P., Khaliullin G., Oles A.M.: Dimerization versus orbital moment ordering in a Mott insulator YVO_3 . *Phys. Rev. Lett.* **91**, no. 25, 257203(1–4) (2003)
21. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Superradiant source of squeezed light. *Laser Physics* **13**, no. 12, 1562–1566 (2003)
22. Kalinkin A.A., Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Polarization properties of pure and triggering superradiance in $\text{LaF}_3\text{:Pr}^{3+}$ -crystal. *Laser Physics* **13**, no. 10, 1313–1318 (2003)
23. Karamyshev S.B., Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: On laser heterodyning structure reconstruction from coherence for remote thermal sources. *Laser Physics* **13**, no. 8, 1030–1033 (2003)
24. Kataev V., Baier J., Muller A., Jongen L., Meier G., Freimuth A.: Orbital order in the low-dimensional quantum spin system TiOCl probed by ESR. *Phys. Rev. B* **68**, 140405(4) (2003)
25. Khaibullin R.I., Lopatin O.N., Vagizov F.G., Bazarov V.V., Bakhtin A.I., Khaibullin I.B., Aktas B.: Coloration of natural beryl by iron ion implantation. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. Sect. B* **206**, no. 1-4, 277–281 (2003)
26. Khaibullin R.I., Rameev B.Z., Popok V.N., Zheglov E.P., Kondyurin A.V., Zhikharev V.A., Aktas B.: An influence of the viscosity of polymer substrate on ion beam synthesis of iron granular films. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. Sect. B* **206**, no. 1-4, 1115–1119 (2003)
27. Kondyurin A.V., Khaybullin R.I., Gavrilo N.V., Popok V.N.: Impulse and continuous ion beam treatment of polyethylene. *Vacuum* **68**, no. 4, 341–347 (2003)
28. Kukovitsky E.F., L'vov S.G., Sainov N.A., Shustov V.A.: CVD growth of carbon nanotube films on nickel substrates. *Appl. Surf. Sci.* **215**, 201–208 (2003)
29. Lobkov V.S., Moiseev S.A., Nikiforov V.G., Salikhov K.M., Dunaev D.M.: Molecular dynamics of benzonitrile and dichlorobenzene investigated by femtosecond optical kerr effect. *Laser Physics* **13**, no. 9, 1138–1142 (2003)
30. Madalan A.M., Voronkova V., Galeev R., Korobchenko L., Magull J., Roesky H.W., Andruh M.: Exchange interactions at supramolecular level. Synthesis, crystal structure, magnetic properties and EPR spectra of $[\text{Mn}(\text{MAC})(\text{TCNQ})_2]$ (MAC = pentaaza macrocyclic ligand; $\text{TCNQ}^{\cdot-}$ = the radical anion of 7,7,8,8-tetracyano-*p*-quinodimethane). *Eur. J. Inorg. Chem.* **2003**, 1995–1999.
31. Madalan A.M., Kravtsov V., Simonov Yu.A., Voronkova V., Korobchenko L., Andruh M.: A unique diamondoid network resulted from the convolution of π - π stacking and lipophilic interactions. *Chem. Comm.* (2004) in press.
32. Mamin R.F., Migachev S.A., Sadykov M.F., Zverev D.G.: Localized charges and model of relaxor. *Ferroelectrics* **283**, 97–107 (2003)
33. Mamin R.F., Migachev S.A., Nikitin S.I., Sadykov M.F., Zverev D.G.: Charge localization in the model of relaxor ferroelectrics. *Ferroelectrics* **296**, 157–167 (2003)
34. Mamin R.F., Migachev S.A., Nikitin S.I., Sadykov M.F., Zverev D.G.: Optical properties and model of relaxor ferroelectrics. *Ferroelectrics* **291**, 101–109 (2003)
35. Mikailov F.A., Rameev B.Z., Kulibekov A.M., Senturk E., Aktas B.: EPR study of the structural phase transitions in chromium doped thallium indium disulphide. *J. MMM* **258-259**, 419–422 (2003)
36. Moiseev S.A., Ham B.S.: Quantum memory with efficient multipulse reading: laser manipulations with a stored photon. *Phys. Rev. A* (2004) in press.
37. Moiseev S.A., Tarasov V.F., Ham B.S.: Quantum memory photon echo-like techniques in solids. *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* no. 5, S497–S502 (2003)
38. Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A.: The computer analysis of MFM images of separate ferromagnetic nanoparticles. *Proc. of XII Int. Conf. on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy*, Eindhoven 2003 (Koenraad P.M., Kemerink M., eds.), AIP Conference Proceedings, vol. 696, pp. 634–640. Melville, New York: AIP 2003.
39. Osokin D.Ya., Khysnutdinov R.R.: Theory of two-frequency excitation in N-14 NQR. *Appl. Magn. Reson.* **24**, no. 1-2, 145–156 (2003)
40. Osokin D.Ya., Khysnutdinov R.R., Shagalov V.A.: Two-frequency multiple-pulse sequences in nitrogen-14 nuclear quadrupole resonance. *Appl. Magn. Reson.* **25**, no. 3-4, 145–156 (2003)
41. Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Laser cooling of active media in solid-state laser. *Laser Physics* **13**, no. 10, 1290–1296 (2003)
42. Petukhov V.Yu., Ibragimova M.I., Muller R., Khabibullina N.R., Zheglov E.P., Bukharaev A.A.: Magnetic properties of thin metal-polymer films obtained by implantation of Fe and Co ions into PET. *J. MMM* (2004) in press.
43. Popok V.N., Khaibullin R.I., Toth A., Beshliu V., Hnatowicz V., Mackova A.: Compositional alteration of polyimide under high fluence implantation by Co^+ and Fe^+ ions. *Surface Science* **532-535**, 1034–1039 (2003)
44. Rameev B.Z., Yilgin R., Aktas B., Gupta A., Tagirov L.R.: FMR studies of CrO_2 epitaxial thin films. *Microelectronic Engineering* **69**, 336–340 (2003)
45. Rameev B.Z., Yildiz F., Aktas B., Okay C., Khaibullin R.I., Zheglov E.P., Pivin J.C., Tagirov L.R.: Ion synthe-

- sis and FMR studies of iron and cobalt nanoparticles into polyimides. *Microelectronic Engineering* **69**, no. 2-4, 330–335 (2003)
46. Rameev B.Z., Yildiz F., Tagirov L.R., Aktas B., Park W.K., Moodera J.S.: ESR study of Co doped TiO₂ thin films. *J. MMM* **258-259**, 361–364 (2003)
 47. Reinholdt A., Detemple R., Stepanov A.L., Weirich T.E., Kreibitz U.: Novel nanoparticle matter: ZrN-nanoparticles. *Appl. Phys. B* **77**, 681–686 (2003)
 48. Salikhov K.M.: Mechanism of the excited triplet states electron spin polarization caused by the mutual annihilation of triplet states. *Appl. Magn. Reson.* **26**, no. 1-2, (2004) in press.
 49. Salikhov K.M.: Potentials of electron paramagnetic resonance to study Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm pairs. *Appl. Magn. Reson.* **25**, 261–276 (2003)
 50. Salikhov K.M., Pushkar Yu.N., Golbeck J.H., Stehlik D.: Interpretation of multifrequency transient-EPR spectra of the P₇₀₀⁺A₀Q_K⁻ state in photosystem I complexes using a sequential correlated radical pair model: wild type versus A₀ mutants. *Appl. Magn. Reson.* **24**, no. 3-4, 467–482 (2003)
 51. Samartsev V.V., Shegeda A.M., Shkalikov A.V., Zuikov V.A.: Detection of satellites of primary photon-echo in ruby. *Laser Physics* **13**, no. 12, 1487–1490 (2003)
 52. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Adiabatic-following criterion, estimation of the nonadiabatic excitation fraction and quantum jumps. *Phys. Rev. A* **68**, 043802(1–13) (2003)
 53. Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Coussemont R., Szabo A.: Dark and bright states of the coherently excited three-level atom. *Laser Physics* **14**, no. 1, 1–12 (2003)
 54. Shaposhnikova T., Talanov Yu., Vashakidze Yu.: Origin of the irreversible microwave absorption versus the state of vortex matter in Bi₂Sr₂CaCu₂O_x single crystals. *Physica C* **385**, no. 3, 383–392 (2003)
 55. Shegeda A.M., Lisin V.N.: Time-resolved photo-phonon spectroscopy of exchange coupled Cr³⁺-pairs in ruby. *Письма в ЖЭТФ* **78**, вып. 11-12, 1247–1250 (2003)
 56. Shtyrkov E.I., Klimovitskii A., den Hartog H.W., Vainshtein D.I.: Investigation of inelastic light scattering in heavily electron-irradiated alkali halides. *Radiation Effects and Defects in Solids* **158**, 125–129 (2003)
 57. Sirker J., Khaliullin G.: Entropy driven dimerization in a one-dimensional spin-orbital model. *Phys. Rev. B* **67**, 100408(1–4) (2003)
 58. Solovarov N.K.: Algorithm of reduction. *arXiv:quant-ph/0304142* (2003)
 59. Solovarov N.K.: Correlation or decoherence quantum beats of atomic inversion in a resonant coherent field. *JETP Lett.* **78**, no. 5, 267–271 (2003)
 60. Sorai M., Sato K., Nakamoto T., Ikeda M., Galyametdinov Yu., Galyametdinova I., Eidenschik R., Haase W.: Calorimetric study of the cubic mesogen, ACBC(16). *Liquid Crystals* **30**, no. 7, 861–869 (2003)
 61. Stepanov A.L.: Modification of implanted metal nanoparticles in the dielectrics by high-power laser pulses. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **4**, 46–60 (2003)
 62. Stepanov A.L., Ganeev R.A., Rysanyansky A.I., Usmanov T.: Nonlinear optical properties of metal nanoparticles implanted in silicate glass. *NIMB* **206**, 624–628 (2003)
 63. Stepanov A.L., Ganeev R.A., Rysanyansky A.I., Usmanov T.: Optical nonlinearity of copper nanoparticles synthesized by ion implantation in silicate glass. *Reviews of short notes at Nanomeeting in Minsk (Belarus, 2003). Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures*, pp. 155–159. London: World Scientific 2003.
 64. Stepanov A.L., Popok V.N.: Synthesis of Cu nanoparticles in Al₂O₃ by ion implantation and subsequent laser annealing. *XVII Int. Conf. on the Application of Accelerators in Research and Industry. Deton 2002*, pp. 601–604. Deton 2003.
 65. Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Garipov B.M.: Giant magnetoresistance in quantum magnetic contacts. *J. MMM* **258-259**, 61–66 (2003)
 66. Teitelbaum G.B., Kataev V.E., Kukovitskii E.F., Vavilova E.L., Kuhns P., Reyes A.P., Moulton W.: Interplay between the magnetic fluctuations and superconductivity in the lanthanum cuprates. *Письма в ЖЭТФ* **78**, 1242–1246 (2003)
 67. Terukov E.I., Kudoyarova V.Kh., Batalov R.I., Bayazitov P.M.: A pulsed synthesis of β-FeSi₂ layers on silicon implanted with Fe⁺ ions. *Physica E. Low-Dim. Systems and Nanostructures* **16**, no. 3-4, 370–375 (2003)
 68. Ulanov V.A., Krupski V., Hoffmann S.K., Zaripov M.M.: Effects of hydrostatic pressure and temperature on EPR spectrum of the off-centre Jahn-Teller [CuF₄F₄]⁶⁻ complexes in SrF₂ crystal. *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 1081–1096 (2003)
 69. Voronkova V.K., Galeev R.T., Shova S., Novitchi G., Turta C.I., Caneschi A., Gatteschi D., Lipkowski J., Simonov Yu.A.: Exchange interaction and spin dynamics in pentanuclear clusters [Cu₃Ln₂(ClCH₂COO)₁₂(H₂O)₈]·2H₂O, (Ln^{III} = Nd, Sm, Pr). *Appl. Magn. Reson.* **25**, 227–247 (2003)
 70. Аванесов А.Г., Бадиков В.В., Шакуров Г.С.: Высоко-частотный ЭПР ионов Cr²⁺ в кристалле CdGa₂S₄. *ФТТ* **45**, вып. 8, 1382–1385 (2003)
 71. Акимов А.И., Лебедев С.А., Летко А.К., Иванова Т.А.: Структурные особенности твердых растворов Pr_{2-y}Sr_yNi_xAl_{1-x}O₄. *Вести НАНБ. Сер. физ.-мат. наук* № 3, 87–91 (2003)
 72. Альтшулер Т.С., Бреслер М.С.: ЭПР исследования в кондо-диэлектриках. *Письма в ЖЭТФ* **78**, № 6, 865–874 (2003)
 73. Аминова Р.М., Ермакова Е.А.: Динамические процессы внутримолекулярной перегруппировки с переносом протона в окиси азометина. *Журн. органической химии* (2004) в печати.
 74. Аминова Р.М., Моисеев С.А.: Фемтосекундная динамика молекулы нитрона в первом возбужденном синглетном состоянии. *Тр. Рос. конф. “Структура и динамика молекул”*, с. 153–157. Яльчик 2003.
 75. Анашкин В.Н., Зарипов Р.Н., Васильев Г.И., Скирда В.Д.: Универсальный широкополосный усилитель

- мощности радиочастотных импульсов заданной формы для медицинского ЯМР томографа. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 1, с. 395–398. Йошкар-Ола 2003.
76. Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х., Мухамедшина Д.И., Штарк М.Б., Эпштейн О.И.: Мембранотропные эффекты малых доз антител к белку S-100. Бюл. эксперим. биол. медицины **136**, прил. № 1, 24–27 (2003)
 77. Андрианов В.В., Тагирова Р.Р., Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х., Голубев А.И., Муранова Л.Н.: Влияние 6-гидроксидофамина на электрические характеристики нейронов улитки при долговременной сенситизации. Рос. физиологический журн. им. И. М. Сеченова **89**, 1067–1076 (2003)
 78. Андрух М., Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Коробченко Л.В., Кравцов В., Симонов Ю.А.: Межмолекулярные и внутримолекулярные спиновые взаимодействия в супрамолекулярных соединениях, построенных из димерных фрагментов ионов меди. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 171–174. Йошкар-Ола 2003.
 79. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Андреев Б.А., Крыжков Д.И., Теруков Е.И., Кудоярова В.Х.: Фотолюминесценция в области 1.5 мкм механически обработанных слоев монокристаллического кремния. ФТП **37**, № 12, 1427–1430 (2003)
 80. Баязитов Р.М., Хайбуллин И.Б., Баталов Р.И., Нурутдинов Р.М.: Формирование слоев кубического карбида кремния на кремнии непрерывными и импульсными пучками ионов углерода. ЖТФ **73**, № 6, 82–85 (2003)
 81. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В., Потапов А.В.: Микроскопические неоднородности в кристалле манганита $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$) и генерация на них магнитоупругих колебаний. Письма в ЖЭТФ **78**, вып. 5, 753–756 (2003)
 82. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Королев А.В., Куркин М.И., Розенфельд Е.В.: Особенности температурной зависимости магнитной восприимчивости монокристалла $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$). ФММ **95**, № 1, 43–46 (2003)
 83. Богданова Х.Г., Голенищев-Кутузов В.А., Елохина Л.В., Королев А.В., Нейфельд Э.А., Шакирзянов М.М.: Особенности акустических и магнитных свойств манганитов лантана состава $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$). ФТТ **45**, вып. 2, 284–289 (2003)
 84. Бородин П.А., Бухараев А.А., Рыжиков И.А.: Изучение проводящих свойств микропроводов методами сканирующей зондовой микроскопии. Сб. тр. конф. молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН, с. 10–13. Казань 2003.
 85. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Гатауллин А.М.: ЭПР аквакомплексов Gd^{3+} в застеклованных водных растворах и адсорбированных на поверхности капилляров. ФТТ **45**, вып. 5, 817–821 (2003)
 86. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Гатауллин А.М., Гумеров Ф.М., Фахрутдинов А.Р.: Структурные изменения и фазовые переходы в водных растворах нитрата гадолиния в процессе их замораживания. ФТТ **45**, вып. 7, 1263–1266 (2003)
 87. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Первова И.Г., Липунова Г.Н., Липунов И.Т., Молочников Л.С.: Комплексы Cu(II) с гетарилформазанами в растворах и ионообменных полимерах. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 190–195. Йошкар-Ола 2003.
 88. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Андреевский кондактанс точечного контакта ферромагнетик/сверхпроводник. Письма в ЖЭТФ **77**, вып. 3, 153–158 (2003)
 89. Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в бислоях сильный ферромагнетик-сверхпроводник. Письма в ЖЭТФ **78**, вып. 9, 1043–1047 (2003)
 90. Воронкова В.К., Коробченко Л.В., Новицкий Г., Шова С., Туртэ К.И.: Обменные взаимодействия и спиновая динамика в пятиядерных смешанных кластерах. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 175–178. Йошкар-Ола 2003.
 91. Гайнуллина Ф.К., Малыхина Л.В., Тинчурина Л.М., Иванова Г.И., Биннеманс К., Галяметдинов Ю.Г.: Жидкокристаллические комплексы лантанидов с перфторалкилсульфатным анионом. Коорд. химия **29**, № 5, 382–386 (2003)
 92. Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Мухамедшина Д.И., Тагирова Р.Р.: Длительность сохранения изменений электрических характеристик командных нейронов при выработке условного оборонительного рефлекса у улитки. Журн. высш. нервн. деят. **53**, № 3, 379–382 (2003)
 93. Гайстер А.В., Жариков Е.В., Коновалов А.А., Субботин К.А., Тарасов В.Ф.: Молекулярная самоорганизация примесных ионов Ho^{3+} в синтетическом форстерите. Письма в ЖЭТФ **77**, вып. 11, 753–758 (2003)
 94. Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Степанов А.Л., Кодиров М.К., Усманов Т.: Нелинейное поглощение силикатных стекол, допированных наночастицами меди, в видимом диапазоне спектра. Квантовая электроника **33**, № 12, 1081–1084 (2003)
 95. Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Степанов А.Л., Кодиров М.К., Усманов Т.: Нелинейное поглощение в диэлектрических слоях, содержащих наночастицы меди. ФТТ **45**, вып. 7, 1292–1296 (2003)
 96. Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Степанов А.Л., Кодиров М.К., Усманов Т.: Нелинейно-оптические свойства композиционных материалов на основе диэлектрических слоев, содержащих наночастицы меди и серебра. Оптика и спектроскопия **95**, № 6, 1034–1042 (2003)
 97. Голованов А.И., Коноплев Ю.Г., Кузнецов С.А.: Развитие исследований по механике деформируемого твердого тела. Сб. тр. "На рубеже веков. НИИ математики и механики им. Н. Г. Чеботарева Казанского государственного университета. 1998–2002 гг.", с. 350–385. Казань: Казанское мат. о-во 2003.

98. Голованов А.И., Кузнецов С.А.: Комбинированная Лагранжево-Эйлерова постановка в исследовании больших деформаций термовязкоупругопластических тел. "Современные проблемы механики и прикладной математики". Материалы Междунар. школы-семинара, с. 78–91. Воронеж 2003.
99. Голованов А.И., Шигабутдинов А.Ф.: К расчету свободных колебаний тонкостенных конструкций. Тр. XIII межвузовской конф. "Математическое моделирование и краевые задачи", ч. 1, с. 28–32. Самара 2003.
100. Домрачева Н.Е., Овчинников И.В., Туранов А.Н., Латтерманн Г.: Аномалии магнитного поведения резко охлажденного мезогена храма. ФТТ **45**, вып. 4, 753–755 (2003)
101. Калинин А.А., Калачев А.А., Зиновьев П.В., Силева Н.Б., Самарцев В.В.: Поляризационная "развязка" оптического сверхизлучения от накачки в кристалле дифенила с пиреном. Сб. "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), с. 227–234. Казань: КГУ 2003.
102. Калинин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Квантовый усилитель слабых оптических сигналов и одиночных фотонов в режиме триггерного сверхизлучения. Сб. "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), с. 357–364. Казань: КГУ 2003.
103. Киселева Л.А., Фролова Е.Н., Нагулин К.Ю., Албикина Н.В.: Особенности сорбции ионов Cu^{2+} хитин-глюкановым комплексом гриба *pleurotus ostreatus*. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 2, с. 242–245. Йошкар-Ола 2003.
104. Коробченко Л., Галеев Р.: Исследования методом ЭПР межмолекулярных взаимодействий в супрамолекулярных соединениях, построенных из комплексов двухвалентных ионов группы железа. Тр. VII Рос. молодежной науч. школы "Актуальные проблемы магнитного резонанса. Новые аспекты применения магнитного резонанса", с. 121–124. Казань 2003.
105. Мамбетов А.Е., Гнездилов О.И., Салихов К.М.: Эмуляция время-разрешенных спектров ЭПР триплетных молекул. Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 311–314. Йошкар-Ола 2003.
106. Мамин Р.Ф.: Феноменологическая модель релаксоров. Изв. АН. Сер. физ. **67**, вып. 8, 1157–1160 (2003)
107. Мамин Р.Ф., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Лунев И.В., Изотов В.В., Гусев Ю.А.: Фотостимулированные явления в релаксорах. Письма в ЖЭТФ **78**, вып. 11, 1232–1236 (2003)
108. Моисеев С.А.: Квантовая память на основе фотонного эха в трехуровневых оптически плотных средах с X-конфигурацией атомных переходов. Оптика и спектроскопия **94**, № 5, 847–855 (2003)
109. Моисеев С.А., Никифоров В.Г.: Радиочастотная депolarизация мюона в системе мюоний + ядерный спин. ЖЭТФ **124**, № 6(12), 1244–1254 (2003)
110. Моисеев С.А., Носков М.И.: Квантовая фемтосекундная динамика димеров типа Na_2 в технике pump-probe спектроскопии оптически плотных сред. Сб. "Новейшие проблемы теории поля" (Аминова А.В., ред.), с. 289–304. Казань 2003.
111. Моисеев С.А., Носков М.И.: Техника квантовой памяти на основе фотонного эха в газах. Оптика и спектроскопия **95**, № 5, 784–790 (2003)
112. Муранова Л.Н., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х., Силантьева Д.И.: Влияние хронического введения галоперидола на электрические характеристики командных нейронов виноградной улитки. Бюл. эксперим. биол. медицины **136**, № 9, 248–251 (2003)
113. Мухамедшина Д.И.: Роль вне- и внутриклеточных ионов Ca^{2+} в функционировании нейрональной мембраны при обучении. Сб. тр. конф. молодых ученых КФТИ КазНЦ РАН, с. 26–31. Казань 2003.
114. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение полупроводников. Сб. "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), с. 365–370. Казань: КГУ 2003.
115. Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Пеньков И.Н., Анашкин В.Н., Невзоров Н.А.: Особенности распределения электронной плотности в аурипегменте As_2S_3 . Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 157–160. Йошкар-Ола 2003.
116. Салихов К.М., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Аминов К.Л., Анашкин В.Н., Шагалов В.А.: Низкополевой медицинский магнитно-резонансный томограф "ТМР-0.06-КФТИ". Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 1, с. 388–391. Йошкар-Ола 2003.
117. Соловаров Н.К.: Коррелированность или декогеренция? Квантовые биения инверсии атома в когерентном резонансном поле. Письма в ЖЭТФ **78**, вып. 5, 713–717 (2003)
118. Степанов А.Л., Попок В.Н.: Влияние плотности ионного тока на формирование наночастиц металла в диэлектрике при имплантации. Письма в ЖТФ **29**, вып. 23, 20–25 (2003)
119. Туранов А.Н., Овчинников И.В., Малкин Б.З.: Псевдоконтактные химические сдвиги в ^1H ЯМР спектрах мезогенных комплексов РЗЭ растворенных в CDCl_3 . Сб. "Структура и динамика молекулярных систем", вып. X, т. 3, с. 32–35. Йошкар-Ола 2003.
120. Уланов В.А., Аникеев О.А., Зарипов М.М., Фазлижанов И.И.: Электронная структура нецентрального комплекса двухвалентной меди в кристалле SrF_2 по данным ЭПР и ДЭЯР. ФТТ **45**, вып. 10, 1814–1817 (2003)
121. Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П., Еремина Р.М.: Тримеры примесных двухвалентных ионов меди в кристаллах CaF_2 : структура и механизм образования. ФТТ **45**, 71–75 (2003)
122. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Курбатова Н.В., Хайбуллин И.Б., Степанов А.Л.: Синтез новых уг-

- лерод-азотных нанокластеров при термическом отжиге в атмосфере азота алмазоподобных пленок углерода. ФТП **37**, вып. 2, 230–234 (2003)
123. Файзрахманов И.А., Хайбуллин И.Б., Любимов А.И.: Ионно-стимулированная адгезия системы металл-полимер. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 12, 83–88 (2003)
 124. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Степанов А.Л., Хайбуллин И.Б.: Модификация наноструктуры алмазоподобных пленок углерода бомбардировкой ионами ксенона. ФТП **37**, вып. 6, 748–752 (2003)
 125. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Хайбуллин И.Б., Любимов А.И.: Влияние имплантации ионов бора на фазовый состав, микроструктуру и прочностные характеристики пленок алюминия. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 10, 109–112 (2003)
 126. Фалин М.Л., Латыпов В.А., Герасимов К.И., Леушин А.М., Хайдуков Н.М., Калленс Ф., Фрилинк Х., Хофштеттер А.: Двойной электронно-ядерный резонанс Yb^{3+} в монокристаллах Cs_2NaYF_6 и $CsCaF_3$. Сб. тр. VII Рос. молодежн. науч. школы “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” (Тагиров М.С., ред.), с. 158–162. Казань: КГУ 2003.
 127. Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Расчетные исследования прочности и жесткости автомобильных рам семейства “КамАЗ”. Тр. III Междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 261–268. Казань 2003.
 128. Черников С.К., Ашихмин А.Н., Цокур Е.И., Хуснутдинов Р.А.: Исследование гибкого элемента волнового шагового двигателя методом конечных элементов. Тр. III Междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 715–719. Казань 2003.
 129. Черников С.К., Никонова И.В.: Объектно-ориентированная парадигма и программная реализация процессора комплекса для анализа конструкций автомобилей МКЭ. Тр. III Междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 254–260. Казань 2003.
 130. Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Варианты четырехзвучного изопараметрического конечного элемента оболочки для расчета автомобильных рам. Тр. III Междунар. конф. “Автомобиль и техносфера”, с. 269–287. Казань 2003.
 131. Шкаликов А.В.: Экспериментальная установка для исследования интерференции четвертого порядка между независимыми бифотонами. Сб. “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), с. 391–395. Казань: КГУ 2003.
 132. Шлянников В.Н., Бойченко Н.В., Ильченко Б.В.: Анализ НДС области вершины трещины в вязкоупруго-пластичном материале при симметричном мягком и жестком нагружении. Изв. ВУЗов. Проблемы энергетики № 11/12, 139–151 (2003)
 133. Шлянников В.Н., Тартыгашева А.М., Ильченко Б.В.: Анализ упруго-пластического состояния вершины трещины при симметричном деформировании. Изв. ВУЗов. Проблемы энергетики № 11/12, 124–138 (2003)
 134. Шлянников В.Н., Чадаев Д.А.: Анализ изменения формы усталостной поверхностной трещины в трубопроводе. Проблемы прочности № 5, 80–92 (2003)

Защиты, награды, государственные стипендии

Защита диссертаций

В 2003 году кандидатские диссертации защитили следующие сотрудники:

1. Базаров Валерий Вячеславович
Синтез и ионно-лучевая модификация алмазоподобных углеродных плёнок
01.04.10 “Физика полупроводников”
2. Галеев Равиль Талгатович
Некоторые спектроскопические проявления спиновых корреляций и переноса когерентности в электронном парамагнитном резонансе
01.04.17 “Химическая физика, в т.ч. физика горения и взрыва”
3. Герасимов Константин Игоревич
Исследование кристаллов гомологического ряда флюорита, активированных ионами трехвалентного иттербия, методами оптической спектроскопии и магнитного резонанса
01.04.11 “Физика магнитных явлений”
4. Туранова Ольга Алексеевна
Жидкокристаллические координационные соединения некоторых β -аминовинилкетонов. Синтез, строение и свойства
02.00.01 “Неорганическая химия”
5. Фазлижанов Ильшат Имаметдинович
Структура и магнитные свойства парамагнитных комплексов примесных восьмикратно координированных ионов меди и титана в кристаллах со структурой флюорита
01.04.11 “Физика магнитных явлений”

Награждения

Почетными грамотами РАН были отмечены: Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н., в.н.с.; Зуйков В.А., к.ф.-м.н., с.н.с.; Воронова Л.В., вед. инженер

Государственные научные стипендии

Лауреатами Государственных научных стипендий для ученых России на 2000–2003 гг. были следующие сотрудники:

в области химии:

- Овчинников И.В., проф., д.ф.-м.н., заведующий лабораторией магнитной радиоспектроскопии

в области физики и астрономии:

- Вишневская Г.П., проф., д.ф.-м.н., г.н.с.
- Гарифуллин И.А., проф., д.ф.-м.н., г.н.с.
- Кессель А.Р., проф., д.ф.-м.н., заведующий лабораторией резонансных явлений
- Самарцев В.В., проф., д.ф.-м.н., заведующий лабораторией нелинейной оптики
- Штырков Е.И., д.ф.-м.н., г.н.с.

Именная стипендия им. Лизы Майтнер от Австрийского научного фонда для проведения исследований в Институте экспериментальной физики и Институте наномасштабных исследований им. Эрвина Шредингера Университета Карла Франценца в г. Граце (Австрия) в 2003 году была присуждена с.н.с. А. Л. Степанову.

Участие сотрудников института в преподавательской деятельности

В 2003 году сотрудники КФТИ, помимо основной научно-исследовательской работы, занимались преподавательской деятельностью в различных ВУЗах г. Казани, где читали следующие учебные курсы:

Ашихмин А.Н., ассист. каф. автомобилей и автомобильного хозяйства КГТУ (КАИ)

- Теория автомобиля

Баязитов Р.М., проф. каф. электропривода и автоматики КГЭУ

- Системы управления и автоматизации

Богданова Х.Г., проф. каф. промышленной электроники КГЭУ

- Информационно-измерительная техника и электроника

Богомолов В.А., ассист. каф. информации и прикладной математики КГТУ (КХТИ)

- Интернет технологии
- Операционные системы

Бренерман М.Х., доц. каф. высшей математики КГТУ (КАИ)

- Математический анализ
- Линейная алгебра

Булатов А.Р., ст. преп. каф. пром. электроники КГЭУ

- Физические основы электроники

Бухараев А.А., преп. каф. хим. физики КГУ

- Атомы и молекулы на поверхности
- Физика поверхности

Вишневская Г.П., проф. каф. хим. физики КГУ

- ЭПР в растворах
- Современные приложения магнитного резонанса

Гайнутдинов Х.Л., преп. лаб. каф. хим. физики КГУ

- Избранные физические вопросы молекулярной биологии

проф. кафедры физиологии человека и животных КГУ

- Нейробиология обучения и памяти

проф. кафедры физиологии КГПУ

- Механизмы памяти
- Психофизиология

Галеев Р.Т., преп. каф. хим. физики КГУ

- Mathematica для решения задач спиновой химии

Галяметдинов Ю.Г., проф. каф. физ. и коллоидной химии КГТУ (КХТИ)

- Физическая химия
- Химия и технология органических веществ

Еремина Р.М., ассист. каф. общей физики КГУ

- Молекулярная физика
- Оптика

Зарипов М.М., проф. каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии КГУ

- Теория спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах

Калачев А.А., ассист. каф. оптики и спектроскопии КГУ

- Квантовая оптика
- Новые физические методы оптической обработки информации

Моисеев С.А., доц. каф. хим. физики КГУ

- Оптическая спектроскопия молекул
- Квантовая оптика

Манатов Р.А., доц. каф. техн. физики КГТУ (КАИ)

- Физика и диагностика поверхности
- Твердотельная электроника

Овчинников Д.В., преп. каф. хим. физики КГУ

- Химическая кинетика и катализ

Петухов В.Ю., проф. каф. физики твердого тела КГУ

- Радиационная физика твердого тела
- Радиационная физика и физика поверхности
- Современные методы экспериментальной физики
- Радиационная физика в медицине

Попов В.А., ассист. каф. теории относительности и гравитации КГУ

- Методы математической физики

Просвирун А.В., доц. каф. хим. кибернетики КГТУ (КХТИ)

- Основы информационных технологий

Садчиков Ю.В., ст. преп. каф. проектирования летательных аппаратов КГТУ (КАИ)

- Проектирование автомобиля

Салихов К.М., проф. каф. хим. физики КГУ

- Современные проблемы химической физики
- Физические основы и техника магнитного резонанса
- Химическая кинетика
- Спиновая химия
- Физические основы химических реакций

Самарцев В.В., проф. кафедры оптики и спектроскопии КГУ

- Проблемы когерентной оптики
- Лазерная спектроскопия

- Новые физические методы оптической обработки информации

- Оптика фемтосекундных лазеров

Соловаров Н.К., доц. каф. общей физики КГПУ

- Общая физика
- Генерация и регистрация электромагнитного излучения

доц. каф. квантовой электроники и магнитной радиоспектроскопии КГУ

- Современные проблемы квантовой оптики

Тарасов В.Ф., проф. каф. пром. электроники КГЭУ

- Информационно-измерительная техника и электроника

Файзрахманов И.А., доц. каф. высш. математики КГТУ (КАИ)

- Высшая математика

Фалин М.Л., доц. каф. общей физики КГПУ

- Электричество
- Молекулярная физика
- Механика
- Оптика

Хамидуллин Б.Ш., ст. преп. каф. информатики и прикл. математики КГТУ (КХТИ)

- Архитектура современных ЭВМ

Черников С.К., проф. каф. проектирования летательных аппаратов КГТУ (КАИ)

- Теория автомобиля

Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ

1. Annual Workshop "Modern Development of Magnetic Resonance", September 17–19, 2003, Kazan
2. IX Международные чтения по квантовой оптике, 12–17 октября 2003, Санкт-Петербург (совместно с Российским государственным педагогическим университетом им. А. И. Герцена)
3. VII Всероссийская молодежная научная школа "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия", 30 октября–1 ноября 2003, Казань (совместно с Казанским государственным университетом)
4. VII Всероссийская молодежная научная школа "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений", 11–13 ноября 2003, Казань (совместно с Казанским государственным университетом)
5. Итоговая научная конференция КазНЦ РАН, 9–16 февраля 2004, Казань
6. Конференция молодых ученых КФТИ 2003, 19–20 февраля 2004, Казань

Программы конференций, организованных институтом

Annual Workshop "Modern Development of Magnetic Resonance"

Eremin I. (Kazan State University, Kazan, Russia), Manske D., Bennemann K.H. (Free University, Berlin, Germany): Normal state spin dynamics in triplet superconductor Sr_2RuO_4 : anisotropy due to spin-orbit coupling

Eremina R.M. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia), Eremin M.V. (Kazan State University, Kazan, Russia), Glazkov V.M., Krug von Nidda H.-A., Loidl A. (Institute für Physik, Universität Augsburg, Augsburg, Germany): Anisotropic exchange interactions in CuGeO_3 probed by EPR

Galeev R.T., Salikhov K.M., Voronkova V.K. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Peculiar spectroscopic manifestations of the exchange interaction of paramagnetic centers with fast relaxing partners

- Gerasimov K.I., Falin M.L., Latipov V.A. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia), Leushin A.M. (Kazan State University, Kazan, Russia): Magnetic resonance and optical spectroscopy of Yb^{3+} ions in fluorite-type crystals
- Hubbell W.L. (University of California, Los Angeles, USA): A nitroxide's view of protein structure and functional dynamics
- Ibragimova M.I., Petukhov V.Yu., Zheglov E.P., Konjukhov G.V., Nizamov R.N. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia), Khan N., Hou H., Swartz H.M. (EPR Center for the Study of Viable Systems, Dartmouth Medical School, Hanover, USA): Plant radiotoxin induced metabolic changes in animals: an ex vivo and in vivo EPR investigation
- Kandrashkin Yu.E. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Light induced electron spin polarization in a strongly coupled triplet-doublet system
- Mambetov A.E., Gnezdilov O.I., Obynochny A.A., Salikhov K.M. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia): Time-resolved EPR study of electron spin polarization exchange in mixed porphyrin triplet-stable free radical solution
- Semashko V.V. (Kazan State University, Kazan, Russia): Reverses of fortune in search of new UV/VUV solid-state active media: role of photodynamic processes
- Tikhonov D.A., Garifullin I.A., Garifianov N.N., Fattakhov M.Z. (Kazan Physical-Technical Institute, Kazan, Russia), Theis-Bröhl K., Westerholt K., Zabel H. (Institute für Experimentalphysik/Festkörperphysik, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Germany): Possible reconstruction of the ferromagnetic state under the influence of superconductivity in epitaxial $\text{V/Pd}_{1-x}\text{Fe}_x$ bilayers
- Lecture of the Zavoisky Awardee 2003:
Hubbell W.L. (University of California, Los Angeles, USA): Watching proteins move with EPR

Конференция молодых ученых КФТИ 2003

Лекции

- Уланов В.А.: Проявления эффекта Яна-Теллера в ЭПР
Лисин В.Н.: Остановка света
- Соловаров Н.К.: Декогеренция, релаксация и квантовая необратимость
- Тагиров Л.Р. (КГУ): Гигантское магнитосопротивление в магнитных наноконтактах
- Сулейманов Н.М.: Вихревая решетка Абрикосова и эффекты пиннинга в сверхпроводниках, содержащих ферромагнитные наноразмерные образования
- Шакуров Г.С.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия твердых тел

Доклады

- Зарипов М.М., Уланов В.А., Жеглов Е.П., Житейцев Е.Р.: Исследование механизмов образования и структура кластеров железа в BaF_2
- Капралов А.В., Булатов А.Р., Потапов А.В.: Генерация когерентных магнитоупругих волн на микронеоднородностях в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$
- Лапаев Д.В., Сафиуллин Г.М., Лобков В.С., Салихов К.М., Галяметдинов Ю.Г., Князев А.А.: Исследование кинетических характеристик люминесценции композитной пленки $\text{PVK:Eu(dk)}_3\text{Vpy}$ с помощью многофункционального автоматизированного оптического спектрометра
- Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Теоретическое исследование поляризации электронных спинов в последовательных радикальных парах в растворах
- Носков М.И.: Влияние дифракции света и движения атомов на качество сохранения информации в технике квантовой памяти на основе эффекта фотонного эха в газах
- Нурутдинов Р.М., Макеев В.А., Мустафин Р.Г.: Импульсный ионный источник с внешним магнитным полем
- Цейтлин М.П., Салихов К.М., Зиятдинов А.М.: Применение метода двумерной пространственно-спектральной ЭПР томографии для изучения сильно анизотропных проводников
- Чукланов А.П., Бухараев А.А.: Восстановление формы зонда shear-force микроскопа, используя тестовые структуры и процедуру деконволюции

Итоговая научная конференция КазНЦ РАН

Пленарное заседание

- Салихов К.М.: Исследования короткоживущих состояний методом времязрешенной ЭПР спектроскопии

Секция физическая

- Альтшулер Т.С., Горюнов Ю.В. (КФТИ КазНЦ РАН), Бреслер М.С. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН), Ига Ф., Такабатаке Т. (Университет г. Хиросимы, Япония): Образование ионных пар и спонтанный слом симметрии в YbB_{12}
- Андрианов В.В., Гайнутдинова Т.Х., Гайнутдинов Х.Л.: Роль биофизических характеристик командных элементов нейронной сети при обучении
- Ахмадуллин И.Ш., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Шакирзянов М.М.: Проявление базисной анизотропии в магнитном двупреломлении звука в гематите
- Баталов Р.И., Баязитов Р.М. (КФТИ КазНЦ РАН), Андреев Б.А., Крыжков Д.И. (Институт физики микроструктур РАН), Торуков Е.И., Кудоярова В.Х. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН): Фотолуминесценция в ближней

- ИК области механически обработанных слоев монокристаллического кремния
- Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Бухараев А.А., Бородин П.А. (КФТИ КазНЦ РАН), Деши И., Котаи Э. (Институт ядерной физики ВАН, Венгрия): Импульсный лазерный отжиг слоев кремния имплантированных ионами железа
- Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В.: Микроскопические неоднородности в манганите $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ и генерация на них магнитоупругих колебаний*
- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Структурные изменения и фазовые переходы в водных растворах нитрата гадолиния в процессе их замораживания*
- Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Осцилляции температуры сверхпроводящего перехода в бислоях сильных ферромагнетик/сверхпроводник*
- Воронкова В.К., Галеев Р.Т. (КФТИ КазНЦ РАН), Шова Р.Т., Новицкий Г., Туртэ К.И. (Институт химии АНМ, Молдова), Канески А., Гатески Д. (Университет г. Флоренции, Италия), Симонов Ю.А. (Институт прикладной физики АНМ, Молдова): Обменные взаимодействия и спиновая динамика в пятиядерных кластерах $[\text{Cu}_3^{\text{II}}\text{Ln}^{\text{III}}(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, ($\text{Ln}^{\text{III}} = \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Pr}$)*
- Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Коробченко Л.В. (КФТИ КазНЦ РАН), Андрух М. (Бухарестский университет, Румыния): Исследования методом ЭПР обменных взаимодействий в супрамолекулярных соединениях, построенных из двухъядерных комплексов ионов меди
- Галеев Р.Т., Фахрутдинов А.Р. (КФТИ КазНЦ РАН), Сайкин К.С. (КГУ), Даутов О.Ш. (КГТУ им. Туполева): Моделирование корректирующей системы для устранения зональных и тессеральных гармоник магнитного поля в большом объеме для системы катушек Гаррета
- Галаяутдинов М.Ф., Курбатова Н.В., Герасимов К.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Антонов Г.П., Шалин П.А., Зайцев В.И. (ТатНИПИнефть): Экологический мониторинг поверхностных и грунтовых вод методом лазерного зондирования флуоресцентных индикаторов*
- Герасимов К.И., Латыпов В.А., Фалин М.Л. (КФТИ КазНЦ РАН), Леушин А.М. (КГУ): Магнитный резонанс и оптическая спектроскопия Yb^{3+} во фторидных кристаллах
- Гнездилов О.И., Мамбетов А.Е., Обычный А.А., Салихов К.М.: Исследование электронной спиновой поляризации и спинового обмена в смешанных растворах порфиринов и свободных радикалов методом время-разрешенной ЭПР спектроскопии*
- Горюнов Ю.В.: Исследование магнитных свойств ультратонких эпитаксиальных бислоев $\text{Fe}(001)$, разделенных несколькими монослоями Cr , методом ФМР
- Горюнов Ю.В.: Наблюдение осцилляций T_c сверхпроводящей гетероструктуры $\text{Phi}/\text{V}/\text{Fe}$, обусловленных осциллирующим спариванием в фрагменте $\text{Phi} = \text{Fe}/\text{Cr}/\text{Fe}$
- Домрачева Н.Е., Овчинников И.В., Туранов А.Н. (КФТИ КазНЦ РАН), Латтерманн Г. (Университет г. Байрота, Германия): О возможном релаксационном магнито-электрическом эффекте в резко охлажденном металломезогене
- Еремина Р.М. (КФТИ КазНЦ РАН), Хенрик М., Круг фон Нидде Х.-А., Лойдл А. (Университет г. Аугсбурга, Германия): Структурные и магнитные свойства CuSb_2O_6 , исследованные методом ЭПР
- Ибрагимов М.И., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П.: Ex vivo ЭПР исследования метаболических изменений в тканях органов мышей при введении растительных радиотоксинов
- Калачев А.А., Калинин А.А., Самарцев В.В. (КФТИ КазНЦ РАН), Зиновьев П.В., Силаева Н.Б. (ФТИНТ АН Украины): Поляризационные свойства оптического сверхизлучения в кристалле дифенила с пиреном*
- Контуров С.В., Лобков В.С., Сафиуллин Г.М.: Модернизация фемтосекундного лазерного спектрометра
- Лапаев Д.В., Сафиуллин Г.М., Лобков В.С.: Люминесцентная установка и люминесцентная спектроскопия полимерных композитных пленок
- Мамин Р.Ф., Мигачев С.А., Садыков М.Ф.: Фотоиндуцированные явления в релаксаторах*
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Влияние дифракции света и движения атомов на качество сохранения информации в технике квантовой памяти на основе эффекта фотонного эха в газах*
- Нургазизов Н.И., Бухараев А.А., Аминова Р.М., Овчинников Д.В.: Изучение растворения имплантированного диоксида кремния
- Осокин Д.Я., Хуснутдинов Р.Р.: Двухчастотное облучение в ЯКР. Новые приложения
- Салихов К.М.: Новый механизм поляризации спинов триплетных состояний, связанный с триплет-триплетной аннигиляцией
- Соловаров Н.К.: Алгоритм редукции: коррелированность вместо декогеренции
- Степанов А.Л., Файзрахманов И.А.: Особенности оптического поглощения композитных слоев на основе полимера с металлическими наночастицами, синтезированными ионной имплантацией
- Таланов Ю.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Адриан Х., Бассет М., Якоб Г. (Университет им. И. Гутенберга, Германия), Вирт Г. (Научный центр "Ускоритель тяжелых ионов", Германия): Влияние колончатых дефектов на поверхностный барьер и линию необратимости тонких сверхпроводящих пленок Bi-2212
- Уланов В.А., Зарипов М.М., Фазлижанов И.И. (КФТИ КазНЦ РАН), Аникиенко О.А. (КГУ): Электронная структура нецентрального комплекса меди в кристалле SrF_2 по данным ЭПР и ДЭЯР
- Фаттахов Я.В., Галаяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В.: Динамика твердофазной эпитаксиальной кристаллизации и образования жидкой фазы на поверхности имплантированного кремния

- Хамзин А.А., Кессель А.Р., Нигматуллин Р.Р., Яковлева Н.М.: Модель равноспиновых взаимодействий: термодинамика и спектр
- Черкасов Ф.Г., Львов С.Г. (КФТИ КазНЦ РАН), ден Хартог Х., Вайнштейн Д. (Университет г. Гронингена, Нидерланды): Изучение плавления частиц натрия в сильно облученных кристаллах NaCl-KBF_4 методами ЭПР на электронах проводимости и ДСК
- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Высокопроизводительный кластер на базе процессоров Athlon-XP
- Черников С.К., Ашихмин А.Н., Кулыгина А.Б.: Расчетные исследования рам автомобилей семейства КамАЗ
- Черников С.К., Никонова И.В.: Комплекс программ для анализа прочности и жесткости конструкций
- Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Некоторые результаты расчетно-экспериментальных исследований автомобильных рам
- Шакуров Г.С. (КФТИ КазНЦ РАН), Малкин Б.З., Закиров А.Р. (КГУ), Охримчук А.Г., Бутвина Л.Н. (Центр волоконной оптики, Институт общей физики РАН), Личкова Н.В., Завгороднев В.Н. (Институт микроэлектронной технологии РАН): Низкосимметричные центры Tb^{3+} в двойном хлориде калия-свинца
- Шегеда А.М., Лисин В.Н.: Времяразрешенная фото-фонная спектроскопия примесных центров в диэлектриках*
- Шлянников В.Н., Ильченко Б.В. (КФТИ КазНЦ РАН), Бойченко Н.В. (КГЭУ): Кинетика НДС в вершине трещины при ползучести

- Шлянников В.Н., Ильченко Б.В. (КФТИ КазНЦ РАН), Тартыгашева А.М. (КГЭУ): Оценка эффекта стеснения в области вершины трещины

Секция физико-технических проблем энергетики

- Алемасов В.Е., Кравцов Я.И. (ОЭ КазНЦ РАН), Бренерман М.Х., Кессель А.Р. (КФТИ КазНЦ РАН): Дискретная модель фильтрации в трещиновато-пористом пласте в условиях внешнего акустического воздействия

Секция физико-химической биологии

- Гайнутдинова Т.Х., Тагирова Р.Р., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Гайнутдинов Х.Л.: Зависимая от белкового синтеза реактивация обстановочного условного рефлекса у виноградной улитки
- Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Гайнутдинов Х.Л., Обычный А.А., Гнездилов О.И., Андрианов В.В.: Определение оксида азота в тканях органов крыс методом ЭПР спектроскопии

* Доклады, отобранные конкурсной комиссией для устного представления на II этапе конкурса научных работ сотрудников КФТИ.

Участие сотрудников в конференциях

Международные конференции

International Conference "Quantum Optics. Workshop-2003", January 22–24 2003, Muju, Korea

- Moiseev S.A., Tarasov V.F.: Quantum memory photon echo technique in solids (oral)

IX Международный симпозиум "Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред", 10–14 февраля 2003, Ярополец, Россия

- Бугаков И.С., Голованов А.И., Митрякин В.И., Павлова Н.В.: Исследования локальной прочности многослойных композиционных конструкций при усталостных испытаниях (устн.)

- Голованов А.И., Кичанов С.П., Луканкин С.А., Паймушин В.Н., Пискунов А.А.: Моделирование механики деформирования сборной железобетонной обделки тоннеля с учетом одностороннего контактного взаимодействия ее блоков через упругие прокладки (устн.)

International Workshop "Scanning Probe Microscopy-2003", March 2–5 2003, Nizhny Novgorod, Russia

- Bukharaev A.A., Borodin P.A., Biziaev D.A.: Investigation of conductive properties of micro- and nanowires using scanning probe microscopy (poster)
- Bukharaev A.A., Mozhanova A.A., Nurgazizov N.I., Ovchinnikov D.V.: Measuring local elastic properties of cell surfaces and soft materials in liquid by atomic force microscopy (oral)

- Mozhanova A.A., Nurgazizov N.I., Bukharaev A.A.: Local elastic properties of biological materials studied by SFM (poster)

*V Международная конференция и выставка
“Цифровая обработка сигналов и её применение”,
12–14 марта 2003, Москва, Россия*

- Айзатуллин О.Ф., Бочкарев В.В., Теплов В.Ю.: Использование сигнального процессора ADSP-2184 в системе управления экспериментом ядерного магнитного резонанса (устн.)

*Annual Meeting of the German Physical Society
“Deutsche Physikalische Gesellschaft”, March 24–28
2003, Dresden, Germany*

- Kataev V., Moller A., Jung W., Schittner N., Kriener M., Freimuth A.: Structural and magnetic properties of a low-dimensional spin magnet in $\text{Cu}_{2/3}\text{V}_{1/3}\text{O}_3$ (poster)
- Reinholdt A., Stepanov A.L., Weirich Th.E., Kreibitz U.: Herstellung und Charakterisierung von Nanopartikel Materie auf der Basis von Nitriden der Titangruppe (oral)

*VII European Conference on Liquid Crystals, April 6–11
2003, Jaca, Spain*

- Knazev A., Galyametdinov Yu., Binnemans K., Haase W.: Synthesis adducts of some substituted diketones of lanthanide with 2,2-dipyridine (poster)
- Selivanova N., Haase W., Galyametdinov Yu.: Organizing rare earth ions with lyotropic liquid crystals (poster)
- Turanova O., Galyametdinov Yu.: Synthesis and liquid crystalline behaviour of β -enaminoketones derivatives containing polar groups and their complexes with copper(II) (poster)

*International Symposium “ESR: New Developments”
dedicated to 65-th anniversary of Prof. Jaek Freed and
40-th anniversary of his EPR research, April 23–26 2003,
Ithaca, USA*

- Salikhov K.M., Gnezdilov O.I., Obnochny A.A., Tseitlin M.P., Tseitlin O.A.: Time-resolved EPR study of electron spin polarization and spin exchange in mixed porphyrin-stable free radical solutions (oral)

*XX International Seminar on Radio- and Microwave
Spectroscopy (RAMIS'03), April 24–26 2003, Poznań,
Poland*

- Vishnevskaya G.P., Frolova E.N.: Variety of metal-polymer structures in ion-exchange on EPR data (poster)

*Argonne National Laboratory seminar, April 30 2003,
Chicago, USA*

- Salikhov K.M., Pushkar Y.N., Golbeck J.H., Stehlik D.: Interpretation of multifrequency transient-EPR spectra of the $\text{P}_{700}^+\text{A}_0\text{Q}_\text{K}^-$ state in photosystem I particles using a sequential correlated radical pair model: wild type versus A_0 mutants (oral)

*XX International Seminar on Modern Magnetic
Resonances, May 6–10 2003, Poznań, Poland*

- Jacyna-Onyszkiewicz I., Ivanova T.A., Augustyniak-Jablokow M., Yablokov Yu.V.: Magnetic centres and structures in some one-dimensional cuprates of the SrCuO_2 type (poster)

*Plenary Meeting of the Inter University Attraction Pool
on Photons (IAP-PHOTON), May 7 2003, Ghent, Belgium*

- Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Electromagnetically induced transparency and slow light (oral)

*Международная конференция “Лазерная физика и
применения лазеров”, 14–16 мая 2003, Минск,
Беларусь*

- Самарцев В.В., Шегеда А.М., Шкаликов А.В., Зуйков В.А.: Обнаружение спутников первичного фотонного эха в рубине (устн.)
- Хасанов О., Русецкий Г., Зуйков В., Калачев А., Самарцев В.: Влияние локального поля на переходные процессы в оптически плотных средах (стенд.)
- Хасанов О., Федотова О., Горбач Б., Зуйков В., Калачев А., Самарцев В.: Угловая эхо-спектроскопия сред с неоднородным уширением спектральных линий (стенд.)

*International Conference Nano Science and Technology,
May 18–21 2003, Groningen, the Netherlands*

- Sugonyako A.V., Vainshtein D.I., Turkin A.A., den Hartog H.W., Bukharaev A.A.: AFM of metallic nanoparticles in heavily irradiated NaCl (poster)

*International Conference “Physics, Chemistry and
Applications of Nanostructures”, May 20–23 2003, Minsk,
Belarus*

- Stepanov A.L., Ganeev R.A., Rysanyansky A.I., Usmanov T.: Optical nonlinearity of copper nanoparticles synthesized by ion implantation in silicate glass (poster)

*VIII International Symposium on Metallomesogens
(ISM 2003), May 28–31 2003, Namur, Belgium*

- Galyametdinov Yu.G.: Magnetic metallomesogens (invited)

*NATO Advanced Research Workshop “Coherent Charge
and Spin Transport on a Nanoscale”, June 8–12 2003,
Chernogolovka, Russia*

- Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.B.: Giant magnetoresistance in magnetic point contacts (poster)

*XXI Международная Чугаевская конференция по
координационной химии, 10–13 июня 2003, Киев,
Украина*

- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Константинов В.Н.: Особенности взаимодействия Gd^{3+} с активными группировками ионов по данным ЭПР (стенд.)

- Галяметдинов Ю.Г.: Синтез и исследование супрамолекулярно-организованных сред на основе лантаноидсодержащих жидких кристаллов (стенд.)
- Матюгичева У.В., Зиятдинова А.Б., Ибрагимова З.З., Сапрыкова З.А., Литвинов И.А., Губайдуллин А.Т., Овчинников И.В.: Синтез, строение и свойства ассоциатов аминных металлокомплексов с дифильными противоионами (стенд.)
- Тинчурина Л.М., Гайнуллина Ф.К., Галяметдинов Ю.Г.: Дипольные моменты и структура мезогенных N-арилсалицилальдиминатов меди (стенд.)
- Туранов А.Н., Овчинников И.В., Малкин Б.З.: Молекулярная магнитная анизотропия некоторых соединений Ln(III) (стенд.)
- Туранова О.А., Туранов А.Н., Просвирин А.В., Галяметдинов Ю.Г.: Биядерные комплексы меди с кооперативными магнитными свойствами (стенд.)
- Яблоков Ю.В., Иванова Т.А.: ЭПР магнитных комплексов Cu(II) и Ni(II) в структурах LnSrBO_4 (Ln = La, Pr; B = Al, Ga) (устн.)

International Workshop “Strongly Correlated Electrons in Nanoscale Devices” (MESO-2003), June 13–14 2003, Chernogolovka, Russia

- Tagirov L.R., Vodopyanov B.P., Efetov K.B.: Giant magnetoresistance in magnetic point contacts (poster)

III Международная конференция “Автомобиль и техносфера”, 16–18 июня 2003, Казань, Россия

- Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Расчетные исследования прочности и жесткости автомобильных рам семейства “КамАЗ” (устн.)
- Черников С.К., Ашихмин А.Н., Цокур Е.И., Хуснутдинов Р.А.: Исследование гибкого элемента волнового шагового двигателя методом конечных элементов (устн.)
- Черников С.К., Никонова И.В.: Объектно-ориентированная парадигма и программная реализация постпроцессора комплекса для анализа конструкций автомобилей МКЭ (устн.)
- Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Варианты четырехузловой изопараметрической конечного элемента оболочки для расчета автомобильных рам (устн.)

Conference on Laser and Electro-Optics/Europe (CLEO/Europe 2003) – International Quantum Electronics Conference (EQEC 2003), June 22–27 2003, Munich, Germany

- Shakhmuratov R., Coussement R., Rostovtsev Y., Odeurs J., Neyens G., Muramatsu H., Gheysen S., Callens R., Vyvey K., Kozyreff G., Mandel P., Kocharovskaya O.: Partial transparency for the single gamma-photon due to quantum interference (oral)
- Stepanov A.L., Quinten M., Kreibig U.: Evaluation of efficiency of optical effective medium theories by comparison with the generalized Mie theory for metal nanoparticles (poster)

XV Международная школа по современным проблемам теоретической и математической физики,

22 июня–3 июля 2003, Казань, Россия

- Моисеев С.А., Носков М.И.: Квантовая память в технике светового эха в газах, влияние движения атомов и дифракционных эффектов распространения света (устн.)

Международная междисциплинарная конференция “Новые биокрибернетические и телемедицинские технологии XXI века для диагностики и лечения заболеваний”, 23–25 июня 2003, Петрозаводск, Россия

- Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Рахматуллина Ф.Ф., Насырова А.Г., Гайнутдинов Х.Л., Зефилов А.Л., Нигматуллина Р.Р., Обычный А.А.: Определение методом ЭПР спектроскопии оксида азота в тканях органов крыс (стенд.)

International Conference of Ion Beam Analysis, June 29–July 4 2003, Albuquerque, New Mexico, USA

- Fattakhov Y.V., Galyautdinov M.F., L’vova T.N., Zakharov M.V., Khaibullin I.B.: Investigation of the dynamics of recrystallization and melting of the surface of implanted silicon at rapid thermal processing (poster)

VI Biennial International Workshop “Fullerenes and Atomic Clusters” (IWFAC’2003), June 30–July 4 2003, Saint-Petersburg, Russia

- Kukovitsky E.F., L’vov S.G., Sainov N.A., Shustov V.A.: The study of carbon nanotube growth on mechanically treated metallic nickel surface (poster)
- Polushin S.G., Rjuntsev E.I., Kukovitsky E.F.: Magnetic birefringence in suspensions of carbone nanotubes (poster)

XI Conference on Laser Optics, June 30–July 4 2003, Saint-Petersburg, Russia

- Gaister A.V., Konovalov A.I., Shakurov G.S., Subbotin K.A., Tarasov V.F., Zharikov E.V.: High frequency two dimensional EPR spectroscopy of Cr^{3+} and Ho^{3+} dimers in synthetic forsterite (poster)

XII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС’2003), 30 июня–5 июля 2003, Владимир, Россия

- Голованов А.И., Султанов Л.У.: Пошаговое исследование больших деформаций упругих тел МКЭ (устн.)
- Голованов А.И., Тюленева О.Н., Якушин С.А.: Разработка алгоритма расчета многослойных оболочек МКЭ в геометрически и физически нелинейной постановке (устн.)
- Голованов А.И., Шигабутдинов А.Ф.: К расчету динамического поведения оболочек МКЭ (устн.)
- Черников С.К., Никонова И.В.: Построение параллельных алгоритмов для решения задач механики на основе метода подконструкций (стенд.)

NATO Advanced Research Workshop on Nanostructured Magnetic Materials and Their Applications

(ARW NMMA-2003), July 1–4 2003, Istanbul, Turkey

- Garifullin I.A.: Recent experimental results on the superconductor/ferromagnet proximity effect (invited)
- Khaibullin R.I., Rameev B.Z., Okay C., Zheglov E.P., Zhikharev V.A., Tagirov L.R.: Ion synthesis of magnetic nanoparticles in polymers (invited)
- Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Yildiz F., Tagirov L.R., Aktas B.: ESR study of magnetic ion implanted single crystalline oxides (poster)
- Rameev B.Z., Tagirov L.R., Gupta A., Yildiz F., Yilgin R., Aktas B.: Magnetic properties of CrO₂ thin films studied by FMR technique (oral)
- Stepanov A.L., Khaibullin R.I., Rameev B.Z., Reinholdt A., Kreibitz U.: New laser ablation cluster source for a synthesis of magnetic nanoparticles in dielectrics and FMR study of Ni:MgF₂ nanostructures composites (poster)
- Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Quasiclassical theory of ferromagnet-superconductor contacts (oral)
- Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Theory of Andreev spectroscopy of ferromagnets (oral)

International Symposium “Neuron Differentiation and Plasticity-Regulation by Intercellular Signals”, July 6–9 2003, Moscow, Russia

- Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L., Gainutdinova T.H., Ismailova A.I., Muranova L.N., Tagirova R.R.: The comparative investigations of influence of 6-hydroxydopamine and haloperidol on defensive reactions and parameters of electrical activity of withdrawal interneurons of snail (poster)
- Gainutdinov Kh.L., Andrianov V.V., Gainutdinova T.H., Sylantjeva D.I.: Serotonin in associative learning of snail: the neurotoxin 5,6-dihydroxytryptamine caused the changes of behavior and electrical characteristics of withdrawal interneurons (oral)

VII IBRO World Congress of Neuroscience, July 10–15 2003, Prague, Czech Republic

- Andrianov V., Tagirova R., Gainutdinov Kh.: Electrophysiological investigation of influence of 6-hydroxydopamine injection on long-term sensitization in snail (oral)

International Conference of Jerzy Konorski Memorial: Integrative Activity of the Brain, July 16–19 2003, Warsaw, Poland

- Andrianov V.V.: The effects of 5,6-dihydroxytryptamine injection of serotonin role on the defensive reflex conditioning in *Helix lucorum* (poster)
- Andrianov V.V., Gainutdinova T.H., Gainutdinov Kh.L.: The investigation of serotonin role in long-term sensitization in snail: changes of electrical characteristics of withdrawal interneurons after influence of 5,6-dihydroxytryptamine (poster)

- Gainutdinov Kh.L., Andrianov V.V., Gainutdinova T.H., Sylantjeva D.I.: The investigation of membrane mechanisms of behavior plasticity during learning: role of Calcium ions and serotonin (poster)
- Gainutdinova T.H., Tagirova R.R., Ismailova A.I., Muranova L.N., Gainutdinov Kh.L., Balaban P.M.: Anisomycin-induced inhibition of memory to environmental conditioning in snail during reactivation (poster)
- Ismailova A.I., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L., Golubev A.I., Muranova L.N., Tagirova R.R.: The influence of injections of haloperidol and 6-hydroxydopamine on behavior of snails and electrical characteristics of withdrawal interneurons (poster)
- Muranova L.N.: The changes of electrical characteristics of withdrawal interneurons of snails after chronic injections of haloperidol (poster)
- Sylantjeva D.I.: The effect of changes of intracellular Ca²⁺ on electrical characteristics of withdrawal interneurons of naive and learned snails (poster)

XII International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques–2003 (STM'2003), July 21–25 2003, Eindhoven, the Netherlands

- Ovchinnikov D.V., Bukharaev A.A.: The computer analysis of MFM images of separate ferromagnetic nanoparticles (poster)

International Conference on Magnetism (ICM 2003), July 27–August 1 2003, Rome, Italy

- Rameev B.Z., Gupta A., Yilgin R., Yildiz F., Tagirov L.R., Aktas B.: Probing magnetic anisotropies in half-metallic CrO₂ epitaxial films (poster)
- Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Andreev reflection spectroscopy of ferromagnets (poster)

International Workshop “Strongly Correlated Transition Metal Compounds”, August 4–7 2003, Cologne, Germany

- Kataev V., Baier J., Moller A., Jongen L., Meyer G., Freimuth A.: ESR study of the low-dimensional quantum spin system TiOCl (poster)
- Kataev V., Moller A., Jung W., Schittner N., Kriener M., Freimuth A.: Structural and magnetic properties of the new low-dimensional spin magnet InCu_{2/3}V_{1/3}O₃ (poster)
- Kataev V., Pommer J., Choi K.-Y., Lemmens P., Ionescu A., Pashkevich Yu., Lamonova K., Moller A., Freimuth A., Guntherodt G.: Magnetic exchange in the low-dimensional complex oxide (Cu,Zn)₂V₂O₇ (poster)

V International Conference on f-element (ICFE'5), August 24–29 2003, Geneva, Switzerland

- Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M., Bill H.: Magnetic resonance and optical spectroscopy of MeF₂ (Me = Ca, Sr, Ba) single crystals doped with Yb³⁺ (poster)
- Knyazev A.A., Binnemans K., Haase W., Galyametdinov Yu.G.: Synthesis adducts of some β -diketonate of lan-

thanide with substituted 2,2'-bipyridine having mesogenic behavior (poster)

- Selivanova N., Galyametdinov N.: Lyotropic metallo-mesogens based on nonionic surfactants (poster)

XII International Laser Physics Workshop (LPHYS'03), August 25–29 2003, Hamburg, Germany

- Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Amplification of non-classical states of light under triggered superradiance regime (oral)
- Samartsev V.V., Shegeda A.M., Shkalikov A.V., Zuikov V.A.: Experimental discovery of the primary photon echo's satellites in ruby crystal (oral)

XVI Международная конференция “Взаимодействие ионов с поверхностью” (ВИП-2003), 25–29 августа 2003, Звенигород, Россия

- Фаттахов Я.В., Галютдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В., Хайбуллин И.Б.: Исследование динамики рекристаллизации и плавления поверхности имплантированного кремния при облучении импульсами некогерентного света (стенд.)

Joint International Scientific Conference “New Geometry of Nature. Mathematics. Mechanics. Geophysics. Astronomy & Biology”, August 25–September 5 2003, Kazan, Russia

- Donskaya I.S., Fung B., Yakovleva N., Ovchinnikov I.V.: Professor Alexander Kessel' – scientist and thinker (oral)
- Kessel A.R.: Qubit mapping variants into a space of quantum states (oral)
- Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Laser cooling problems of optic information bearer and methods its solution (oral)
- Salikhov K.M.: Kessel's approach to quantum computing (oral)
- Samartsev V.V., Shegeda A.M., Shkalikov A.V., Zuikov V.A.: Experimental detection of satellited of the prime photon echo in ruby (oral)
- Solovarov N.K.: Decoherence by reduction (oral)
- Yakovleva N.: Elements of quantum informatics on the states of equal spin-spin interactions model (oral)

XII International Conference on Radiation Effects in Insulators (REI-12), August 31–September 5 2003, Gramado, Brazil

- Marques C., Silva R.C., Alves E., Stepanov A.L.: Optical changes induced by high fluence implantation of Au⁺ ions on sapphire (poster)

II European Conference on Surface Science (ECOSS-22), September 7–12 2003, Prague, Czechia

- Popok V., Lukashevich M., Lukashevich S., Khaibullin R., Bazarov V.: Charge carrier transport in polyimide with Co nanoparticles formed by ion implantation (poster)
- Stepanov A.L., Popok V.N.: Nanostructuring of silicate glass under low energy Ag-ion implantation (poster)

Specialized Colloque AMPERE 2003 “NMR and EPR of Broad Solids”, September 8–12 2003, Portoroz, Slovenia

- Altshuler T.S., Goryunov Yu.V., Bresler M.S., Iga F., Takabatake T.: Yb-ion pairs in a cubic symmetry crystal YbB₁₂ (poster)
- Domracheva N., Ovchinnikov I., Zverev D., Lattermann G.: Anomalous temperature dependence of EPR integrated intensity of chromium(III) metallomesogen in the glass-like state (poster)
- Goryunov Yu.V.: FMR-study of magnetic properties of ultrathin Fe/Cr/Fe-trilayer in nanostructure Fe/Cr/Fe/V/Fe (poster)

VII East European Conference of the International Society for Invertebrate Neurobiology, September 12–16 2003, Kaliningrad, Russia

- Andrianov V.V., Beregovoy N.A., Gainutdinova T.H., Sylantieva D.I., Gainutdinov Kh.L.: K-currents in withdrawal interneurons of snail (poster)
- Arkhipova S.S., Gainutdinov Kh.L., Meschaninova A.V.: Investigation of chlorpromazine and 5,6-dihydroxytryptamine influence on locomotion and defensive reactions of snail and long-term sensitization elaboration (poster)
- Gainutdinov Kh.L., Andrianov V.V., Epshtein O.I., Gainutdinova T.H., Ismailova A.I., Muranova L.N., Shtark M.B., Sylantieva D.I.: Influence of antibodies to nerve-specific protein S100 on effects of inhibitor of Ca-dependent K-channels quinine in snail identified neurons (poster)
- Gainutdinova T.H., Tagirova R.R., Ismailova A.I., Muranova L.N., Gainutdinov Kh.L., Balaban P.M.: Anisomycin impairs associative contextual memory in snails after reactivation (poster)
- Ismailova A.I., Sylantieva D.I., Aliullina A.A., Salakhova G.R., Gainutdinov Kh.L.: Effects of chronic injections of caffeine on defensive reflex conditioning in snails (poster)
- Meschaninova A.V., Gainutdinova T.H., Gainutdinov Kh.L.: Effects of chronic injections of chlorpromazine on electrical characteristics of snail withdrawal interneurons (poster)
- Muranova L.N., Golubev A.I., Gainutdinov Kh.L.: Effects of chronic injections of haloperidol on electrical characteristics of snail withdrawal interneurons (poster)
- Sylantieva D.I., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L., Timoshenko A.H.: Effects of changes of extra- and intracellular calcium on electrical characteristics of withdrawal interneurons of learned snails (poster)

IV International Seminar on Ferroelastics Physics (ISFP-4), September 15–18 2003, Voronezh, Russia

- Mamin R.F.: Dynamic inhomogeneties due to the charge localization dynamics (poster)
- Mamin R.F., Migachev S.A., Sadykov M.F., Greznev Yu.S., Lunev I.V., Izotov V.V., Gusev Yu.A.: Photo-stimulated phenomena in PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O₃ (oral)

- Zverev D.G., Migachev S.A., Mamin R.F., Nikitin S.I., Sadykov M.F.: Optical properties of relaxor ferroelectrics (poster)

XV Международное совещание “Рентгенография и кристаллохимия минералов”, 15–19 сентября 2003, Санкт-Петербург, Россия

- Лопатин О.Н., Бахтин А.И., Королев Э.А., Хайбуллин Р.И., Хайбуллин И.Б.: Кристаллохимия корунда, имплантированного ионами кобальта (стенд.)
- Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Окрашивание природных самоцветов и их синтетических аналогов методом ионной имплантации (устн.)

XIII International Summer School “Vacuum, Electron and Ion Technologies” (VEIT 2003), September 15–19 2003, Varna, Bulgaria

- Bayazitov R.M., Batalov R.I., Bukharaev A.A., Borodin P.A., Ivlev G.D., Dézsi I., Kótai E.: Formation of iron silicide layers on Si by ion implantation and laser beams (poster)
- Osin Y.N., Stepanov A.L., Khaibullin R.I.: Synthesis of nickel nanoparticles with nickel oxide shell (poster)
- Stepanov A.L., Popok V.N.: Synthesis of metal nanoparticles in the surface layer of silicate glass by low-energy silver-ion implantation (poster)

XXIX European Rotorcraft Forum, September 16–18 2003, Friedrichshafen, Germany

- Mikhailov S.A., Chernikov S.K., Nedelko D.V., Faizullin A.M.: Finite element simulation of a helicopter crash impact (oral)

Euroconference on Nano-Optics, September 20–25 2003, Granada, Spain

- Stepanov A.L., Quinten M., Kreibig U.: Applicability of optical effective medium theories for metal nanoparticles composites (poster)

V Международная конференция по лиотропным жидким кристаллам, 22–25 сентября 2003, Иваново, Россия

- Селиванова Н.М., Галяметдинов Ю.Г.: Организация редкоземельных ионов лиотропными жидкими кристаллами (стенд.)

XX Международная конференция “Математическое моделирование в механике сплошных сред. Методы граничных и конечных элементов”, 24–26 сентября 2003, Санкт-Петербург, Россия

- Голованов А.И., Коноплев Ю.Г., Кузнецов С.А., Султанов Л.У., Борецкий О.И.: Исследование больших упругопластических деформаций трехмерных тел (устн.)
- Голованов А.И., Коноплев Ю.Г., Тюленева О.Н., Шигабутдинов А.Ф., Якушин С.А.: Исследование нели-

нейного статического и динамического деформирования оболочек малой и средней толщины МКЭ (устн.)

- Черников С.К., Никонова И.В.: Метод подконструкций и распараллеливание некоторых алгоритмов МКЭ для кластеров и метакомпьютеров (устн.)

V Международная конференция “Взаимодействие излучений с твердым телом” (ВИТТ-2003), 6–9 октября 2003, Минск, Беларусь

- Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Дези И., Котаи Э.: Воздействие импульсного лазерного излучения на слои кремния, имплантированные ионами железа (устн.)
- Лукашевич М.Г., Попок В.Н., Оджаев В.Б., Лукашевич С.М., Хайбуллин Р.И., Базаров В.В.: Модификация электронно-транспортных свойств полиимида имплантацией ионов кобальта (стенд.)
- Степанов А.Л., Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Усманов Т.: Особенности нелинейного поглощения наночастиц меди, синтезированных в стекле ионной имплантацией (стенд.)
- Степанов А.Л., Попок В.Н., Оджаев В.Б.: Модификация поверхности силикатного стекла низкоэнергетичной имплантацией: влияние плотности ионного тока на формирование наночастиц серебра (стенд.)
- Степанов А.Л., Хайбуллин Р.И., Рамеев Б.З., Рейнхольдт А., Крейбиг У.: Синтез наночастиц никеля во фториде магния и исследование магнитных свойств композита (стенд.)
- Хайбуллин Р.И.: Окрашивание природных кристаллов берилла путем имплантации ионов железа (устн.)
- Хайбуллин Р.И., Лопатин О.Н., Рамеев Б.З., Королев Э.А., Мустафин Р.Г., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Структурные, оптические и ЭПР исследования голубого корунда, окрашенного имплантацией ионов кобальта (стенд.)

International Conference “Micro- and nanoelectronics-2003” (ICMNE-2003), October 6–10 2003, Zvenigorod, Russia

- Bukharaev A., Biziaev D., Borodin P., Ovchinnikov D.: Magnetic force microscopy of magnetization reversal of microstructures in situ in external field of up to 2000 Oe (oral)
- Fattakhov Ya.V., Galyautdinov M.F., L'vova T.N., Zakharov M.V., Khaibullin I.B.: Investigation of the dynamics of recrystallization and melting of the surface of implanted silicon at rapid thermal processing (oral)
- Gumarov G.G., Petukhov V.Yu., Shustov V.A., Pchelyakov O.P., Mashanov V.I., Khaibullin I.B.: Ion beam synthesis of cobalt silicides in Si and SiGe (poster)
- Nurgazizov N.I., Bukharaev A.A.: Investigation of dissolution process of implanted silicon dioxide (poster)
- Ovchinnikov D., Bukharaev A.: Computer simulation application for improving correctness of data obtained by magnetic force microscope (poster)

Международный семинар “Супервычисления и математическое моделирование”, 6–11 октября 2003, Саров, Россия

- Голованов А.И., Якушин С.А.: Расчет многослойных композиционных оболочек МКЭ с учетом геометрической и физической нелинейности (устн.)

IX Международные чтения по квантовой оптике, 12–17 октября 2003, Санкт-Петербург, Россия

- Алимбекова А.Ш., Андрианов С.Н.: Квантовая голография на многофотонных переходах в твердотельных системах (устн.)
- Андрианов С.Н., Алимбекова А.Ш.: Квантовая телепортация кубита через фотонный барьер (стенд.)
- Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: Нахождение оптимальной формы зонда ближнеполевой оптической микроскопии для распространения световых мод типа ЕН с минимальным отражением (стенд.)
- Афанасьев А.А., Власов Р.А., Горбач Д.В., Смирнова Т.В., Федотова О.М., Хасанов О.Х., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: О возможности наблюдения некогерентной самоиндуцированной прозрачности в плотных резонансных средах (устн.)
- Власова Д.Д., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Графический метод расчета сигналов долгоживущего фотонного эха в многоуровневых системах (стенд.)
- Зиновьев П.В., Силаева Н.Б., Калинин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Поляризационные свойства оптического сверхизлучения в кристалле дифенила с пиреном с учетом его симметрии (пленарн.)
- Зуйков В.А., Калачев А.А., Самарцев В.В., Шегеда А.М., Шкаликов А.В.: Особенности двухцветного оптического сверхизлучения в кристалле трифторида лантана с празеодимом (стенд.)
- Калачев А.А., Самарцев В.В.: Усиление импульсов сжатого света в режиме триггерного оптического сверхизлучения (пленарн.)
- Кессель А.Р., Яковлева Н.М.: Элементы квантовой информатики на состояниях модели равных спин-спиновых взаимодействий (стенд.)
- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф., Щербаков В.Д.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия иона Fe^{4+} в амелисте (стенд.)
- Моисеев С.А.: Квантовая память и манипуляция состояниями фотонов в технике фотонного эха в оптически плотных средах (устн.)
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Квантовая фемтосекундная динамика димеров в оптически плотных средах (стенд.)
- Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Квантовая теория двухпримесного твердотельного лазера (устн.)
- Попов Е.А., Самарцев В.В., Январев Е.А., Косулин В.В.: Распространение гамма-импульса в оптически плотной среде $^{178\text{m}_2}\text{Hf}$ с инверсной заселенностью ядерных импульсов (стенд.)

- Попов Е.А., Самарцев В.В., Январев Е.А., Косулин В.В.: Формирование гамма-лавины в оптически плотной среде $^{178\text{m}_2}\text{Hf}$ в канале ядерной дифракции (стенд.)
- Попов Е.А., Январев Е.А., Куценко С.М., Самарцев В.В., Башкиров Ш.Ш., Поляков Н.В.: Ядерное резонансное рассеяние синхротронного излучения в “гамма-оптических” средах с целым спином (стенд.)
- Попов И.И., Самарцев В.В.: Фотонное эхо как метод спектроскопии паров молекулярного йода в охлаждающих сверхзвуковых молекулярных струях (стенд.)
- Русецкий Г.А., Смирнова Т.В., Федотова О.М., Хасанов О.Х., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Переходные процессы в средах с ближним диполь-дипольным межатомным взаимодействием (устн.)
- Самарцев В.В., Зуйков В.А., Шегеда А.М., Шкаликов А.В.: Сателлиты первичного фотонного эха в рубине (устн.)
- Шахмуратов Р.Н., Одюрс Дж., Мандель П.: Эффекты когерентности в гамма-оптике (устн.)
- Яковлева Н.М., Терешин Е.М.: Схемы реализации гейтов на состояниях дискретной квантовой системы (стенд.)

III Международная конференция молодых ученых и специалистов “Оптика-2003”, 20–23 октября 2003, Санкт-Петербург, Россия

- Калинин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Кооперативное излучение индуцированное бифотонами в процессе двухфотонного распада (устн.)
- Контуров С.В., Лобков В.С., Моисеев С.А., Никифоров В.Г., Салихов К.М.: Исследования молекулярной динамики бензонитрила и ортодихлорбензола методами фемтосекундной спектроскопии (стенд.)

Международная научная конференция “Актуальные проблемы физики твердого тела” (ФТТ-2003), 4–6 ноября 2003, Минск, Беларусь

- Goryunov Yu.V.: FMR-study of magnetic properties of ultrathin Fe/Cr/Fe-trilayer in nanostructure Fe/Cr/Fe/V/Fe (oral)
- Goryunov Yu.V.: Influence of the magnetization direction of Fe-layers on superconductivity of heterostructure Fe/Cr/Fe/V/Fe (poster)
- Ахмадуллин И.Ш., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Шакирзянов М.М.: Магнитное двупреломление звука в легкоплоскостном антиферромагнетике $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (стенд.)
- Ахмадуллин И.Ш., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Шакирзянов М.М.: Особенности распространения поперечного звука вблизи ориентационного фазового перехода в антиферромагнетике $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (стенд.)
- Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В.: Манганиты как фононные кристаллы (устн.)
- Иванова Т.А., Акимов А.И., Лебедев С.А., Ясина-Нышкевич И., Сидовски М., Яблоков Ю.В.: Структур-

- ные и транспортные свойства керамик $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ (стенд.)
- Иванова Т.А., Яблоков Ю.В., Акимов А.И., Лебедев С.А., Мрозинский Е.: Магнитные центры Ni^{3+} в керамиках $\text{LnSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}; 0 \leq x \leq 1$) (стенд.)
 - Уланов В.А., Жеглов Е.П., Житейцев Е.Р.: Кластеры примесных d -ионов в кристаллах флюоритов (стенд.)
 - Уланов В.А., Зарипов М.М.: Вибронное взаимодействие $T_{2g} \otimes 2t_{2g}$ в примесных комплексах $[\text{AgF}_8]^{6+}$ и $[\text{VF}_8]^{6-}$ в кристаллах флюоритов (стенд.)
 - Шакуров Г.С., Малкин Б.З., Закиров А.Р., Бутвина Л.Н., Охримчук А.Г., Личкова Н.В., Завгороднев В.Н.: Высокочастотный ЭПР кристаллов $\text{KPr}_2\text{Cl}_5\text{:Tb}$ (устн.)

International Seminar of EPR Center of Dartmouth Medical School, November 11 2003, Hanover, USA

- Ibragimova M.: EPR investigation of radiotoxin induced changes in the mouse (oral)

Международная научно-практическая конференция “Фундаментальные проблемы пьезоэлектрического приборостроения” (Пьезотехника-2003), 26–29 ноября 2003, Москва, Россия

- Мамин Р.Ф., Мигачев С.А., Садыков М.Ф., Лунев И.В., Изотов В.В., Гусев Ю.А.: Фотостимулированные явления в релаксорах (устн.)

Российские конференции

IV ежегодная конференция Ассоциации медицинских физиков России “Проблемы радиационной медицинской физики”, 29 января 2003, Москва

- Салихов К.М., Фаттахов Я.В.: Медицинский магнитно-резонансный томограф “ТМР-0.06-КФТИ”. Технические характеристики и диагностические возможности (устн.)

V Всероссийская научно-техническая конференция “Нейроинформатика-2003”, 29–31 января 2003, Москва

- Кессель А.Р., Яковлева Н.М.: Реализация алгоритма квантового поиска на ядерном спине $3/2$ (устн.)

XIII зимняя школа по механике сплошных сред, 10–12 февраля 2003, Пермь

- Голованов А.И., Сенникова А.С., Султанов Л.У.: Постановка задачи и разработка алгоритма исследования больших деформаций упругих тел (устн.)
- Голованов А.И., Тюленева О.Н., Якушин С.А.: Расчет многослойных оболочек МКЭ при упругопластическом деформировании в геометрически нелинейной постановке (устн.)
- Голованов А.И., Шигабутдинов А.Ф.: Исследование динамического поведения оболочек (устн.)

Научная конференция молодых ученых, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета “Материалы и технологии XXI века”, 14–15 февраля 2003, Казань

- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Высокочастотная перестраиваемая ЭПР спектроскопия центров Ho^{3+} в лазерном кристалле синтетическом форстерите (стенд.)

XXXVII зимняя школа Петербургского института ядерной физики (μSR -семинар), 24 февраля–6 марта 2003, Санкт-Петербург

- Моисеев С.А., Никифоров В.Г.: Радиочастотная деполяризация мюона в системе мюоний + ядерный спин (устн.)

Российский семинар по мюонным методам исследования вещества, 6–8 марта 2003, Репино

- Моисеев С.А., Никифоров В.Г.: Усиление деполяризации мюона в системе мюоний + ядерный спин в присутствии радиочастотного поля (устн.)

VII школа-конференция молодых ученых “Биология – наука XXI века”, 14–18 апреля 2003, Пушкино

- Андрианов В.В., Тагирова Р.Р.: Эффекты влияния 6-гидроксидофамина на электрические характеристики командных нейронов виноградной улитки (стенд.)
- Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В.: Исследование изменений К-токов командных нейронов виноградной улитки при выработке условного оборонительного рефлекса (стенд.)
- Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Насырова А.Г., Рахматуллина Ф.Ф.: Определение оксида азота в тканях органов крыс методом ЭПР спектроскопии (стенд.)
- Муранова Л.Н.: Исследование влияния галоперидола и 6-гидроксидофамина на поведенческие реакции виноградной улитки при формировании долговременной сенситизации (стенд.)
- Силантьева Д.И.: Воздействие изменений внутриклеточного Ca^{2+} на электрофизиологические характеристики командных нейронов при ассоциативном обучении (стенд.)

III семинар памяти Д. Н. Клышко на физическом факультете Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, 26–28 мая 2003, Москва

- Калачев А.А., Самарцев В.В.: Усиление импульсов неклассического света в режиме триггерного оптического сверхизлучения (стенд.)
- Калинин А.А., Калачев А.А., Самарцев В.В.: Многоимпульсное возбуждение сигналов оптического сверхизлучения на двухфотонном переходе (устн.)
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Трехмерные аспекты реализации квантовой памяти в технике фотонного эха в газах (стенд.)

- Моисеев С.А., Тарасов В.Ф., Хэм Б.: Техника квантовой памяти, основанная на эффектах типа фотонного эха в твердых телах (устн.)

III Российская конференция по материаловедению и физико-химическим основам технологии получения легированных кристаллов кремния и приборных структур на их основе (“Кремний-2003”), 26–30 мая 2003, Москва

- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Андреев Б.А., Крыжков Д.И., Теруков Е.И.: Фотолуминесценция в ближней ИК области механически обработанных слоев монокристаллического кремния (стенд.)
- Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Бухараев А.А., Бородин П.А., Ивлев Г.Д., Дези И., Котаи Э.: Формирование тонких пленок силицидов железа на кремнии ионными и лазерными пучками (устн.)
- Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В., Хайбуллин И.Б.: О природе центров зарождения локальной жидкой фазы на поверхности полупроводников при быстром термическом отжиге (устн.)

XIII межвузовская конференция “Математическое моделирование и краевые задачи”, 29–31 мая 2003, Самара

- Бугаков И.С., Голованов А.И., Митряйкин В.И., Михайлов С.А., Павлова Н.В.: Применение современных технологий для исследования локальной прочности многослойных композиционных конструкций при усталостных испытаниях (устн.)
- Голованов А.И., Шигабутдинов А.Ф.: К расчету свободных колебаний тонкостенных конструкций (устн.)

IV Всероссийское совещание “Минералогия Урала-2003”, 16–19 июня 2003, Миасс

- Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Имплантация элементов группы железа в кристаллические структуры минералов (стенд.)

XV Всероссийская межвузовская научно-технической конференция “Электромеханические и внутрикамерные процессы в энергетических установках, струйная акустика и диагностика, приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий”, 17–19 июня 2003, Казань

- Ваньков Ю.В., Голованов А.И., Козар Н.К.: Моделирование ударных процессов при решении задач низкочастотных методов контроля (устн.)
- Газимов М.М., Голованов А.И., Шигабутдинов А.Ф.: Расчет тонкостенных конструкций на свободные колебания методом конечных элементов (устн.)
- Голованов А.И., Султанов Л.У.: Пошаговое исследование больших деформаций упругих тел (устн.)
- Голованов А.И., Тюленева О.Н., Якушин С.А.: Уругопластическое деформирование многослойных оболочек с учетом геометрической нелинейности (устн.)

XXXIII Всероссийское совещание по физике низких температур (НТ-33), 17–20 июня 2003, Екатеринбург

- Водопьянов Б.П., Тагиров Л.Р.: Андреевский контактный точечного контакта ферромагнетик/сверхпроводник (стенд.)
- Гарифуллин И.А., Тихонов Д.А., Гарифьянов Н.Н., Фаттахов М.З., Тейз-Брель К., Вестерхолт К., Цабель Х.: Возможная реконструкция ферромагнитного состояния под влиянием сверхпроводник/ферромагнетик (стенд.)
- Домрачева Н.Е., Овчинников И.В., Латтерманн Г.: Необычное магнитное поведение резко охлажденных металлосодержащих жидких кристаллов (стенд.)
- Ерёмин Р.М., Ерёмин М.В., Круг фон Нидда Х.-А., Лоидл А., Глазков В.Н.: Оценка анизотропных обменных взаимодействий в CuGeO_3 (стенд.)
- Жеглов Е.П., Уланов В.А., Зарипов М.М., Житейцев Е.Р., Шакуров Г.С., Тарасов В.Ф.: ЭПР примесных парамагнитных центров железа в кристаллах фтористого бария (стенд.)
- Иванова Т.А., Яблоков Ю.В.: Микроструктура и магнетизм $\text{LnSrAl}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}; 0 < x < 1$) (стенд.)
- Таланов Ю.И., Адриан Х., Бассет М., Якоб Г., Вирт Г.: Влияние колончатых дефектов на поверхностный барьер и линию необратимости тонких сверхпроводящих пленок Bi-2212 (стенд.)
- Тейтельбаум Г.Б.: Спиновые и зарядовые флуктуации в сверхпроводящих металлооксидах (приглашен.)
- Уланов В.А., Зарипов М.М., Фазлижанов И.И.: Аномалии в магнитных свойствах кластеров примесной меди в кристалле фтористого бария (устн.)
- Шакуров Г.С., Аванесов А.Г., Бадиков В.В.: Высокочастотный ЭПР ионов Cr^{2+} в CdGa_2S_4 (стенд.)

X Всероссийская конференция “Структура и динамика молекулярных систем” (“Ялычик-2003”), 30 июня–4 июля 2003, Йошкар-Ола

- Аминова Р.М., Моисеев С.А.: Моделирование фемтосекундной динамики для молекулы нитрона в основном и первом синглетном возбужденном состоянии (стенд.)
- Анашкин В.Н., Зарипов Р.Н., Васильев Г.И., Скирда В.Д.: Универсальный широкополосный усилитель мощности радиочастотных импульсов заданной формы для медицинского ЯМР томографа (стенд.)
- Андрух М., Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Коробченко Л.В., Кравцов В., Симонов Ю.А.: Межмолекулярные и внутримолекулярные спиновые взаимодействия в супрамолекулярных соединениях, построенных из димерных фрагментов ионов меди (стенд.)
- Бухараев А.А.: Сканирующая зондовая микроскопия – новые возможности для изучения конденсированных сред (лекция)
- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Первова И.Г., Липунова Г.Н., Липунов И.Г., Молочников Л.С.: Комплексы Cu(II) с гетарилформазанами в растворах и ионных полимерах (стенд.)

- Воронкова В.К., Коробченко Л.В., Новицкий Г., Шова С., Туртэ К.И.: Обменные взаимодействия и спиновая динамика в пятиядерных смешанных кластерах (стенд.)
- Горюнов Ю.В.: Исследование магнитных свойств ультратонких эпитаксиальных бислоев Fe(001), разделенных несколькими монослоями хрома, методом ФМР (стенд.)
- Дунаев Д.М., Лобков В.С., Моисеев С.А., Никифоров В.Г., Салихов К.М., Контуров С.Г.: Фемтосекундный миниторинг колебательно-вращательных движений молекул бензонитрила и ортодихлорбензола в жидкости (стенд.)
- Карягина И.В., Салихов К.М.: Изучение фотосистемы I, изолированной из двойного мутанта Ruba/Menb, методом времязрешенного ЭПР (стенд.)
- Киселева Л.А., Смирнова Л.Т., Заверкина М.А., Фролова Е.Н.: Исследование сорбции ионов Cu^{2+} хитин-глюкановым комплексом гриба *Pleurotus ostreatus* (стенд.)
- Михайлова А.В., Галеев Р.Т., Фахрутдинов А.Р.: Расчет и настройка магнитной системы медицинского магнитно-резонансного томографа (стенд.)
- Мосина Л.В.: “Applied Magnetic Resonance” – Ваш компас в мире магнитного резонанса (устн.)
- Мурсалимов Л.Р., Салихов К.М.: Теоретическое исследование особенностей спиновой динамики спин-коррелированных радикальных пар в присутствии дополнительной парамагнитной добавки и магнитного ядра (стенд.)
- Новиков Г.А., Ильматова Д.В., Лобков В.С.: Синтез композитных систем на основе фуллерена и их исследование методами оптической спектроскопии (стенд.)
- Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Анашкин В.Н., Невзоров Н.А., Ковалев Л.К., Ковалев К.Л.: Особенности электронного распределения в текстурированной керамике MT-YbCo по данным ЯКР Cu (стенд.)
- Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Пеньков И.Н., Анашкин В.Н., Невзоров Н.А.: Особенности распределения электронной плотности в аурипигменте As_2S_3 (стенд.)
- Погорельцев А.И., Матухин В.Л., Пеньков И.Н., Анашкин В.Н., Невзоров Н.А.: Оценки градиентов электрических полей на ядрах меди в клокманните CuSe (стенд.)
- Салихов К.М.: Взаимосвязь переноса электрона в фотосистеме I со структурой реакционного центра (лекция)
- Салихов К.М., Фаттахов Я.В., Фахрутдинов А.Р., Аминов К.Л., Анашкин В.Н., Шагалов В.А.: Низкополевой медицинский магнитно-резонансный томограф “ТМР-0.06-КФТИ” (стенд.)
- Туранов А., Овчинников И.В., Малкин Б.З.: Псевдо-контактные химические сдвиги в ^1H ЯМР спектрах мезогенных комплексов РЗЭ, растворенных в CdCl_2 (стенд.)

- Цейтлин М.П., Обычный А.А., Гнездилов О.И., Цейтлин О.А.: ЭПР томография короткоживущих возбужденных молекул (стенд.)
- Цейтлин О.А., Обычный А.А., Салихов К.М., Гнездилов О.И., Цейтлин М.П.: Изучение взаимодействия фотовозбужденного порфирина и стабильного радикала методом ЭПР с разрешением во времени (стенд.)

XVII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 21–26 сентября 2003, Казань

- Галяметдинов Ю.Г.: Молекулярные материалы с заданной функциональностью на основе металлосодержащих жидких кристаллов (стенд.)
- Галяметдинов Ю.Г., Овчинников И.В., Иванова Г.И., Зеленцов В.В.: На пути к соединениям, сочетающим спин-переходные (spin-crossover) и жидкокристаллические свойства (стенд.)
- Молочников Л.С., Горбатенко Ю.А., Вишневская Г.П., Липунов И.Н., Первова И.Г., Сигейкин Г.И., Фролова Е.Н.: Строение и каталитические свойства формазанатов меди(II), иммобилизованных на твердых носителях (стенд.)

Всероссийская конференция “Высокопроизводительные вычисления и технологии” (ВВТ-2003), 27–30 октября 2003, Ижевск

- Черников С.К., Никонова И.В.: Реализация некоторых задач механики конструкций на вычислительных кластерах (устн.)

VII Всероссийская молодежная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”, 30 октября–1 ноября 2003, Казань

- Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: Определение оптимальной формы зонда сканирующей ближнеполевой оптической микроскопии для прохождения светового поля ЕН мод (устн.)
- Моисеев С.А.: Квантовая память на основе фотонного эха (лекция)
- Моисеев С.А., Носков М.И.: Фемтосекундная спектроскопия оптических переходов молекул слабыми световыми полями (устн.)

VII Российская научная молодежная школа “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его применений”, 11–13 ноября 2003, Казань

- Булатов А.Р., Капралов А.В.: Модовая трансформация высокочастотных ультразвуковых колебаний в манганите $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$) (устн.)
- Гарифуллин И.А.: Исследование перестройки магнитной структуры в тонкопленочных слоистых системах сверхпроводник/ферромагнетик методом ФМР (устн.)
- Ерёмина Р.М.: ЭПР в $\text{Na}_{0.33}\text{V}_2\text{O}_5$ (устн.)
- Житейцев Е.Р.: Исследование механизмов образования и структура железа в кристалле BaF_2 (устн.)
- Коновалов А.А.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия $\text{LaGaO}_3:\text{Mn}^{3+}$ (устн.)

- Коробченко Л.В., Галеев Р.Т.: Исследования методом ЭПР межмолекулярных взаимодействий в супрамолекулярных соединениях, построенных из комплексов двухвалентных ионов группы железа (устн.)
- Латыпов В.А.: Двойной электронно-ядерный резонанс Yb^{3+} в монокристаллах Cs_2NaYF_6 и CsCaF_3 (устн.)
- Фалин М.Л., Латыпов В.А., Герасимов К.И., Леушин А.М., Хайдуков Н.М., Калленс Ф., Фрилинк Х., Хофштеттер А.: Двойной электронно-ядерный резонанс Yb^{3+} в монокристаллах Cs_2NaYF_6 и CsCaF_3 (устн.)
- Хабибуллина Н.Р., Петухов В.Ю., Можанова А.А., Мюллер Р.: Исследование магнитных свойств тонких металлополимерных пленок, полученных высокочастотной имплантацией ионов Fe^+ и Co^+ в ПЭТФ (устн.)

- Яковлева Н.М.: Схемы реализации в ЯМР трехкубитного алгоритма Гровера (устн.)

IV Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов “РСНЭ-2003”, 17–22 ноября 2003, Москва

- Абдель-Латиф И.А., Парфенов В.В., Гумаров Г.Г.: Влияние Sr добавки на кристаллическую структуру ферриманганитов неодима (стенд.)
- Петухов В.Ю., Гумаров Г.Г., Хайбуллин И.Б.: Рентгеноструктурные исследования ионносинтезированных силицидных пленок в Si и SiGe (стенд.)

Участие в выставках

Специализированная выставка “Инновационный потенциал Республики Татарстан”, 28 октября 2003, Набережные Челны

- Томограф “ТМР-0.06-КФТИ”. Отмечен Дипломом выставки

Гости института

1. Аугустињьяк-Яблоков Мария, доктор, Институт молекулярной физики ПАН, Познань, Польша (совместные научные исследования)
2. Хаазе Вольфганг, профессор, Университет Дармштадта, Германия (совместные исследования)
3. Хаббел Уэйн Л., профессор, Университет Калифорнии, Лос-Анжелес, США (участие в симпозиуме)
4. Хаббел Шерил А., Лос-Анжелес, США (участие в симпозиуме)
5. Чиха Барбара, секретарь-референт, Институт молекулярной физики ПАН, Познань, Польша
6. Ацаркин Вадим Александрович, профессор, ИРЭ РАН, г. Москва
7. Балабанов Вячеслав Михайлович, д.ф.-м.н., Институт космических исследований РАН, г. Москва
8. Валеев Рамиль Миргасимович, д.и.н., начальник Управления высшего и среднего профессионального образования и науки аппарата Кабинета Министров Республики Татарстан
9. Джемпаров Фридрих Саламонович, профессор, ГНЦ РФ ИТЭФ, г. Москва
10. Камалеев Альберт Асхарович, глава администрации Советского района г. Казани
11. Коновалов Александр Иванович, академик, председатель Президиума Казанского научного центра РАН, г. Казань
12. Кругляков Эдуард Павлович, академик, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск
13. Месяц Геннадий Андреевич, академик, вице-президент РАН, член Президиума РАН, директор Института электрофизики УрО РАН, г. Москва
14. Минниханов Рустам Нургалиевич, премьер-министр Республики Татарстан
15. Фельдман Эдуард Беньяминович, профессор, ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Московская обл.
16. Фридман Алексей Максимович, академик, Институт астрономии РАН, г. Москва
17. Чесноков Валерий Валентинович, исполнительный директор фонда НИОКР Республики Татарстан, г. Казань

ФИЗТЕХПРЕСС
2004

ISBN 5-94469-009-7