



КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО-
ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ
Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2006

ЕЖЕГОДНИК

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

КАЗАНСКИЙ
ФИЗИКО–ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ

ИМЕНИ Е. К. ЗАВОЙСКОГО

2006



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 2006.
Ежегодник. – Казань: ФизтехПресс, 2007. 293 с.

ISBN 978-5-94469-019-7

Под общей редакцией
К. М. Салихова

Редактор-составитель В. К. Воронкова

Редакционная коллегия
В. Ф. Тарасов (председатель), В. К. Воронкова (зам. председателя), С. М. Ахмин, Р. М. Баязитов,
А. А. Бухараев, Х. Л. Гайнутдинов, Н. А. Карташёва, Л. В. Мосина, И. В. Овчинников, В. Ю. Петухов,
В. В. Самарцев, Г. Б. Тейтельбаум, Я. В. Фаттахов, С. К. Черников

Печатается по решению
Учёного 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 2006 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 978-5-94469-019-7

© КФТИ КазНЦ РАН, 2007
© Обложка Аксёнов И.А., 2007
© Макет, оформление Ахмин С.М., 2007

Ответственный редактор С. М. Ахмин
Редакторы С. М. Ахмин, Н. А. Карташёва, Л. В. Мосина, О. Б. Яндуганова
Технические редакторы Д. В. Ильматова, С. Г. Львов

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

Подписано в печать 29.06.2007
Формат 60х90/8. Бумага мелованная
Гарнитура Times. Печать офсетная
Тираж 225 экз.

*Живи и процветай, физтех!
Гордимся мы тобой всегда!
Мы преумножим твой успех,
Сил не жалея и труда!*

Предисловие редактора

В 2006 году учёные нашего института, как всегда, работали самоотверженно и получили весьма интересные результаты.

Наша обычная плановая исследовательская работа проходила на фоне важных событий в жизни Российской академии наук и нашего института. С 1 мая началась реализация первого этапа реформирования РАН, стал выполняться первый этап сокращения бюджетных штатных единиц и существенного повышения заработной платы научных сотрудников. Планируется, что к концу 2008 года бюджетная средняя заработная плата научных сотрудников будет 20–30 тысяч рублей. Сокращение в 2006 году было произведено на 8.9%. Значительную часть сокращения бюджетных штатных единиц мы осуществили за счет сокращения или перевода части совместителей на финансирование из грантов. К сожалению, несколько сотрудников пришлось сократить. Одновременно произошло повышение заработной платы научных сотрудников. К концу 2006 года заработные платы различных категорий научных сотрудников возросли на 90–200%. Первый этап реформирования прошёл без серьезных последствий для реализации научных проектов. Но позиция, конечно, ухудшилась: существенно уменьшилась возможность маневра кадрами на следующих этапах реформирования.

Знаменательным событием стало празднование юбилея института: физтеху исполнилось 60 лет. Для отдельного человека 60 лет – это уже пенсионный возраст. Но для института в целом – это не так. К нам ежегодно приходит молодое пополнение – на работу и в аспирантуру поступают выпускники университетов, причём весьма обещающие перспективные молодые люди. Такой ежегодный приток молодых учёных позволяет институту не стареть. Не стареем мы еще и потому, что каждый год берёмся за решение новых научных задач. И немолодые сотрудники с юношеским пылом берутся за их решение. Сама наука не стареет, поэтому и институт не стареет душой, если сотрудники занимаются актуальными проблемами. Юбилей института предоставил хороший повод научному сообществу, руководству РАН, руководству Республики Татарстан дать оценку нашей работы. Мы получили высокую оценку. Это вызывает чувство гордости за физтех, вдохновляет на еще более самоотверженную работу. Торжества в связи с юбилеем физтеха прошли очень достойно: были и насыщенная научная программа, гости, поздравления; сотрудники института с большим энтузиазмом отнеслись к подготовке и проведению юбилея физтеха, в дни юбилея появился замечательный гимн физтеха.

В 2006 году пополнился парк приборов, и сейчас мы можем планировать весьма амбициозные эксперименты.

В этом году физтех организовал несколько научных конференций. Можно отметить Международный симпозиум по современным проблемам химической физики, приуроченный к моему 70-летию. В его работе приняли участие многие известные в мире первоклассные учёные. В связи с юбилеем я получил высокую награду, много поздравлений от коллег и друзей из Татарстана, Москвы, Новосибирска, Санкт-Пете-

бурга и из-за границы. Я всем очень благодарен. Приятно, что в этих поздравлениях даётся высокая оценка работы всего физтеха.

Хорошо, что мы выпускаем ежегодник: по свежим следам мы записываем наиболее приметные события из жизни КФТИ. По-существу, мы составляем летопись нашего института. Это, конечно, очень хорошо. Но это и очень большая работа. В этой работе участвуют многие сотрудники института. Но некоторые делают для выхода ежегодника больше, чем другие: В. К. Воронкова, Н. А. Карташёва, С. М. Ахмин, Л. В. Мосина. Всем спасибо.

К. М. Салихов

Содержание

12	Структура института
----	---------------------

Важнейшие события года

15	Юбилей КФТИ <i>К. М. Салихов</i>
17	Гимн Казанского физико-технического института

Важнейшие результаты года

18	Орден “За заслуги перед Республикой Татарстан”
19	Государственная премия Республики Татарстан
20	Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Учёным советом КФТИ КазНЦ РАН в отчёт РАН за 2006 год
26	Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2006 года

Научные сообщения

27	Носители тока различной природы в купратах и их проявление в данных ряда экспериментов <i>Г. Б. Тейтельбаум</i>
29	Особенности распространения акустических волн вблизи структурного фазового перехода в манганите $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ <i>Х. Г. Богданова, А. Р. Булатов, В. А. Голенищев-Кутузов, А. А. Потапов</i>
32	Фотонное эхо в $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$ в слабых магнитных полях <i>В. Н. Лисин, В. В. Самарцев, А. М. Шегада, В. А. Зуйков</i>
37	Фотофизические и фотохимические свойства мезогенного аддукта европия (III) <i>Д. В. Лапаев, В. Г. Никифоров, А. А. Князев, В. С. Лобков, К. М. Салихов, Ю. Г. Галяметдинов</i>
42	Влияние температуры на эмиссионные свойства мезогенного аддукта европия (III) <i>Д. В. Лапаев, В. Г. Никифоров, А. А. Князев, В. С. Лобков, К. М. Салихов, Ю. Г. Галяметдинов</i>
47	Особенности либраций молекул в жидкости в субпикосекундном диапазоне <i>В. Г. Никифоров, В. С. Лобков</i>

- 52 Генерация и эффективный квантовый контроль двухцветного светового поля в когерентной трёхуровневой среде
С. А. Моисеев
- 55 Эффекты распространения, взаимодействия и интерференции световых мод в сужающемся субволновом зонде оптического микроскопа ближнего поля
Н. М. Арсланов, С. А. Моисеев
- 60 Первые примеры исследования методом ЭПР взаимодействий Cu–Tb и Cu–Gd в гетероядерных кластерах с редкоземельными ионами
В. К. Воронкова, Р. Т. Галеев, Л. В. Мингалиева, А. А. Суханов
- 66 ESEEM как метод исследования диполь-дипольных взаимодействий в нитроксильных бирадикалах
Р. Б. Зарипов, К. М. Салихов
- 69 Применение времязрешённого ЭПР и оптической спектроскопии для исследования фотодинамических реакций, возникающих при импульсном лазерном фотолизе
А. А. Обычный, В. С. Июдин, К. М. Салихов
- 73 Численные расчёты неравновесной поляризации электронных спинов триплетных экситонов, вызванной их взаимной аннигиляцией
М. Х. Бренерман, А. Е. Мамбетов, К. М. Салихов
- 78 К расчёту спектров ЭПР спин-коррелированных разделённых зарядов в фотосинтетических реакционных центрах
А. Р. Мурсалимов, Ю. В. Садчиков, С. К. Черников, К. М. Салихов
- 82 Исследование молекулярной подвижности альфа-кристаллина методами ЯМР спектроскопии
Т. А. Зинкевич, О. И. Гнездилов
- 86 Атомно-силовая микроскопия композитных электродов с каталитическими свойствами
С. А. Зиганишина, А. П. Чукланов, А. А. Бухараев
- 91 Особенности нелинейного поглощения наночастиц серебра в видимом диапазоне
А. Л. Степанов, И. А. Файзрахманов, И. Б. Хайбуллин
- 95 Динамика фотоионизации и нагрева при лазерном отжиге имплантированного кремния
Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов, И. Б. Хайбуллин
- 99 Магнитные свойства кремния, имплантированного ионами железа в магнитном поле
Г. Г. Гумаров, В. Ю. Петухов, В. А. Жихарев, Е. П. Жеглов, И. Б. Хайбуллин
- 103 ЭПР и ЯМР спектроскопия механоактивированного глюконата кальция
В. Ю. Петухов, Г. Г. Гумаров, Е. П. Жеглов, А. А. Обычный
- 107 ЭПР ионов Cr^{4+} в кристалле LiScGeO_4
Г. С. Шакуров
- 110 ЭПР центров трёхвалентного железа в кристалле $\text{SrF}_2\text{:Fe}$
Е. Р. Житейцев, В. А. Уланов, М. М. Зарипов
- 113 Аномалии в магнитных свойствах кристаллов $\text{BaF}_2\text{:Cu}$
В. А. Уланов, М. М. Зарипов, И. И. Фазлижанов, Р. М. Ерёмина
- 116 Высокочастотная ЭПР спектроскопия $\text{Mg}_2\text{SiO}_4\text{:Tb}^{3+}$
А. А. Коновалов, В. Ф. Тарасов
- 120 Анизотропные обменные взаимодействия в CuTe_2O_5
Р. М. Ерёмина, Т. П. Гаврилова

- 124 Магнитооптическая спектроскопия парамагнитных центров кубической симметрии Yb^{3+} в кристаллах структурного ряда флюорита
К. И. Герасимов, М. Л. Фалин
- 128 Магнитные свойства поли(пропилен имин) дендромезогенных комплексов меди: ЭПР исследование
Н. Е. Домрачева
- 134 Состояние ионов Gd^{3+} в универсальных сульфосодержащих ионообменных полимерах по данным ЭПР
Г. П. Вишневская, Е. Н. Фролова, А. Р. Фахрутдинов
- 139 Влияние внешнесферного аниона на свойства спинового перехода в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{Y}$, $\text{Y} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$
Т. А. Иванова, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов
- 144 Исследование методом ЭПР NO-содержащих комплексов гемового и негемового железа в тканях крыс при фармакологической десимпатизации
С. В. Юртаева, А. А. Обычный, А. И. Исмаилова, Х. Л. Гайнутдинов
- 148 Исследование эффектов облучения тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ионами Co^+ и Fe^+ с энергией 40 кэВ
А. Н. Бухараев, А. А. Валидов, Г. Г. Гумаров, Н. Ю. Панарина, В. Ю. Петухов, Ю. И. Таланов, Р. И. Хасанов
- 154 Ферромагнитное упорядочение примесей железа в кондо-полупроводнике SmB_6
Т. С. Альтишлер, Ю. В. Горюнов
- 157 Квантовая память в режиме оптического субизлучения. Оптимальная форма импульсов
А. А. Калачёв, В. В. Самарцев
- 161 Спектральные особенности сигналов фемтосекундного фотонного эха в легированных полимерных плёнках при комнатной температуре
В. С. Лобков, А. В. Леонтьев, К. М. Салихов, В. В. Самарцев, Г. М. Сафиуллин, В. А. Зуйков
- 165 Плотность энергии “медленного света”
Р. Н. Шахмуратов
- 170 Программное обеспечение “среднего” уровня для низкополевого медицинского МР томографа TMR-0.12-КФТИ
Э. Ф. Биктимиров, С. И. Осокин
- 172 Компьютерное моделирование испытаний кабин грузовых автомобилей
С. К. Черников, А. М. Файзуллин, А. Н. Ахмадышин
- 177 Программно-аппаратный комплекс для моделирования механических процессов в сложных технических объектах
С. К. Черников, А. Н. Ашихмин, Т. П. Баскевич
- 183 Механизмы формирования, сохранения и реконсолидации долговременной памяти
Т. Х. Гайнутдинова, Р. Р. Тагирова, А. И. Исмаилова, Л. Н. Муранова, Х. Л. Гайнутдинов
- 187 Эффекты антител к кальций-связывающему белку S100 на ионные токи идентифицированных нейронов улитки *Helix lucorum*
В. В. Андрианов, Д. И. Силантьева, Х. Л. Гайнутдинов

60 лет КФТИ

- 193 Выездные научные сессии ОФН и секции “Магнетизм”
Научного совета РАН по физике конденсированных сред
- 194 Торжественное заседание, посвящённое 60-летию КФТИ
- 197 60-летие КФТИ им. Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН
К. М. Салихов
- 206 Поздравления, поступившие в адрес института в связи с 60-летием

Аспиранты и молодые учёные

- 209 Аспиранты и молодые учёные

Персоналии

- 211 Кев Минуллинович Салихов. К 70-летию со дня рождения
*Л. К. Аминов, А. Ф. Андреев, С. Н. Багаев, К. А. Валиев, В. К. Воронкова,
А. В. Ильясов, Ю. Н. Молин, И. В. Овчинников, Р. З. Сагдеев, В. Ф. Тарасов,
И. Б. Хайбуллин, Ю. Д. Цветков*
- 213 Репортаж с торжественного заседания, посвящённого 70-летию К. М. Салихова
- 215 К семидесятилетию Кева Минуллиновича Салихова
К. А. Валиев
- 217 Мне семьдесят?! Не могу поверить!
К. М. Салихов
- 220 Поздравления, поступившие в адрес К. М. Салихова в связи с 70-летием
- 223 Евгений Иванович Штырков. К 70-летию со дня рождения
М. Ф. Галютдинов, С. А. Моисеев

История

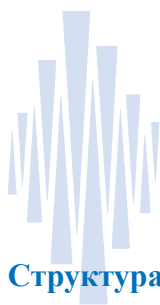
- 226 Хронология истории Казанского физико-технического института
им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН (1945–2000)
Н. А. Карташёва

Научно-организационная деятельность

- 246 Новые экспериментальные возможности в области сканирующей
зондовой микроскопии
А. А. Бухараев
- 247 Отдел криогенной техники в 2006 году
С. Я. Хлебников
- 248 Международный симпозиум “Modern Problems of Chemical Physics”
В. Ф. Тарасов, В. К. Воронкова
- 251 Участие физтеховцев в Международном симпозиуме в Новосибирске
А. А. Коновалов
- 252 Журнал “Applied Magnetic Resonance”
Л. В. Мосина
- 254 “EPR newsletter”: все новости жизни ЭПР сообщества для Вас!
Л. В. Мосина
- 255 Международная премия им. Е. К. Завойского 2006
Л. В. Мосина
- 257 Премия им. М. Л. Блатта 2006
В. Н. Лисин

Цифры и факты

258	2006 год в цифрах
259	Темы, финансируемые из госбюджета (Отделение физических наук РАН)
260	Проекты, финансируемые на конкурсной основе
264	Важнейшие результаты фундаментальных исследований, вошедшие в отчёт РАН в 2005 году
264	Публикации сотрудников института
272	Защиты, награды, государственные стипендии
274	Участие сотрудников института в преподавательской деятельности
275	Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ
281	Участие сотрудников института в конференциях
291	Участие в выставках
291	Гости института



Структура института

Дирекция

Директор

Салихов Кев Минуллинович
член-корр. РАН, академик АН РТ,
д.ф.-м.н.

Зам. директора по научной работе

Тарасов Валерий Федорович
д.ф.-м.н.

Зам. директора по общим вопросам

Аджалиев Юнус Амзанович

Учёный секретарь

Воронкова Виолета Константиновна
к.ф.-м.н.

Учёный совет

Салихов Кев Минуллинович, член-корр. РАН
председатель

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

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

Баязитов Рустэм Махмудович, д.ф.-м.н.

Бухараев Анастас Ахметович, д.ф.-м.н.

Богданова Халида Галимзяновна, д.ф.-м.н.

Гайнутдинов Халил Латыпович, д.б.н.

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

Лисин Валерий Николаевич, к.ф.-м.н.

Моисеев Сергей Андреевич, 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.

Фаттахов Яхъя Валиевич, к.ф.-м.н.

Хайбуллин Ильдус Бариевич, член-корр. РАН

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

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

Курбатова Надежда Васильевна

технический секретарь

Научные и научно-вспомогательные подразделения*Отдел химической физики*

Заведующий: член-корр. РАН, академик АН РТ, проф., д.ф.-м.н. Салихов Кев Минуллович

Лаборатория молекулярной фотохимии

Заведующий: член-корр. РАН, академик АН РТ, проф., д.ф.-м.н. Салихов Кев Минуллович

Лаборатория физики и химии поверхности

Заведующий: д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Бухараев Анастас Ахметович

Отдел радиационных воздействий на материалы

Заведующий: член-корр. РАН, академик АН РТ, проф., д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Хайбуллин Ильдус Бариевич

Лаборатория радиационной физики

Заведующий: член-корр. РАН, академик АН РТ, проф., д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Хайбуллин Ильдус Бариевич

Лаборатория интенсивных радиационных воздействий

Заведующий: д.ф.-м.н. Баязитов Рустем Махмудович

Лаборатория радиационной химии и радиобиологии

Заведующий: д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Петухов Владимир Юрьевич

Отдел медицинской физики

Заведующий: к.ф.-м.н. Фаттахов Яхъя Валиевич

Лаборатория методов медицинской физики

Заведующий: к.ф.-м.н. Фаттахов Яхъя Валиевич

Лаборатория биофизики

Заведующий: д.б.н. Гайнутдинов Халил Латыпович

Лаборатория магнитоакустики

Заведующий: д.ф.-м.н. Шакирзянов Мазгут Мазитович

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Заведующий: д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Тарасов Валерий Федорович

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

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

Лаборатория физики перспективных материалов

Заведующий: проф., д.ф.-м.н., заслуженный деятель науки РТ Тейтельбаум Григорий Бенционович

Лаборатория нелинейной оптики

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

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Заведующий: к.т.н. Черников Сергей Константинович

Группа роста кристаллов

Руководитель: Куковицкий Евгений Филиппович

Отдел криогенной техники

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

Отдел телекоммуникационных технологий

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

Отдел контрольно-измерительных приборов и автоматизированных систем управления

Заведующий: Дюльдев Игорь Николаевич

Библиотека

Заведующая: Фалина Гульшат Эльгизовна и.о. Гайнутдинова Светлана Станиславовна

Патентная служба

Главный специалист: Туриянский Ефим Аронович

Редакция журнала "Applied Magnetic Resonance"

Главный редактор: член-корр. РАН, академик АН РТ, проф., д.ф.-м.н. Салихов Кев Минуллович
Зам. гл. редактора по научно-редакционным вопросам, ответственный секретарь: к.ф.-м.н. Мосина Ляйля Васильевна

Зам. гл. редактора по издательским вопросам: к.ф.-м.н. Ахмин Сергей Михайлович

Службы*Приёмная*

Секретарь-референт: Губайдуллина Альфия Закировна

Бухгалтерия

Главный бухгалтер:

Гусева Раиса Рафаиловна

Планово-экономическая группа

Главный экономист: Голенева Валентина Михайловна

Отдел кадров

Заведующая: Мухтасарова Халима Лутфулловна

Аспирантура

Заведующий: Туриянский Ефим Аронович

(до 15.10.2006)

Петрушкин Сергей Валериевич (с 16.10.2006)

Канцелярия

Заведующая: Куркина Нина Георгиевна

Отдел охраны труда

Инженер по ТБ и ГО: Хлебникова Альбина

Фердинандовна

и.о. Галеева Фарида Габудиновна

Экспериментальная мастерская

Мастер-станочник: Гайнутдинов Наиль

Валеевич

Отдел научно-технической информации

Вед. инженер: Карташёва Нина Алексеевна

Архив

Главный специалист: Карташёва Нина Алексеевна

АХО

Заведующая: Куприянова Ольга Олеговна

Отдел главного энергетика

Главный энергетик:

Аджалиева Зухра Тазиевна

Группа текущего ремонта

Мастер: Гнездилов Иван Дмитриевич

Отдел материально-технического снабжения

Заведующий: Садыков Нияз Рифгатович

Гараж

Механик: Лукин Иван Тимофеевич

ВАЖНЕЙШИЕ СОБЫТИЯ ГОДА

Юбилей КФТИ

Какую дату считать днём рождения КФТИ? 13 апреля 1945 года вышло постановление Совета Народных Комиссаров СССР об открытии Казанского филиала АН СССР. 28 августа 1945 года Президиум АН СССР сделал следующий важнейший шаг: был назначен и.о. директора института и определены названия секторов института. Этот день может претендовать на то, чтобы быть днём рождения физтеха. В середине января и начале февраля 1946 года рядом приказов был сформирован первый штат института, и институт фактически начал функционировать. Этот короткий период тоже можно рассматривать

как момент рождения физтеха. Мы долго думали, когда же нам отмечать юбилей института. Можно было ориентироваться на августовский протокол распорядительного заседания Президиума АН СССР. Приняв во внимание многие обстоятельства, мы решили отметить юбилей института в начале февраля 2006 года, и выбор пал на 8 февраля. Кстати, наш выбор удачно совпал с днём российской науки.

Юбилей Казанского физтеха был отмечен двумя важными научными мероприятиями. Секция “Магнетизм” Научного совета РАН по физике конденсированных сред



Торжественное заседание, посвящённое шестидесятилетию Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, состоявшееся в Национальном Культурном центре “Казань” 9 февраля 2006 года.

провела свою выездную сессию в физтехе. В физтехе состоялась также выездная научная сессия Отделения физических наук РАН. В работе этих научных сессий приняли участие учёные Москвы, Черноголовки, Казанского государственного университета и Казанского физтеха. Доклады, представленные на этих сессиях, вызвали огромный интерес всего физического, и даже не только физического, научного сообщества Казани, все доклады заслушивались в заполненном участниками конференц-зале института. Конечно, для нас незабываемыми событиями стали замечательные доклады, представленные акад. Камилом Ахметовичем Валиевым, акад. Олегом Николаевичем Крохиным, акад. Владиславом Борисовичем Тимофеевым. Проведение этих научных сессий, участие в их работе известных учёных, а также многочисленные поздравления от институтов РАН, в том числе институтов Казанского научного центра и руководства ОФН, стали свидетельством высокой оценки вклада учёных КФТИ КазНЦ РАН в фундаментальную науку, достойного места КФТИ КазНЦ РАН в системе научных учреждений нашей страны.

В Татарстане юбилей КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН был отмечен как важное событие в жизни всего научного сообщества республики, не только физиков, и как заметное событие в культурной жизни республики. Физтех много и плодотворно сотрудничает с университетами Казани. В дни юбилея института мы получили свидетельства высокой оценки образовательной деятельности физтеха со стороны Казанского государственного университета, Казанского технологического университета, Казанского технического университета, других университетов. Многолетнее сотрудничество объединяет физтех с Академией наук Республики Татарстан. Руководство АН РТ, институты АН РТ дали высокую оценку деятельности физтеха. Руководство республики также отметило значение физтеха в жизни республики. Вот уже прошёл год с того дня, как мы отмечали юбилей института, но

сотрудники института живо вспоминают как во время торжественного собрания 9 февраля 2006 года в здании НКЦ “Казань” Первый вице-премьер Кабинета Министров РТ Равиль Фатыхович Муратов от имени всего руководства Татарстана поздравил физтех и передал ключи от нового автобуса марки “Газель”. Через неделю автобус уже пригнали в институт! Конечно, всё это было замечательно и незабываемо! И очень хорошо, что мы издаем ежегодник, благодаря ежегоднику такие эпизоды останутся в памяти, не затеряются для истории института.

Юбилей института стал важным событием в жизни физтеха, событием для сотрудников. Многие сотрудники института непосредственно участвовали в подготовке и проведении юбилейных мероприятий, и поэтому юбилейные мероприятия прошли как общий праздник и как праздник для каждого сотрудника. Я хотел бы сказать, что юбилей и связанные с этим мероприятия прибавили каждому сотруднику физтеха чувство гордости за КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, желание работать еще лучше во славу физтеха, во славу науки. В дни юбилея впервые прозвучал замечательный гимн физтеха. Слова написала с.н.с., к.ф.-м.н. Ляйля Васильевна Мосина, музыку сочинил Рафик Вартанович Аганов, ранее работавший в физтехе и оставшийся в душе физтеховцем. Гимн понравился всем сотрудникам и всем гостям, принимавшим участие в юбилейных мероприятиях. Ещё мне хочется отметить такой эпизод. На следующее утро после торжественного собрания, посвящённого юбилею института, утром у входа в институт меня поджидал один из рабочих, работающих в нашем институте. Он хотел поприветствовать меня, пожать руку, так как он испытывал чувство гордости за институт, в котором он работает. Я нахожу этот эпизод очень трогательным. Действительно, юбилей института дал нам прилив гордости за родной физтех, придал силы для дальнейшей работы.

К. М. Салихов

Гимн Казанского физико-технического института

музыка Р. Аганова
стихи Л. Мосиной

Vivace (♩=170)

Ты был рождён в по - бе - ды год, За - вой - ский и - мя дал те -

бе. По - бе - до - но - сен твой вос - ход, По - бед - ной быть тво -

ей судь - бе. **припев:** Жи - ви и про - цве - тай, Физ - тех! Гор -

дим - ся мы то - бой всег - да! Мы пре - ум - но - жим твой ус -

пех, Сил не жа - ле - я и тру -

да! Мы... крат!

Ты был рождён в Победы год,
Завойский имя дал тебе.
Победоносен твой восход,
Победной быть твоей судьбе!

Припев:

Живи и процветай, физтех!
Гордимся мы тобой всегда!
Мы преумножим твой успех,
Сил не жалея и труда!

Мы корифеев свято чтим,
Их опыт – наш бесценный клад.
Мы на плечах у них стоим
И видим дальше во сто крат.

Припев

Открытиям и свершеньям – быть!
Полету мысли нет преград!
Науке преданно служить,
Себе не требуя наград!

Припев

ВАЖНЕЙШИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ГОДА

Орден “За заслуги перед Республикой Татарстан”

Указом Президента Республики Татарстан от 31 октября 2006 года за достойный вклад в развитие науки, активную научно-организационную, педагогическую и общественную деятельность орденом “За заслуги перед Республикой Татарстан” награжден Салихов Кев Минуллович – директор Казанского физико-технического института имени Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН.

Вручая награду, М. Ш. Шаймиев отметил: “Этот человек известен на мировом уровне, являясь достойным продолжателем дела своих великих предшественников”. Президент выразил К. М. Салихову благодарность от имени всех татарстанцев и от себя лично за многолетний труд во благо развития науки. Кев Минуллович, в свою очередь, ответил, что внимание со стороны общества приятно, и от этого, образно говоря, вырастают крылья.



Поздравление Президента РТ: К. М. Салихов (слева) и М. Ш. Шаймиев (справа).



На приёме у Президента РТ 3 ноября 2006 года. Слева направо: А. И. Коновалов, К. М. Салихов, М. Ш. Шаймиев, А. М. Мазгаров, С. Г. Дьяконов.

Государственная премия Республики Татарстан

Государственная премия Республики Татарстан 2006 года была присуждена в области науки и техники за цикл работ “Физика ван-флековских парамагнетиков” М. М. Зарипову, г.н.с. КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, в составе коллектива учёных Казанского государственного университета: С. А. Альтшулера (посмертно), М. А. Теплова (посмертно), М. С. Тагирова, Б. З. Малкина, Л. К. Аминова, Д. А. Таюрского, А. В. Егорова.

Нечасто бывает так, что целая отрасль науки вызревает и получает основное развитие в пределах одного творческого коллектива. Именно это можно сказать о физике так называемых ван-флековских перемангнетиков (ВФП), начальные идеи которой, последовательная теоретическая проработка, важнейшие предложения по применению принадлежат учёным физического факультета Казанского государственного университета, чей приоритет в данной области признан мировым научным сообществом. Здесь же, в Казанском университете – родине электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) – были проведены первые эксперименты по наблюдению магнитного резонанса в ВФП, убедительно подтвердившие интересные особенности этого класса веществ, предсказываемые теорией.

Начало истории физики ВФП можно отнести к середине пятидесятих годов прошлого века, когда по предложению профессора С. А. Альтшулера его ученик М. М. Зарипов рассчитал характеристики ядерного маг-

нитного резонанса (ЯМР) в кристаллах, содержащие ионы элементов группы железа или редкоземельных элементов, ядра которых обладают собственным магнитным моментом, но основные электронные состояния которых немагнитные. Первое наблюдение такого рода ЯМР было осуществлено в 1964 году на ионах ванадия, внедрённых в корунд. В дальнейшем экспериментальные исследования были сосредоточены в основном на соединениях редких земель. Успеху работы в значительной степени способствовало создание в университете лаборатории роста кристаллов, что позволило по заказу синтезировать различные соединения с нужными свойствами. Значительным этапом в развитии физики ВФП послужило предложение С. А. Альтшулера (1966 г.) об использовании ВФП в качестве охлаждающего элемента при получении сверхнизких температур. Оно значительно повысило интерес к этим объектам во всём мире, и исследования по физике ВФП были развёрнуты в Великобритании, Японии, Голландии, Франции и других странах, однако Казанский университет до сих пор остаётся признанным лидером в этом направлении. Исследования, проводимые в настоящее время, связаны, главным образом, с многочисленными приложениями ВФП в смежных областях физики. Например, многие высокотемпературные сверхпроводники включают в себя ван-флековские ионы, и исследование этих соединений



Лауреаты Государственной премии Республики Татарстан 2006 года. Слева направо: А. В. Егоров, Д. А. Таюрский, М. С. Тагиров, М. Ш. Шаймиев, М. М. Зарипов, Л. К. Аминов и Б. З. Малкин.

методами магнитного резонанса позволяет получать информацию, недоступную для обычного ЯМР. В физике низких температур, помимо уже отмечавшейся роли охладителя, ВФП используется для исследования теплового сопротивления на границе твёрдое тело–жидкий гелий-3.

Что же такое ван-флековские парамагнетики и каковы их особенности, предопределяющие интерес физиков к этому классу веществ? Парамагнетизм Ван Флека (Ван Флек – американский физик, лауреат Нобелевской премии) – явление столь же универсальное, как и диамагнетизм. Заключается оно в том, что внешнее магнитное поле индуцирует на ионах (атомах, молекулах) магнитный момент, обратно пропорциональный энергии электронного возбуждения в магнитные состояния. В громадном большинстве веществ энергия возбуждения велика, порядка нескольких электрон-вольт, и, соответственно, в обычно используемых магнитных полях наведённый магнитный момент ничтожно мал по сравнению с собственным магнитным моментом электрона. В обычном ЯМР, например, протонном магнитном резонансе, наиболее часто используемом в химии, ван-флековский парамагнетизм проявляется в виде малых парамагнитных (по-другому, “химических”) сдвигов резонансных линий от своих стандартных положений.

Ситуация кардинально меняется для ионов редкоземельных элементов и элементов других переходных групп, помещённых в кристаллы. Энергия электронного возбуждения в этом случае бывает сравнительно небольшой, порядка десятых и сотых долей электрон-вольта. Соответственно, индуцированный магнитный момент достигает весьма больших значений, к тому же, сильно

зависящих от ориентации внешнего магнитного поля относительно осей кристалла. Именно такие вещества, электронный магнитный момент которых в основном состоянии равен нулю, но наведённый момент сопоставим с собственным электронным моментом, было предложено называть ван-флековскими парамагнетиками. Наведённый на электронной оболочке иона момент создаёт на ядре ван-флековского иона очень большие магнитные поля, по величине на один-два порядка превышающие наложенное извне поле. В результате ЯМР наблюдается в значительно усиленном магнитном поле, резонансная частота в такой же мере возрастает, можно сказать, что происходит гигантский “химический сдвиг”. Такой резонанс можно классифицировать как промежуточный между обычным электронным и ядерным магнитными резонансами. С указанными свойствами тесно связаны многие особенности спин-решёточной релаксации в этих системах, своеобразные температурные зависимости положения и формы резонансных линий. Отметим ещё, что исследование ЭПР примесных парамагнитных ионов в ВФП позволяет получать прямую сведения о характере деформации кристаллической решётки при внедрении примесей.

Результаты интенсивных экспериментальных и теоретических исследований ван-флековских парамагнетиков в Казанском университете вошли в пять докторских и девятнадцать кандидатских диссертаций, в более чем пятьдесят дипломных и магистерских работ. Фактически это подтверждает, что в ведущей в стране и в мире казанской физической школе по радиоспектроскопии сформировалось и получило достойное развитие новое важное научное направление.

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, рекомендованные Учёным советом КФТИ КазНЦ РАН в отчёт РАН за 2006 год

1.

Установлено, что высокотемпературный переход в псевдощелевую фазу купратов определяется балансом между носителями тока, созданными внешним допированием и термоактивированными носителями.

Аннотация. Анализ температурной зависимости коэффициента Холла в купратах свидетельствует о том, что с ростом допирования число носителей тока превышает число допантов x и зависит от температуры. Это обстоятельство обусловлено термоактивацией. Сравнение с ARPES данными показывает, что энергия активации термически возбуждённых носителей равна разности между энергией антинодальных квазичастиц в окрестности $(0, \pi)$

и химпотенциалом. Обнаружено, что переход от режима маргинальной Ферми жидкости к псевдощелевому режиму происходит при температуре $T^*(x)$, при которой число термоактивированных носителей сравнивается с числом носителей, созданных путём внешнего допирования. Обсуждены проявления этих особенностей в магнитных свойствах и в (T, x) -фазовой диаграмме. Установлено, что изменение числа магнитных узлов (локализованных d^9 дырок) в процессе термоактивации сильно влияет на магнитные свойства купратов, приводя к специфической температурной зависимости магнитной восприимчивости и спиновой релаксации ядер меди.

Лаборатория физики перспективных материалов КФТИ КазНЦ РАН; Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва; Национальная лабора-

тория сильных магнитных полей Университета штата Флорида, Таллахасси, США.

Руководитель: Тейтельбаум Г.Б.

Публикации:

1. Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B.: Interplay of externally doped and thermally activated holes in LSCO and its impact on the pseudogap crossover. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 247003(4) (2006)
2. Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B.: Nuclear spin relaxation and incommensurate magnetism in doped cuprates. *New Challenges in Superconductivity: Experimental Advances and Emerging Theories. NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry*, vol. 183, pp. 55–63. Wien-New York: Springer 2005.
3. Тейтельбаум Г.Б.: Носители тока различной природы в купратах и их проявление в данных ряда экспериментов. Материалы II Междунар. конф. “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости” (ФПС’06). Звенигород, 9–13 октября, с. 33–34. Звенигород 2006.

2.

Впервые проведено комплексное экспериментальное исследование магнитных, электрических, упругих и диэлектрических свойств соединений манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175; 0.125$) вблизи различных структурных фазовых переходов в широком температурном и частотном диапазонах с целью установления природы фазового расслоения в манганитах.

Аннотация. В результате целенаправленных экспериментов по изучению фазового расслоения в монокристаллах манганитов $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175; 0.125$) были впервые обнаружены: влияние двухфазности кристаллической структуры манганитов на процесс намагничивания и поведение удельного электросопротивления вблизи пересечения магнитного и структурного фазовых переходов; акустическими методами на частоте $f = 770$ МГц обнаружена генерация когерентных магнитоупругих колебаний на микронеоднородностях (магнитоупругих доменах), присущих манганитам выше приведённых составов; обнаружено различие в скоростях ультразвуковых волн, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль выделенной кристаллографической оси в манганитах (эффект невзаимности). Показано, что обнаруженный эффект может быть связан с антиферромагнитным упорядочением в структурных фазах манганитов; акустическими методами на частоте $f = 500$ МГц обнаружено значительное изменение параметров акустических волн во всём интервале существования кооперативного искажения структуры манганитов ($\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ $x = 0.125$), вызванное кооперативным эффектом Яна-Теллера.

Полученные результаты объясняются физическими моделями, рассматриваемыми в зарубежной и отечественной литературе.

Лаборатория магнитоакустики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Шакирзянов М.М.

Отв. исполнители: Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Потапов А.А.

Публикации:

1. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В., Потапов А.А.: Микроскопические неоднородности в кристаллах манганита $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$) и генерация на них когерентных магнитоупругих колебаний. *Письма в ЖЭТФ* **78**, вып. 5, 753 (2003)
2. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В., Леонтьев В.Е., Потапов А.А.: Взаимосвязь магнитных и структурных фаз в монокристаллах манганита $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.175$). *Письма в ЖЭТФ* **80**, вып. 5, 354 (2004)
3. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В., Куркин М.И., Потапов А.А., Николаев В.В., Леонтьев В.Е.: Эффект невзаимности при распространении ультразвука в монокристалле манганита лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$. *ФТТ* **48**, вып. 2, 309–311 (2006)
4. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Мамин Р.Ф., Потапов А.А.: Высокочастотные ультразвуковые исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$. *ФТТ* **49**, вып. 3, 496–499 (2007)

3.

Впервые наблюдается и исследовано фотонное эхо в кристалле $\text{LiLuF}_4:\text{Er}^{3+}$. Измерения проведены в очень слабых и даже нулевых магнитных полях, в отличие от эхо-экспериментов на ионах Er^{3+} в других кристаллических матрицах. Наблюдена сильная зависимость сигнала эха от величины и направления магнитного поля. Поскольку ион трёхвалентного эрбия является одним из наиболее оптимальных носителей оптической информации, то данные результаты показывают, что многоканальной передачей информации можно управлять с помощью слабого магнитного поля.

Аннотация. Измерялась интенсивность двухимпульсного фотонного эха в обращённом режиме в кристалле $\text{LiLuF}_4:\text{Er}^{3+}$ (переход $^4\text{I}_{15/2} \rightarrow ^4\text{F}_{9/2}$, длина волны – 6536 Å, рабочая температура – 1.9 К, концентрация ErF_3 – 0.025 вес.%). Направления распространения лазерных импульсов были перпендикулярны кристаллической оси. Измерения проводились в слабых магнитных полях (до 1200 Э). Исследовалась зависимость интенсивности эха от величины и направления магнитного поля относительно кристаллической оси и от временной задержки между первым и вторым импульсами. Было обнаружено, что при увеличении магнитного поля от нулевого значения интенсивность фотонного эха вначале экспоненциально растёт, а затем, после некоторого плато, экспоненциаль-

но уменьшается. Параметры, описывающие экспоненциальный рост и уменьшение, не зависят от направления магнитного поля. Значение магнитного поля ($20 \div 200$ Э), при котором интенсивность эха достигает максимума, и величина этого максимума уменьшаются с увеличением задержки между импульсами и увеличением угла Θ между магнитным полем и кристаллической осью. Измерения показали, что интенсивность эха экспоненциально уменьшается с увеличением Θ . При этом показатель экспоненты не зависит от величины поля. Интенсивность эха, как наблюдалось в эксперименте, экспоненциально затухает с увеличением времени задержки между импульсами. Время фазовой релаксации T_2 зависит от величины и направления магнитного поля. В нулевом магнитном поле $T_2 = 202 \pm 16$ нс. Предложена феноменологическая формула, качественно описывающая полученные результаты. Изучены поляризационные свойства эха.

Лаборатории нелинейной оптики и магнитоакустики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководители: Самарцев В.В., Шакирзянов М.М.

Отв. исполнители: Лисин В.Н., Самарцев В.В., Шегеда А.М., Зуйков В.А.

Публикации:

1. Lisin V.N., Samartsev V.V., Shegeda A.M., Zuikov V.A., Korobleva S.L.: Low magnetic fields behavior of photon echo in $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$. *Laser Phys. Lett.* **3**, no. 9, 423–426 (2006)
2. Samartsev V.V., Lisin V.N., Shegeda A.M., Zuikov V.A., Rosenzweig Ju.K.: Weak magnetic field behavior of the backward photon echo in $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$. *Laser Phys.* **17**, no. 2, 1–5 (2007)

4.

На основании прецизионных измерений, выполненных с помощью атомно-силового микроскопа, установлено, что гигантское магнитосопротивление, наблюдаемое в наноконтактах, электрохимически полученных между никелевыми микропроводами, обусловлено в значительной степени эффектом магнитострикции.

Аннотация. Достигнута рекордная чувствительность при измерении магнитострикции в никелевых микро- и наноструктурах. С помощью атомно-силового микроскопа, специально изготовленного из немагнитных материалов, удалось зарегистрировать изменение размеров никелевой микропровода в магнитном поле всего на 2 нм. На основании таких прецизионных измерений сделан вывод, что гигантское магнитосопротивление Ni наноконтактов, электрохимически полученных между Ni микропроводами, обязано в значительной степени относительному смещению микропроводов за счёт магнитострикции. Аналогичные измерения для наноплёнок Ni не выявили подобных смещений в пределах чувствительности измерений, поэтому планарные наноструктуры наиболее пригодны для получения баллистических магни-

торезистивных наноконтактов с минимальным вкладом магнитострикции.

Лаборатория физики и химии поверхности КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Бухараев А.А.

Публикации:

1. Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Прецизионные измерения магнитострикции в никелевых структурах, используемых для получения магниторезистивных наноконтактов. *Письма в ЖТФ* **32**, вып. 19, 72–78 (2006)
2. Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А., Гатиятов Р.Г.: Гигантское магнитосопротивление никелевых наноконтактов, полученных электрохимическим методом. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* № 2, 24–28 (2006)

5.

Предложена и теоретически разработана оптическая квантовая память, основанная на эффекте фотонного эха в оптически плотной среде с использованием контролируемой инверсии неоднородного уширения линии.

Аннотация. Предлагаемый проект квантовой памяти рассматривается в качестве важной альтернативы существующему известному проекту, основанному на эффекте электромагнитно-индуцированной прозрачности. Использование фотонного эха для квантовой памяти обещает следующие принципиальные преимущества: 1) возможность одновременного сохранения и воспроизведения большого числа волновых пакетов светового поля; 2) большее быстроедействие; 3) многообразие способов восстановления записанной в среде квантовой информации.

Первые экспериментальные результаты, показывающие на возможность реализации квантовой памяти на предлагаемом эффекте фотонного эха опубликованы в работе Alexander A.L., Longdell J.J., Sellars M.J., Mansok N.B.: *Phys. Rev. Lett.* **96**, 043602 (2006)

В настоящее время растёт интерес к данному варианту квантовой памяти в сообществе исследователей квантовой информатики (активно ведутся работы по реализации данного проекта в лабораториях квантовой информатики: Швейцарии (проф. Н. Жезен), Австралии (проф. Н. Мансон), Канаде (проф. В. Титтель), Швеции (проф. С. Кролл).

Лаборатория молекулярной фотохимии КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Моисеев С.А.

Публикации:

1. Moiseev S.A., Simon C., Gisin N.: Photon echo quantum memory for arbitrary non-stationary light fields. E-print: quantum-ph/0609173 (2006)
2. Moiseev S.A.: Quantum memory protocol in QED cavity based on photon echo. E-print: quantum-ph/0605035 (2006)

3. Moiseev S.A.: Quantum memory for intensive light fields based on the photon echo technique. *Bull. Rus. Acad. of Sci. Phys.* **68**, 1260 (2004)
4. Moiseev S.A., Ham B.S.: Photon-echo quantum memory with efficient multipulse reading. *Phys. Rev. A* **70**, 063809 (2004)
5. 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)
6. Moiseev S.A., Kröll S.: Complete reconstruction of the quantum state of a single-photon wave packet absorbed by a Doppler-broadened transition. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 173601(4) (2001)

6.

Впервые обнаружено явление спиновой (магнитной) поляризации ионов кислорода в ферромагнитных образцах TiO_2 , содержащих имплантированную примесь кобальта.

Аннотация. Механизм взаимодействия магнитных ионов примеси, приводящий к ферромагнетизму в магнито-разбавленных оксидных полупроводниках, является предметом интенсивных дискуссий и исследований. В контексте проблемы мы синтезировали ферромагнитные образцы широкозонного n-типа полупроводника диоксида титана путём высокодозной имплантации ионов кобальта в исходно диамагнитные монокристаллические пластинки TiO_2 структуры рутила. Используя измерения величины магнитного циркулярного дихроизма (МЦД) в скользящей геометрии для циркулярно-поляризованных рентгеновских лучей, были выполнены исследования магнитной поляризации, как имплантированной примеси кобальта, так и структурообразующих элементов – титана и кислорода при различных значениях внешнего магнитного поля. В пределах чувствительности метода не удалось зарегистрировать сигнал МЦД от ионов титана. Однако сильный магнитный дихроизм наблюдался на краю рентгеновского поглощения $L_{2,3}$ линий кобальта и менее интенсивный на краю K линий поглощения кислорода, что указывает на спиновую поляризацию близлежащих к кобальту ионов кислорода в имплантированной матрице TiO_2 . Знак поляризации, форма регистрируемых петель магнитного гистерезиса и величина коэрцитивного поля (1.9 кЭ при температуре 30 К) на ионах Co и O полностью идентичны. Полученные результаты указывают на значительную роль кислородной подрешётки в установлении дальнотействующего ферромагнитного порядка в диоксиде титана, легированном кобальтом.

Лаборатория радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН; Институт экспериментальной физики твёрдого тела Рурского университета, Бохум, Германия.
Руководители: Хайбуллин Р.И., Тагиров Л.Р.

Публикации:

1. Nefedov A., Akdogan N., Zabel H., Khaibullin R.I., Tagirov L.R.: Spin polarization of oxygen atoms in ferromagnetic, Co-doped rutile TiO_2 . *Appl. Phys. Lett.* **89**, 182509(3) (2006)

7.

Впервые обнаружен эффект одновременного проявления различных по знаку нелинейных поглощений при пикосекундных лазерных воздействиях в видимом спектральном диапазоне вблизи плазмон-поляритонного резонанса в металлических наночастицах.

Аннотация. При помощи имплантации ионов Cu^+ с энергией 50 кэВ и дозами порядка $8 \cdot 10^{16}$ ион/см² в кварцевом стекле (SiO_2) при высоких значениях ионного тока синтезирован новый нелинейно-оптический композиционный материал: SiO_2 с металлическими наночастицами. Методом Z-сканирования с использованием второй гармоники ($\lambda = 532$ нм) пикосекундного Nd:YAG лазера с длительностью импульсов 55 пс исследован процесс нелинейного оптического поглощения у металлических наночастиц при возбуждении в спектральном диапазоне вблизи плазмон-поляритонного резонанса. Впервые экспериментально обнаружен эффект одновременного проявления различных по знаку двухфотонного и насыщенного поглощений при пикосекундных временах лазерного воздействия. Для данного типа образца определён коэффициент двухфотонного поглощения β , оказавшийся равным $6 \cdot 10^{-6}$ см/Вт, и оценена интенсивность насыщения, составившая $4.3 \cdot 10^8$ Вт/см² при интенсивности лазерного излучения $5.4 \cdot 10^9$ Вт/см². Наблюдаемый нелинейно-оптический эффект у металлических наночастиц в диэлектрической матрице представляет практический интерес в области сверхбыстрых оптических переключений и для синхронизации мод лазерного резонатора.

Лаборатория радиационной физики КФТИ КазНЦ РАН.

Руководители: Степанов А.Л., Файзрахманов И.А., Хайбуллин И.Б.

Публикации:

1. Stepanov A.L.: Optical properties of metal nanoparticles formed by ion implantation and modified by laser annealing. NATO Advanced Study Institute (Sozopol, Bulgaria 2005) “Functional properties of nanostructured materials”, vol. 223, pp. 139–160. Dordrecht: Springer 2006.

8.

В наноструктурных материалах – жидкокристаллических дендримерных комплексах меди (II), обладающих колончатой мезофазой, обнаружен эффект валентной

таутомеризации меди, сопровождающийся электронным транспортом, и высокая степень ориентирования ($S = 0.93$) дендримерных комплексов в магнитном поле в лиомезофазах при комнатной температуре, близкая для систем с полным ($S = 1$) упорядочением.

Аннотация. Методом ЭПР изучены жидкокристаллические комплексы меди(II) с поли(пропилен имин) дендримерным лигандом (L) первой (комплекс **1**) и второй (комплекс **2**) степени генерации, обладающие колончатой мезофазой и имеющие различное содержание меди ($x = \text{Cu/L}$). Определена структура, координация и геометрия координационного узла иона меди для различных мест комплексации в полостях дендримерного лиганда. Идентификация структуры и магнитных свойств образующихся комплексов осуществлена с использованием ориентирующего эффекта магнитного поля. Впервые обнаружена способность дендримерных комплексов меди ориентироваться в магнитном поле $H = 0.8$ Тл при комнатной температуре в лиомезофазах, которые индуцируются при растворении комплексов в изотропных (инертных) растворителях. Показано, что степень ориентирования (S) в магнитном поле различна, зависит от места комплексации иона меди в дендримерном лиганде и может достигать значения $S = 0.93$ близкого для систем с полным ($S = 1$) упорядочением.

Впервые в дендримерных комплексах **1** ($x = 1.9$) (голубого цвета), имеющих димерную структуру, обнаружен активированный температурой эффект валентной таутомеризации меди, сопровождающийся электронным транспортом. Оценка энергии активации процесса электронного транспорта показала, что она равна 0.35 мэВ. Найденное значение свидетельствует о низкоэнергетической зарядовой динамике и туннельном механизме процесса электронного транспорта.

Лаборатория магнитной радиоспектроскопии КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Домрачева Н.Е.

Публикации:

1. Domracheva N.E., Mirea A., Schwoerer M., Torre-Lorente L., Lattermann G.: Magnetic properties of poly(propylene imine) copper dendromesogenic complexes: an EPR study. Chem. Phys. Chem. **7**, no. 12, 2512–2524 (2006)
2. Domracheva N.E., Mirea A., Schwoerer M., Torre-Lorente L., Lattermann G.: EPR characterisation of Cu(II) complexes of poly(propylene imine) dendromesogens: using the orienting effect of a magnetic field. Chem. Phys. Chem. **6**, no. 1, 110–119 (2005)
3. Domracheva N., Mirea A., Schwoerer M., Lattermann G., Torre-Lorente L.: Magnetic features of copper(II) dendromesogenic complexes: an EPR study. V Asia Pacific EPR/ESR Symposium. Novosibirsk, August 24–27, p. 51. Novosibirsk 2006.

9.

Показана возможность когерентного контроля коллективного спонтанного излучения протяжённой системы атомов и определены оптимальные условия использования коллективных многоатомных состояний в системах оптической квантовой памяти.

Аннотация. Разработан метод когерентного контроля коллективного спонтанного излучения протяжённой системы атомов, позволяющий преобразовывать сверхизлучательные многоатомные состояния в субизлучательные и обратно. Показано, что данный метод можно использовать в устройствах оптической квантовой памяти для записи и воспроизведения однофотонных волновых пакетов, являющихся носителями квантовой информации в системах оптической связи. Определены оптимальные условия функционирования таких устройств и предложены две схемы реализации: активная, использующая когерентные 2π -импульсы, и пассивная, использующая фазовые модуляторы.

Лаборатория нелинейной оптики КФТИ КазНЦ РАН.
Руководитель: Самарцев В.В.

Отв. исполнители: Калачёв А.А., Самарцев В.В.

Публикации:

1. Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Квантовая память в режиме оптического субизлучения. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 514–517 (2006)
2. Kalachev A.A., Kröll S.: Coherent control of collective spontaneous emission in an extended atomic ensemble and quantum storage. Phys. Rev. A **74**, 023814(10) (2006)

10.

В экспериментах по формированию обстановочного условного рефлекса у виноградной улитки впервые на моллюсках показано явление зависящего от белкового синтеза процесса реактивации долговременной контекстуальной памяти. Обнаружено, что для стабилизации памяти после напоминания (реконсолидации) требуется новый синтез белка как раз после напоминания.

Аннотация. Было исследовано влияние блокатора белкового синтеза анизомицина на контекстуальную память виноградной улитки. Поведенческие ответы до сессии обучения в двух контекстах (обстановках – на шаре и плоской поверхности) были схожими. Через 2 дня после серии электрошоков (в течение 5 дней) наблюдалось контекстуальное обусловливание, которое заключалось в значительном отличии амплитуды поведенческой реакции улитки на стандартное тактильное раздражение, только в той обстановке, где наносились электрошоки. На другой день после тестирования контекстуального обучения выполнялась “сессия напоминания”, сразу после которой улиткам инъецировали анизомицин либо

физиологический раствор. Тестирование долговременной контекстуальной памяти показывает, что инъекция блокатора биосинтеза анизомицина разрушает контекстуальное обусловливание. В контрольной серии, где улитки были инъецированы анизомицином либо физиологическим раствором без напоминания, не наблюдалось нарушения долговременной контекстуальной памяти, в то время инъекция анизомицина во время сессии обучения (тренировки) полностью нарушала (тормозила) долговременную память. Не было обнаружено эффектов анизомицина на кратковременную память.

Лаборатория биофизики КФТИ КазНЦ РАН, лаборатория клеточной нейробиологии обучения Института высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН, Москва.

Руководители: Балабан П.М., Гайнутдинов Х.Л.

Отв. исполнители: Гайнутдинова Т.Х., Исмаилова А.И.

Публикации:

1. Gainutdinova T.Kh., Tagirova R.R., Ismailova A.I., Muranova L.N., Gainutdinov Kh.L., Balaban P.M.: Protein synthesis-dependent reactivation of a contextual conditioned reflex in the common snail. *Neurosci. Behav. Physiol.* **36**, no. 2, 203–207 (2006)
2. Gainutdinov Kh.L., Gainutdinova T.Kh., Balaban P.M.: Reconsolidation of a context long-term memory in the terrestrial snail after reminder requires protein synthesis. VIII East Eur. Conf. of the Int. Soc. for Invertebrate Neurobiology “Simpler Nervous Systems”. Kazan, September 13–17, pp. 19–20. Kazan 2006.
3. Гайнутдинова Т.Х., Исмаилова А.И.: Исследование механизмов зависимой от белкового синтеза реактивации условного обстановка рефлекс у виноградной улитки – анализ влияния анизомицина при напоминании с подкреплением. X Пущинская школа-конф. молодых учёных “Биология – наука XXI века”, 17–21 апреля, с. 131–132. Пущино 2006.
4. Gainutdinova T.H., Tagirova R.R., Ismailova A.I., Muranova L.N., Samarova E.I., Gainutdinov Kh.L., Balaban P.M.: Reconsolidation of a context long-term memory in the terrestrial snail requires protein synthesis. *Learning and Memory* **12**, no. 6, 620–625 (2005)

11.

Впервые экспериментально установлено, что по отношению к редкоземельному иону гадолиния, в отличие от ионов 3d-переходной группы, даже в максимально гидратированном состоянии в универсальных катионитах, проявляются селективные свойства, усиливающиеся по мере обезвоживания полимерной матрицы.

Аннотация. Методом ЭПР обнаружено, что в максимально гидратированных универсальных сульфосолах (которые являются наиболее доступными для практического применения ионитами) образуются, помимо аквакомплексов, закреплённые комплексы гадолиния, в формиро-

вании ближайшего окружения которых участвуют функциональные SO_3^- -группы. Доля этих комплексов растёт по мере удаления свободной воды из матрицы ионитов. Показано, что спектры ЭПР закреплённых комплексов описываются при выполнении условий сильных кристаллических полей ($D \gg h\nu$) с присутствием аксиальных (D) и ромбических (E) компонент. Проведены расчёты эффективных g -факторов и величин параметров $\lambda = E/D$ для двух наблюдаемых типов закреплённых комплексов. Показано, что наличие или отсутствие температурных зависимостей ширины линий сигналов ЭПР в гидратированных ионитах является наглядным первичным тестом для разделения свободных или закреплённых комплексов в полимерной матрице. Для аквакомплексов рассчитаны времена корреляции ориентационного движения и проведены оценки степени его заторможенности при переходе от объёма раствора к ионообменным полимерам с различными степенями влажности. Исследование диполь-дипольных взаимодействий между ионами гадолиния позволило определить локальные концентрации сорбированных ионов ($C_{\text{лок}} > C_0$), образующихся в порах больших размеров. Проведённые оценки показали, что в таких порах могут формироваться кластеры, содержащие до нескольких десятков комплексов.

Лаборатория магнитной радиоспектроскопии КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Вишневская Г.П.

Отв. исполнитель: Фролова Е.Н.

Публикации:

1. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Константинов В.Н., Фахрутдинов А.Р.: ЭПР ионов Gd^{3+} в универсальных катионитах КУ-2 и КУ-1. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 1, с. 184–188. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
2. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н.: Структура и молекулярная подвижность высокоспиновых комплексов Gd(III) в растворах и универсальных полиэлектролитах по данным ЭПР и электронной релаксации. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Грунин Ю.Б. и др., ред.), вып. XII, ч. 1, с. 151–161. Йошкар-Ола: МарГТУ 2005.
3. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Константинов В.Н., Фахрутдинов А.Р.: Состояние ионов Gd^{3+} в сульфо- и сульфифенолсодержащих ионообменных полимерах по данным ЭПР. *Журн. физ. химии* (2007) в печати.

12.

Обнаружена концентрационная зависимость перераспределения имплантированных атомов железа в кремнии в процессе импульсных воздействий, заключающаяся в преимущественном сегрегационном вытеснении атомов железа к поверхности кремния при низких концентрациях примеси и в диффузионном уширении профилей распределения при высоких концентрациях примеси.

Аннотация. С использованием метода резерфордовского обратного рассеяния изучено перераспределение атомов железа в имплантированных слоях кремния, подвергнутых наносекундной импульсной обработке. Обнаружено, что характер глубинного распределения имплантированных атомов железа в кремнии при импульсных воздействиях зависит от концентрации внедрённой примеси. При низких концентрациях примеси имеет место преимущественное вытеснение атомов железа к поверхности (сегрегация), связанное с низкой растворимостью железа в кремнии. В случае высоких концентраций наблюдается диффузия атомов железа вглубь кристалла кремния, связанная с увеличением коэффициента распределения примеси с ростом концентрации.

Лаборатория интенсивных радиационных воздействий КФТИ КазНЦ РАН.

Руководитель: Баязитов Р.М.

Отв. исполнители: Баталов Р.И., Нурутдинов Р.М.

Публикации:

1. Bayazitov R., Batalov R., Nurutdinov R., Shustov V., Gaiduk P., Dezsi I., Kotai E.: Iron distribution in the implanted silicon under the action of high-power pulsed ion and laser beams. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **240**, no. 1-2, 224–228 (2005)
2. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М.: Формирование и свойства тонкоплёночных полупроводниковых соединений на основе кремния на кремнии с использованием ионной имплантации и импульсных воздействий. Изв. ВУЗов. Материалы электрон. техники № 1, 28–34 (2006)

Итоги конкурса научных работ сотрудников КФТИ 2006 года

В рамках ежегодной итоговой конференции КФТИ был проведён конкурс научных работ КФТИ КазНЦ РАН за 2006 год.

Из 83 докладов, представленных на стендовой сессии, 17 было заявлено для участия в устной сессии, причём 1 доклад – вне конкурса. Учёный совет принял решение заслушать все доклады.

По итогам конкурса 2006 года присуждены одна первая, одна вторая и пять третьих премий.

1-е место

Лисин В.Н., Самарцев В.В., Шегеда А.М., Зуйков В.А.: Фотонное эхо в $\text{LiLuF}_4:\text{Er}^{3+}$ в слабых магнитных полях

2-е место

Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Мамин Р.Ф., Потапов А.А.: Высокочастотные ультразвуковые исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.125$)

3-е место

- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия Tm^{3+} и Tb^{3+} в синтетическом форстерите
- Ерёмина Р.М., Яцык И.В. (КФТИ), Муковский Я.М., Круг фон Нидда Х.А., Лойдл А. (Университет Аугсбурга, Германия): Определение области сосуществования ферромагнитных нанобразований в $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$, $\text{M} = \text{Ca}, \text{Ba}$
- Моисеев С.А., Арсланов Н.М.: Эффекты интерференции, взаимодействия и распространения световых полей в зонде ближнеполевой оптической микроскопии

- Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П. (КФТИ), Ивойлов Н.Г., Дулов Е.Н. (КГУ): Анизотропия тонких плёнок силицидов железа, синтезированных в магнитном поле
- Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А., Лобков В.С., Салихов К.М., Галяметдинов Ю.Г.: Внутримолекулярный перенос энергии в мезогенном аддукте европия(III)

В рамках традиционной ежегодной конференции молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН был проведён конкурс научных работ за 2006 год.

Конкурсная комиссия в составе: Таланов Ю.И., Богданова Х.Г., Соловаров Н.К. по итогам устной сессии присудила следующие призовые места:

1-е место

Калашников Д.А., Калинин А.А., Шкаликов А.В., Самарцев В.В.: Эффект поляризационной интерференции бифотонов при спонтанном параметрическом рассеянии света II-го типа в кристалле ВВО

2-е место

Панарина Н.Ю., Бухараев А.Н., Таланов Ю.И., Петухов В.Ю., Гумаров Г.Г., Валидов А.А.: Критический ток и линия необратимости тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, облучённых ионами Co и Fe с энергией 40 кэВ

3-е место

Бариев И.И., Ибрагимова М.И., Жеглов Е.П.: Исследование методом ЭПР особенностей протекания острой лучевой болезни при γ -облучении с малой мощностью дозы

Носители тока различной природы в купратах и их проявление в данных ряда экспериментов

Г. Б. Тейтельбаум

Лаборатория физики перспективных материалов

Анализ температурной зависимости коэффициента Холла в купратах свидетельствует о том, что с ростом допирования число носителей тока превышает число допантов, x , и зависит от температуры. Это обстоятельство обусловлено термоактивацией локализованных дырок. Сравнение с ARPES данными показывает, что энергия активации термически возбуждённых носителей равна разности между энергией антинодальных квазичастиц в окрестности $(0, \pi)$ и химпотенциалом. Установлено, что переход от режима маргинальной Ферми жидкости к псевдощелевому режиму происходит при температуре $T^*(x)$, при которой число термоактивированных дырок сравнивается с числом носителей, созданных путём внешнего допирования. Обсуждены проявления обнаруженных особенностей в магнитных свойствах и в (T, x) -фазовой диаграмме.

Известно, что трансформация моттовского изолятора в металл или даже сверхпроводник осуществляется с помощью внешнего допирования. При этом считается, что, прежде всего, дырки возникают на кислородных орбиталях. Однако, с увеличением допирования, x , подобная ситуация становится менее очевидной ввиду того, что заряженные допанты могут вызывать значительные изменения в энергетической структуре системы. В настоящей работе проанализированы недавние экспериментальные данные для лантан-стронциевых купратов, проливающие свет как на фактическое число носителей тока и их природу, так и на устойчивость d^9 конфигурации, отвечающей за существование локальных магнитных моментов на медных узлах.

Наш анализ был начат с имеющихся экспериментальных данных [1, 2] по температурной зависимости коэффициента Холла для соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) до температур порядка 1000 К. Мы установили, что особенности транспортных свойств сверхпроводящих купратов в широком диапазоне температур и допирования стронцием могут быть описаны с помощью простой модели. Она включает два типа носителей заряда, относительный вклад которых сильно зависит от температуры. При этом полное число носителей, следующее из эффекта Холла, даётся простой формулой

$$n_{\text{Hall}} = n_0(x) + n_1 \cdot \exp(-\Delta(x)/T), \quad (1)$$

где носители первого типа (с плотностью n_0) обусловлены внешним допированием, в то время как носители второго типа создаются за счёт термоактивации с активационной энергией $\Delta(x)$. На рис. 1 и 2 представлены результаты путём привязки экспериментальных данных с

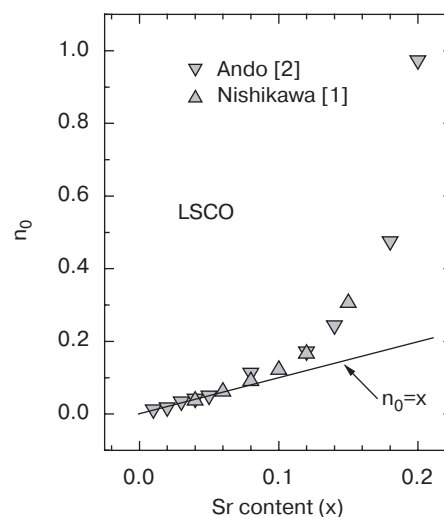


Рис. 1. Зависимость параметра $n_0(x)$, полученная путём привязки выражения (1) к экспериментальным данным [1, 2] по температурной зависимости коэффициента Холла для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

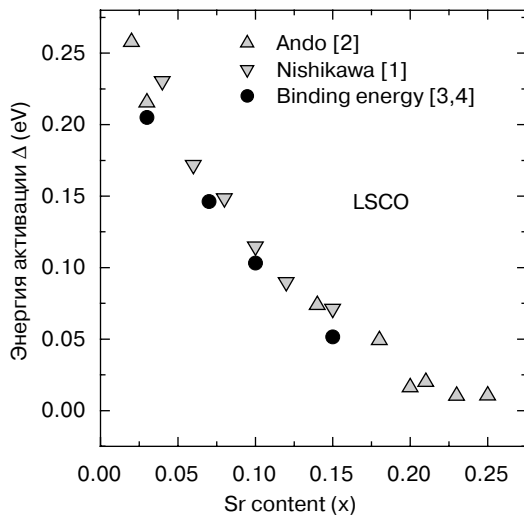


Рис. 2. Энергия активации $\Delta(x)$, полученная путём привязки выражения (1) к экспериментальным данным [1, 2] по температурной зависимости коэффициента Холла для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (треугольники), и расстояние между энергией антинодальных квазичастиц вблизи $(0, \pi)$ и химпотенциалом, определённое из ARPES [4, 5] (кружки).

помощью выражения (1). Отметим, прежде всего, нелинейную зависимость от допирования температурно-независимого вклада в плотность носителей (1), которая начинается при $x \sim 0.07$. Это обстоятельство указывает на примешивание медных орбиталей к зонным состояниям.

Было установлено, что зависимость активационной энергии от внешнего допирования связана с температурой псевдощели $T^*(x)$. Согласно нашим оценкам [3], $T^*(x)$ с хорошей точностью совпадает с температурой $T_0(x)$, при которой число термоактивированных носителей равно числу дырок, созданных за счёт внешнего допирования, а именно

$$T^*(x) \approx T_0(x) = -\Delta(x)/\ln x. \quad (2)$$

Согласно результатам проведённого нами анализа возможных процессов активации, наибольший вклад в транспортные свойства даёт тот из них, что связан со специфической формой поверхности Ферми (ПФ) соединений LSCO. Действительно, в этих соединениях в дополнение к электронным состояниям, соответствующим нодальным точкам ПФ вблизи химического потенциала, существуют так называемые низколежащие состояния в окрестности $(0, \pi)$ и других симметричных точек ПФ (так называемых ван-хововских “корыт”), для которых характерна высокая плотность состояний. Можно предположить, что электроны активируются из этих “корыт” и симметричных им точек и попадают в окрестность состояний вблизи химпотенциала, где они объединяются с сильно взаимодействующей электронной жидкостью. Следует также заметить, что активационная энергия $\Delta(x)$, полученная нами путём привязки холловских данных, совпадает с расстоянием между энергией антинодальных квазичастиц в окрестности $(0, \pi)$ и химпотенциалом, определённым недавно в экспериментах по ARPES [4, 5] (см. рис. 2).

Заметим, что обсуждавшиеся выше свойства носителей тока обуславливают специфические особенности температурной зависимости сопротивления. В частности, для предельно малого допирования Sr термическое возбуждение носителей должно привести к интересному транспортному явлению – температурно-независимому вкладу в проводимость. Оно связано с тем, что каждый термоактивированный носитель оставляет за собой локальный дефект в плоскости CuO_2 . Подобные дефекты служат рассеивающими центрами и отвечают за сопротивление при высоких температурах. Плотность таких дефектов равна плотности термоактивированных носителей тока, причём время жизни носителей определяется той же самой активационной энергией. Это приводит к температурно-независимому сопротивлению. Экспериментально подобная особенность проявляется в насыщении температурной зависимости сопротивления для образцов с предельно малым допированием, что, по-видимому, и наблюдалось недавно авторами [6].

Мы проанализировали возможную связь характерной формы ПФ с микроскопическим фазовым расслоением [7]. Было установлено, что изменение числа магнитных узлов (локализованных d^9 дырок) в процессе термоактивации сильно влияет на магнитные свойства купратов, приводя к специфической температурной зависимости их магнитной восприимчивости. Термоактивация существенно сказывается и на ядерной спиновой релаксации, так как она вызывает изменения магнитной конфигурации, ответственной за сверхтонкое поле на ядрах меди. Так как времена жизни термоактивированных состояний малы, то соответствующие конфигурационные флуктуации происходят на большой частоте, что приводит к появлению специфического канала ядерной релаксации. Обсуждено проявление подобных особенностей в ряде экспериментов по ЯМР и спиновой релаксации.

Автор благодарен Л. П. Горькову, совместно с которым были получены все представленные здесь результаты. Он также признателен И. Андо (Y. Ando) за знакомство с данными измерений эффекта Холла до их опубликования и Д. Пайнсу (D. Pines) за полезные обсуждения. Работа была частично поддержана в рамках проекта РФФИ (№ 04-02-17137).

Литература

1. Nishikawa T., Takeda J., Sato M.: J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 1441 (1994)
2. Ando Y., Kurita Y., Komiyama S., Ono S., Segawa K.: Phys. Rev. Lett. **92**, 197001 (2004); Ono S., Komiyama S., Ando S. (to be published)
3. Gor'kov L.P., Teitelbaum G.B.: Phys. Rev. Lett. **97**, 247003 (2006)
4. Yoshida T., Zhou X.J., Tanaka K., et al.: cond-mat/0510608
5. Yoshida T., Zhou X.J., Sasagawa T., et al.: Phys. Rev. Lett. **91**, 027001 (2003)
6. Padilla W.J., Lee Y.S., Dumm M., et al.: cond-mat/0509307
7. Gor'kov L.P., Teitelbaum G.B.: JETP Lett. **80**, 221 (2004); Physica B **359-361**, 509 (2005); Solid State Commun. **136**, 523 (2005); New Challenges in Superconductivity: Experimental Advances and Emerging Theories. NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, vol. 183, pp. 55–63. Wien-New York: Springer 2005.

Особенности распространения акустических волн вблизи структурного фазового перехода в манганите $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$

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

Лаборатория магнитоакустики

Исследованы особенности фазового перехода из неупорядоченного в упорядоченное орбитальное состояние в монокристалле $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$, вызванное кооперативным эффектом Яна-Теллера. Обнаружено значительное изменение параметров акустических волн во всем интервале температур существования кооперативного искажения структуры. Приложение внешнего магнитного поля смещает структурный фазовый переход в сторону низких температур.

Интерес к изучению манганитов возник, прежде всего, с обнаружением в них эффекта колоссального магнитосопротивления (КМС). Вскоре выяснилось, что КМС в них связано с особенностями не только электрических и магнитных, но также и структурных свойств, что объясняется сильным взаимодействием электронной, магнитной и решёточной подсистем и наличием структурных и магнитных фазовых переходов. Однако природа КМС пока неясна, поскольку предложенная модель магнитного двухфазного состояния [1] не объясняет всего многообразия экспериментальных фактов. Более того, становится все более очевидным, что природа КМС не описывается одним механизмом и может зависеть в определённых составах манганитов не только от магнитных, но и от диэлектрических фаз.

Монокристаллы манганита $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ с $x = 0.125$, начиная с самого начала исследования манганитов и до наших дней, являются модельными образцами для изучения сложного взаимодействия решётки, спинового, орбитального и зарядового порядка и его влияния на физические свойства. В зависимости от температуры, в них были обнаружены магнитный и структурные переходы [2].

В последние годы с помощью более совершенных методов нейтронной дифракции и высокоразрешающей дифракции синхротронных рентгеновских пучков были получены новые данные по фазовым переходам и структурным состояниям [3–5]. В частности, было установлено наличие при температуре выше $T = 300$ К однофазного состояния, соответствующего орторомбической структуре. При понижении температуры от $T = 300$ К происходит структурный фазовый переход первого рода с центром вблизи $T = 280$ К от орторомбической к моноклинной структуре. Ниже $T = 180$ К возникает переход от моноклинной структуры к триклинной. По расщеплению пиков рефлексов Х. Кавано с соавторами [2] предположили, что ниже температуры структурного перехода происходит значительное увеличение ян-теллеровских (ЯТ) искажений. В работе Я. Гека с соавторами [4] это предположение подтверждалось измерением

стрикции образца, которая резко возрастала при структурном переходе и при дальнейшем понижении температуры плавно росла. Однако следует отметить, что определение решёточных параметров и типов кристаллической решётки с помощью нейтронной или рентгеновской дифракции, как отмечают сами авторы, в ряде случаев весьма затруднительно вследствие расщепления пиков рефлексов и большим их перекрытием. Более того, до сих пор нет единой модели характера ЯТ упорядочения в интервале существования орторомбической фазы. Ранее предполагалось, что он связан с зарядовым упорядочением среди ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} [3]. Однако, позднее [4], с помощью подобных же экспериментов предпочтение было отдано орбитальному упорядочению.

Эти обстоятельства побудили нас провести исследования взаимосвязи магнитного и структурного упорядочений и их роли в эффекте КМС с помощью высокочастотных ультразвуковых (УЗ) волн и магниторезистивных измерений. Использование высокочастотного ультразвука на частоте $f = 500$ МГц с длиной волны $\lambda \approx 9$ мкм позволяет определить фазовые и пространственные неоднородности, обусловленные флуктуациями структуры или намагничённости. Кроме того, скорость и затухание УЗ волн весьма чувствительны к фазовым структурным или магнитным превращениям.

Мы провели исследования на образце манганита $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$. Данный образец имел цилиндрическую форму диаметром 5 мм и длиной 3.2 мм, торцы которого были плоскопараллельны. Измерения затухания и скорости продольной акустической волны проводились с использованием эхо-импульсной методики. Измерения проводились в интервале температур $T = 150\text{--}340$ К на частоте $f = 500$ МГц.

В результате проведённых нами экспериментов были обнаружены некоторые аномалии в затухании и скорости распространения акустических волн в температурном интервале $T = 260\text{--}300$ К (рис. 1). При понижении температуры образца, начиная с $T = 330$ К, сначала идёт плавное уменьшение затухания, а затем наблюдается резкое возрастание при $T = 290$ К с пиком вблизи

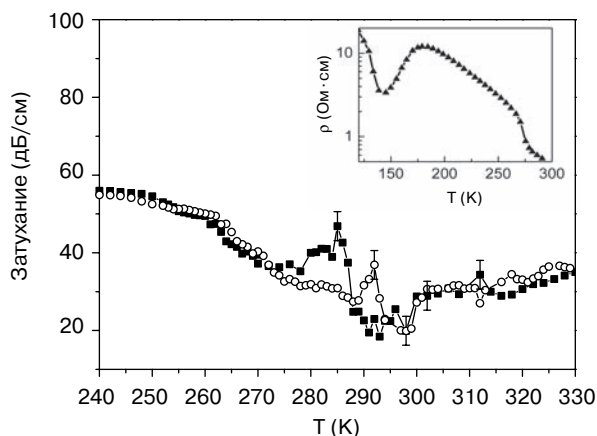


Рис. 1. Температурная зависимость затухания продольных акустических импульсов в $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ в отсутствие магнитного поля. ■, охлаждение; ○, нагрев. На вставке приведена зависимость удельного электросопротивления от температуры.

$T = 285$ К (рис. 1). Далее, при понижении температуры, происходит небольшое увеличение затухания. В обратном процессе нагревания от $T = 200$ К, поведение затухания было таким же, как и при охлаждении, однако произошёл сдвиг максимума затухания в сторону высоких температур. При нагревании образца пик затухания наблюдается уже при $T = 292$ К. Соответственно, при охлаждении образца от температуры $T = 330$ К скорость ультразвука практически постоянна (рис. 2). При достижении температуры $T = 290$ К скорость начинает резко уменьшаться и наблюдается минимум скорости при $T = 285$ К. При дальнейшем охлаждении скорость плавно уменьшается до $T = 250$ К. Во время нагревания образца опять происходит резкое уменьшение скорости, но уже с пиком при $T = 292$ К. Сдвиг максимума затухания на рис. 1 и минимума скорости на рис. 2 по температуре свидетельствует о температурном гистерезисе порядка 7 К.

Акустическим аномалиям можно сопоставить скачок удельного сопротивления образца в том же температур-

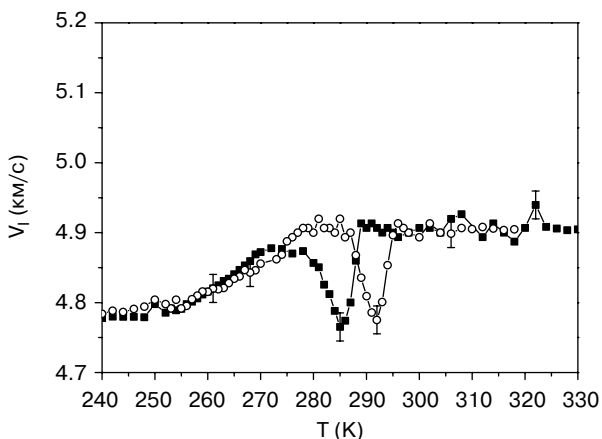


Рис. 2. Температурная зависимость скорости продольных акустических импульсов. ■, охлаждение; ○, нагрев.

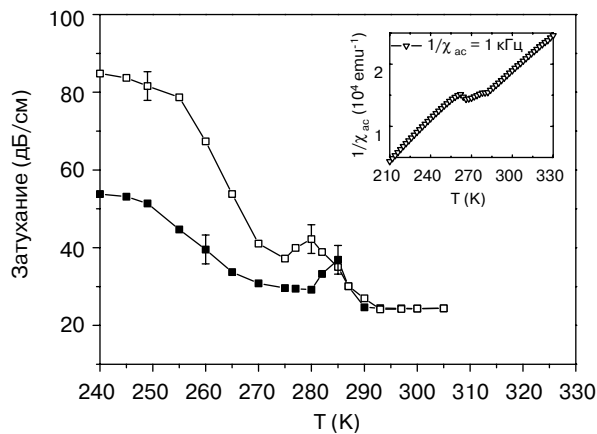


Рис. 3. Температурная зависимость затухания продольных акустических импульсов в отсутствие магнитного поля (■) и в приложенном внешнем магнитном поле 1 Тл (□). На вставке представлена зависимость магнитной восприимчивости от температуры.

ном диапазоне (рис. 1). Кроме акустических экспериментов, была измерена магнитная восприимчивость образца того же состава. Из графика на рис. 3 видно, что при температуре $T = 300$ К уже присутствует небольшая намагненность образца. При понижении температуры магнитная восприимчивость увеличивается. Мы предположили, что, если в нашем исследуемом температурном диапазоне присутствует намагненность, приложение внешнего магнитного поля может влиять на характер распространения ультразвука в образце. Было установлено, что приложение магнитного поля приводит к двум дополнительным особенностям в характере распространения акустических волн. Во-первых, пик затухания в поле $B = 1$ Т значительно уширяется. Также максимум затухания смещается от температуры $T = 285$ К к температуре $T = 280$ К. Во-вторых, возникает дополнительное затухание при приложении магнитного поля, начиная с температуры $T = 280$ К и ниже.

На рис. 4 представлена зависимость температуры, при которой происходит фазовый переход, от приложенного

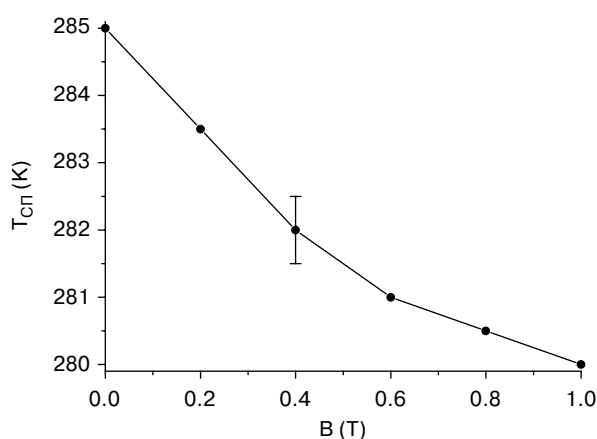


Рис. 4. Зависимость температуры, при которой происходит структурный фазовый переход (T_{cp}), от приложенного магнитного поля.

магнитного поля. Даже приложение небольшого магнитного поля приводит к сдвигу по температуре структурного перехода.

Значительное увеличение затухания и уменьшение скорости вблизи температуры $T = 285$ К показывает наличие в этом температурном интервале структурного фазового перехода. Температурный гистерезис в значениях максимума затухания и минимума в скорости акустических волн позволяет отнести данный структурный переход к фазовому переходу первого рода.

Основываясь на полученных нами данных и результатах работ [3–6], можно предположить, что возникновение структурного фазового перехода происходит при взаимной конкуренции двух процессов: увеличения намагниченности и увеличения кооперативных ЯТ искажений. Вследствие этого переход происходит скачком при одновременном возрастании ЯТ искажений и уменьшении намагниченности.

Наши измерения подтверждают наличие структурного перехода в этом температурном диапазоне. Исходя из того, что затухание акустических волн немного растёт после структурного перехода, можно предположить возрастание ЯТ искажения в этой структурной фазе. Поскольку структура искажается всё сильнее, возникает всё большее рассеяние ультразвуковых волн на этих искажениях. Это подтверждается ещё и тем, что в работе Х. Хазама с соавторами [7], наблюдалось смягчение модулей упругости ниже температуры структурного перехода в образце близкого состава со степенью замещения стронцием $x = 0.12$.

Таким образом, акустическими методами был обнаружен резкий структурный переход, причём впервые наблюдался гистерезис по температуре, что свидетельствует о фазовом переходе первого рода и наличии фазового расслоения. Затухание ультразвука ниже точки перехода может свидетельствовать об увеличении ЯТ искажений. Впервые обнаружено влияние магнитного поля на структурный переход, которое проявляется в смещении температуры перехода при приложении внешнего магнитного поля.

Работа поддержана грантами РФФИ (проект № 05-02-16087) и НИОКР РТ (№ 06-6.1-351).

Литература

1. Dagotto E.: Phys. Rep. **1**, 344 (2001)
2. Kawano H., Kajimoto R., Kubota M., Yoshizawa H.: Phys. Rev. B **53**, no. 22, R14709 (1996)
3. Yamada Y., Suzuki J., Oikawa K., Katano S., Fernandez-Baca J.A.: Phys. Rev. B **62**, no. 17, 11600 (2000)
4. Geck J., Wochner P., Bruns D., Buchner B., Gebhardt U., Kiele S., Reutler P., Revcolevschi A.: Phys. Rev. B **69**, no. 10, 104413 (2004)
5. Klingeler R., Geck J., Gross R., Pinsard-Gaudart L., Revcolevschi A., Uhlenbruck S., Buchner B.: Phys. Rev. B **65**, no. 17, 174404 (2001)
6. Papavassiliou G., Pissas M., Diamantopoulos G., Belesi M., Fardis M., Stamopoulos D., Kontos A.G., Hennion M., Dolinsek J., Ansermet J., Dimitropoulos C.: Phys. Rev. Lett. **96**, no. 9, 097201 (2006)
7. Hazama H., Goto T., Nemoto Y., Tomioka Y., Asamitsu A., Tokura Y.: Phys. Rev. B **62**, no. 22, 15012 (2000)

Фотонное эхо в $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$ в слабых магнитных полях

В. Н. Лисин, В. В. Самарцев, А. М. Шегеда, В. А. Зуйков

Лаборатория нелинейной оптики и лаборатория магнитоакустики

Впервые наблюдается и исследовано фотонное эхо в кристалле $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$. Измерения проведены в очень слабых и нулевых магнитных полях, в отличие от экспериментов по эхо на ионах Er^{3+} в других кристаллических матрицах. Наблюдена сильная зависимость сигнала эха и необратимой фазовой релаксации T_2 от величины и направления магнитного поля. Поскольку ион трёхвалентного эрбия является одним из наиболее оптимальных носителей оптической информации, то данные результаты показывают, что многоканальной передачей информации можно управлять с помощью слабого магнитного поля. Измерения проводились на энергетическом переходе $^4\text{I}_{15/2} \rightarrow ^4\text{F}_{9/2}$ ($\lambda = 6536 \text{ \AA}$) при температуре 2 К.

Введение

В настоящее время создаются и работают оптические эхо-процессоры, в которых носителями информации являются кристаллы, активированные редкоземельными ионами [1]. Необходимость развития многоканальной передачи информации по оптическим волокнам диктует продолжение исследований свойств редкоземельных ионов, например, Er^{3+} и Pr^{3+} , являющихся оптимальными носителями оптической информации [2–4]. Р. МакФарлайн и Р. Мельтзер с коллегами [5–10], используя метод фотонного эха, внесли существенный вклад в изучение кристаллов YLiF_4 , YAlO_3 и LaF_3 , допированных ионами трёхвалентного эрбия. В данной работе свойства Er^{3+} впервые исследовались в другой кристаллической матрице: LuLiF_4 . Отличительной особенностью данной работы от [5–10] является то, что наблюдение фотонного эха проводилось в слабых магнитных полях, не превышающих значения магнитного поля, создаваемого спином электрона Er^{3+} на ближайших ядрах фтора. Дело в том, что наиболее интересные особенности формирования фотонного эха происходят в ещё более слабых полях, сравнимых со значениями локального магнитного поля, создаваемого ядрами фтора на спине электрона.

Эксперимент

Фотонное эхо в $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$ (концентрация легирующих примесей ErF_3 0.0256 вес.%) возбуждалось на переходе $^4\text{I}_{15/2} \rightarrow ^4\text{F}_{9/2}$ иона Er^{3+} при температуре 2 К. Для возбуждения использовался импульсный перестраиваемый по частоте лазер на красителе (оксазин 17). Длительность импульсов составляла 10 нс, частота повторения ~ 12 Гц, спектральная ширина на половине высоты $\sim 0.1 \text{ \AA} \cong 6$ ГГц. Длина световой волны калибровалась по линиям спектра Ne с абсолютной точностью $0.5 \text{ \AA}$. Длина волны изучаемого перехода составила $\lambda = 6536 \text{ \AA}$. Сигналы двухимпульсного фотонного эха возбуждались в обра-

щённом режиме, когда первый импульс света является бегущей волной, а второй представляет собой стоячую волну. В этом случае фотонное эхо наблюдается в направлении, противоположном первому импульсу.

Угол между направлениями $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ распространения лазерных импульсов составлял приблизительно 5° , при этом, направление $\mathbf{k}_1$ распространения первого лазерного импульса совпадало с осью $\mathbf{a}$ вращения и было перпендикулярно оптической оси $\mathbf{C}$ кристалла ($\mathbf{k}_1 \perp \mathbf{C}$). Геометрия эксперимента показана на рис. 1. Постоянное магнитное поле $\mathbf{H}$ в эксперименте направлено перпендикулярно к оси $\mathbf{a}$ ($\mathbf{H} \perp \mathbf{a}$). Поляризация лазерных импульсов была линейной. Направления электрических полей световых волн у лазерных импульсов совпадали ($\mathbf{E}_1 \parallel \mathbf{E}_2$) и были направлены перпендикулярно магнитному полю ($\mathbf{E}_i \perp \mathbf{H}$). Образец мог вращаться в плоскости, перпендикулярной оси $\mathbf{a}$. Следует отметить, что при данном вращении изменяется ориентация оси $\mathbf{C}$ не только относительно магнитного поля, но и одновременно относительно поляризации световой волны лазерных импульсов. Сигналы обращённого фотонного эха (ОФЭ) детектировались скоростным фотоэлектронным умножителем (ФЭУ) ИЛУ-ФТ. Выходящие из фотоумножителя сигналы подавались на цифровой осциллограф Tektronix TDS 2022, где по 64 измерениям определялось среднее значение. Средние измеренные значения интенсивности эха с выхода осциллографа подавались на компьютер, где сохранялись и затем обрабатывались. Интенсивность и временная форма сигнала фотонного эха измерялась в зависимости от временной задержки между лазерными импульсами, от величины магнитного поля, от ориентации оси $\mathbf{C}$ относительно направления магнитного поля и поляризации лазерных импульсов при повороте образца вокруг оси $\mathbf{a}$.

Осциллограмма на рис. 2 показывает сигнал фотонного эха, а также первый и второй лазерные импульсы. На вставке этого рисунка изображена зависимость интенсивности сигнала фотонного эха от длины волны возбуждающего света. Видно, что спектральная ширина эхосигнала фактически совпадает со спектральной шири-

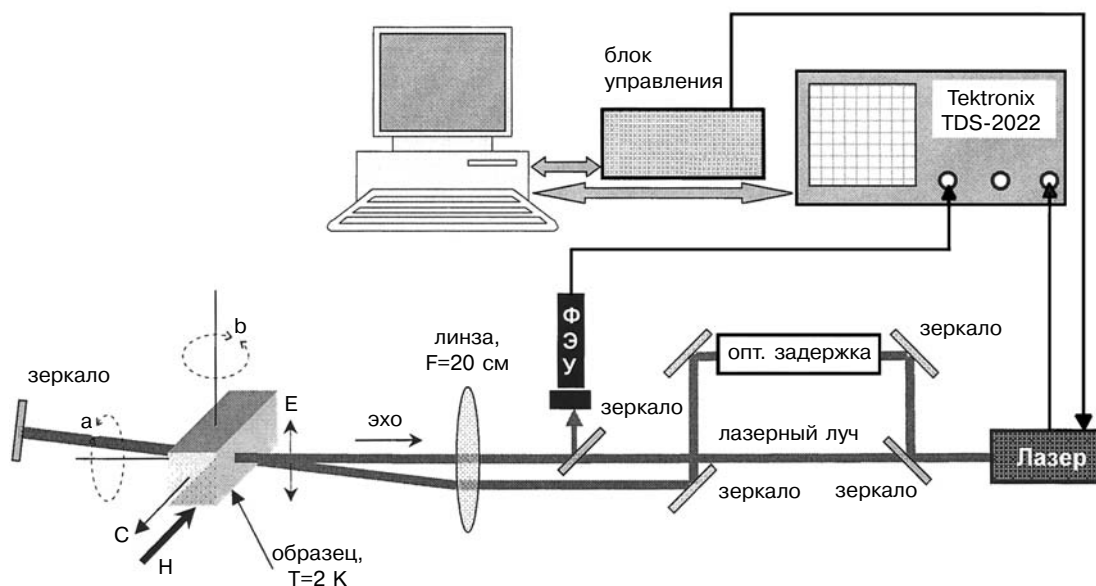


Рис. 1. Схема эксперимента. Магнитное поле H меняется в пределах $0 \div 1.3$ кЭ и направлено перпендикулярно первому лазерному импульсу. E – поляризация лазерных импульсов. Образец в криостате ($T = 2$ К) может вращаться в горизонтальной и вертикальной плоскостях, a и b – оси вращения.

ной лазерного импульса. Это означает, что неоднородная ширина спектральной линии $^4I_{15/2} \rightarrow ^4F_{9/2}$ иона Er^{3+} в матрице $LuLiF_4$ меньше, чем $0.1 \text{ \AA}$ (~ 6 ГГц) и может быть обусловлена статистическим распределением близких и отдалённых соседей ^6Li и ^7Li (что приводит к дублетной структуре с расщеплением 1.4 ГГц и соответствующей неоднородной шириной порядка 600 МГц в образцах $YLiF_4:Er^{3+}$ с естественным содержанием изотопов Li [9]).

Следует отметить, что в эксперименте интенсивность эха практически не изменялась при изменении угла между осью C и направлением распространения k_1 на $\pm 8^\circ$ (вращение вокруг оси b).

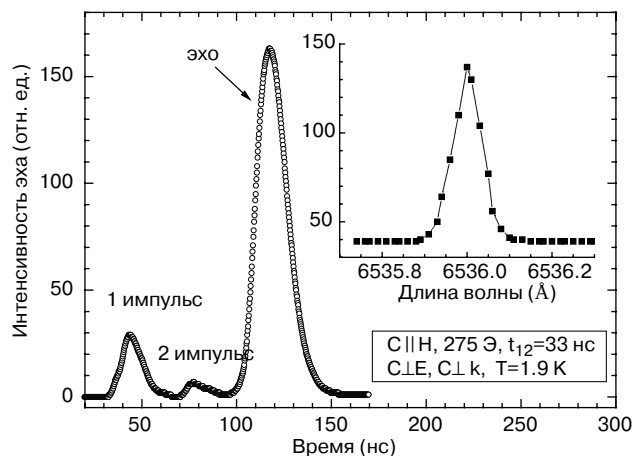


Рис. 2. Осциллограмма ОФЭ в $LuLiF_4:Er^{3+}$ при задержке между возбуждающими импульсами $t_{12} = 33$ нс. Ось C образца направлена вдоль магнитного поля H , $H = 275$ Э. На вставке показана зависимость сигнала ОФЭ от длины волны лазера.

Интенсивность эха, как можно видеть на рис. 3, сначала экспоненциально растёт при увеличении магнитного поля от нулевого значения, а затем, после некоторого плато, экспоненциально уменьшается. Параметр, описывающий экспоненциальный рост, не зависит от задержки между лазерными импульсами t_{12} и от поворота кристалла вокруг оси a . Параметр, описывающий экспоненциальное уменьшение, так же не меняется при вращении кристалла вокруг оси a , но сильно зависит от t_{12} . Значение магнитного поля, при котором интенсивность эха достигает максимального значения, и величина этого максимума уменьшаются с увеличением t_{12} и угла θ между осью C кристалла и магнитным полем H .

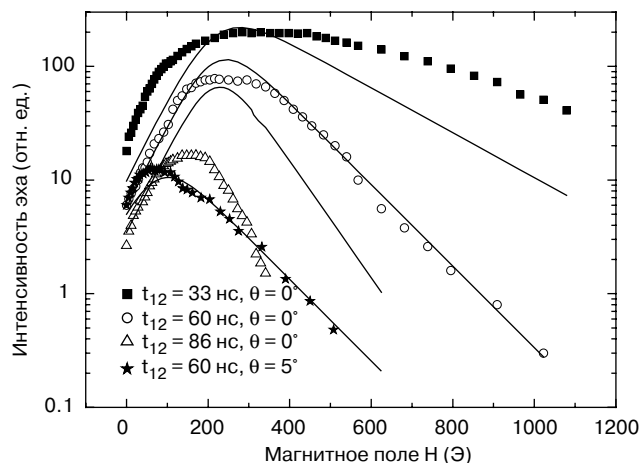


Рис. 3. Зависимость ОФЭ в $LuLiF_4:Er^{3+}$ от величины магнитного поля при различных t_{12} . Оптическая ось образца направлена либо вдоль поля ($\theta = 0^\circ$), либо под углом $\theta = 5^\circ$ (поворот вокруг оси a на рис. 1). Сплошные линии – кривые, полученные с помощью феноменологической формулы.

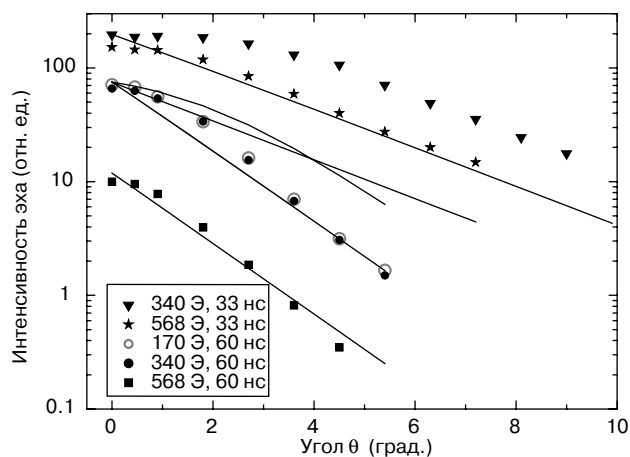


Рис. 4. Зависимость сигнала ОФЭ от угла θ между направлением оптической оси $\mathbf{C}$ и магнитным полем $\mathbf{H}$ для различных значений магнитного поля и t_{12} . Сплошные линии – кривые, полученные с помощью феноменологической формулы.

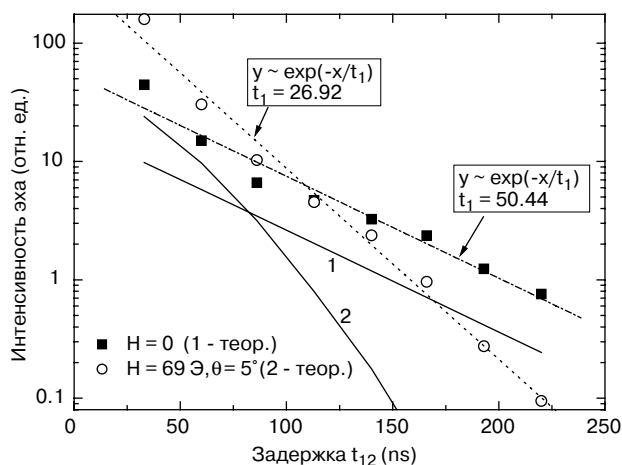


Рис. 5. Зависимость ОФЭ от времени задержки t_{12} между возбуждающими импульсами в магнитном поле. Пунктирные линии – аппроксимация экспериментальных точек экспоненциальным спадом. Сплошные линии – кривые, полученные с помощью феноменологической формулы.

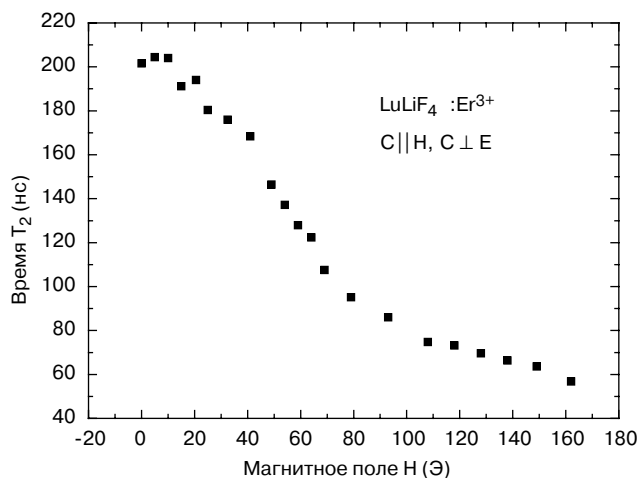


Рис. 6. Зависимость времени фазовой релаксации T_2 в $\text{LuLiF}_4:\text{Er}^{3+}$ от магнитного поля H .

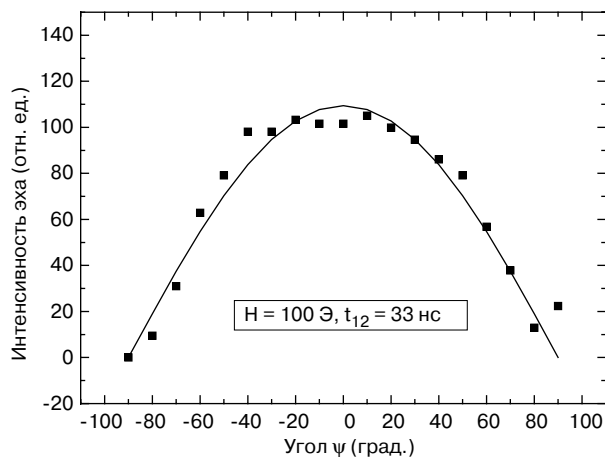


Рис. 7. Зависимость ОФЭ от угла ψ поворота поляризации второго лазерного импульса относительно первого импульса. Сплошная линия – симуляция экспериментальных точек выражением $A \cos(\psi)$, где $A = 109.4$.

Интенсивность эха принимает максимальное значение при ориентации $\theta = 0$ ($\mathbf{H} \perp \mathbf{E}_i$ и $\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}$) и экспоненциально (см. рис. 4) уменьшается с увеличением θ при повороте образца вокруг оси $\mathbf{a}$. Показатель экспоненты почти не зависит от величины магнитного поля, т.е. от нормальной к оси $\mathbf{C}$ компоненты магнитного поля.

Зависимость интенсивности эха от временной задержки t_{12} между лазерными импульсами показана на рис. 5. Интенсивность как функция t_{12} показывает экспоненциальное затухание, пропорциональное $\exp(-4t_{12}/T_2)$. Время фазовой релаксации T_2 зависит от величины и направления магнитного поля. В нулевом магнитном поле время $T_2 = 4t_1 \approx 202 \pm 16$ нс, а зависимость T_2 от магнитного поля при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}$ приведена на рис. 6.

И, наконец, были также исследованы поляризационные свойства обращенного фотонного эха. Интенсивность фотонного эха как функция угла ψ между поляризациями $\mathbf{E}_2$ и $\mathbf{E}_1$ возбуждающих импульсов показана на рис. 7. При этом изменялась поляризация второго импульса, а поляризация первого импульса и направление магнитного поля относительно оси $\mathbf{C}$ оставались фиксированными: $\mathbf{E}_1 \perp \mathbf{H}$ и $\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}$. На рисунке видно, что интенсивность имеет некоторое плато при $\psi = 0^\circ$ и близкие к нулю значения при $\psi = 90^\circ$.

Обсуждение результатов

Обычный механизм [11–14] зависимости интенсивности фотонного эха от величины и направления магнитного поля в слабых полях заключается в следующем. Первый возбуждающий лазерный импульс переориентирует магнитные поля на каждом из соседних ядер фтора F . Как результат переориентации, соседние ядра, которые были поляризованы под некоторым углом к полю $\mathbf{H} + \mathbf{H}_\text{F}$, начинают прецессировать вокруг нового направления $\mathbf{H} + \mathbf{H}'_\text{F}$. Здесь $\mathbf{H}$ – внешнее постоянное магнитное поле,

$\mathbf{H}_F$ и $\mathbf{H}'_F$ – поля, создаваемые магнитным моментом электрона Er^{3+} , когда он находится в основном и суперпозиционном состояниях, соответственно. Прецессия соседних ядер модулирует магнитное поле на ионе Er^{3+} и, следовательно, модулирует расстояние между энергетическими уровнями электрона. В результате относительный фазовый сдвиг прецессирующего электрического диполя Er^{3+} после первого возбуждающего импульса становится не равен таковому после второго импульса. Это приводит к модуляции огибающей эха. Модуляция зависит от величины и направления внешнего постоянного поля.

Когда магнитное поле велико ($H \gg H_F, H'_F$) и приложено вдоль оптической оси $\mathbf{C}$, переориентации магнитных полей ни на одном соседнем ядре F не происходит и, таким образом, эхо не изменяется.

Модуляция при $\mathbf{H} \parallel \mathbf{C}$ может иметь место в более низких внешних полях ($H \leq H_F, H'_F$) потому, что соседние ядра (F) прецессируют вокруг направлений, не параллельных электронному магнитному моменту.

Эхо деградирует в слабых магнитных полях $H \leq H_{\text{loc}}$, где $\mathbf{H}_{\text{loc}}$ есть локальное поле на электроны, созданное соседними ядрами. Направление локального поля $\mathbf{H}_{\text{loc}}$ является хаотическим по своей природе, поэтому эффективное поле $\mathbf{H} + \mathbf{H}_{\text{loc}}$, действующее на электрон эхо-иона, направлено в среднем под большим углом к оптической оси. Переориентация направления электронного магнитного момента и, следовательно, сверхтонкого магнитного поля на каждом ядре будет значительной из-за анизотропии электронных g -факторов. При этом возрастает глубина модуляции. Кроме того, при отклонении эффективного магнитного поля от оси симметрии $\mathbf{C}$ возрастает число неэквивалентных соседних ядер, т.е. число ядер с различными значениями частот прецессии.

Значение H_{loc} неизвестно в LuLiF_4 , тогда как $H_{\text{loc}} = 5$ Э в YLiF_4 [9]. Значения H_F и H'_F определяются, в основном, магнитным дипольным полем Er^{3+} электрона на каждом из соседних ядер F [15]. В кристалле LuLiF_4 g -факторы иона Er^{3+} в основном состоянии анизотропны [16]. Параллельная и перпендикулярная оптической оси $\mathbf{C}$ компоненты g -факторов соответственно равны [16]: $g_{\parallel}(^4I_{15/2}(1)) = 3.09$ и $g_{\perp}(^4I_{15/2}(1)) = 8.138$. Значения g -факторов для возбуждённого состояния Er^{3+} в матрице LuLiF_4 неизвестны. На основании того, что g -факторы для основного состояния Er^{3+} в матрицах LuLiF_4 и YLiF_4 совпадают с хорошей точностью ($g_{\parallel}(^4I_{15/2}(1)) = 3.14$, $g_{\perp}(^4I_{15/2}(1)) = 8.1$ и $g_{\parallel}(^4F_{9/2}(1)) = 9.84$, $g_{\perp}(^4F_{9/2}(1)) < 0.1$ в YLiF_4 [6]), можно предположить, что и в возбуждённом состоянии $^4F_{9/2}(1)$ иона Er^{3+} в матрицах LuLiF_4 и YLiF_4 g -факторы совпадают. Следовательно, ожидается, что значение сверхтонких дипольных полей H_F и H'_F будет порядка 1200 Э на ядрах F , ближайших к иону Er^{3+} .

Используя этот механизм, можно качественно объяснить некоторые важные черты поведения эха в магнитном поле: 1) для $H \leq H_{\text{loc}}$ интенсивность эха увеличивается с увеличением H ; 2) параметр, описывающий рост, слабо зависит от направления магнитного поля и от за-

держки между импульсами t_{12} ; 3) при $H \leq H_{\text{loc}}$ $T_2(H)$ больше, чем для нулевого поля $T_2(0) < T_2(H)$; 4) для фиксированной задержки t_{12} интенсивность эха уменьшается при увеличении угла отклонения направления внешнего магнитного поля относительно оптической оси. Используя данный механизм, трудно понять уменьшение интенсивности эха с увеличением магнитного поля при $\mathbf{C} \parallel \mathbf{H}$. Можно предположить, что имеется разброс направлений оптической оси $\mathbf{C}$ по объёму матрицы. Поэтому ось $\mathbf{C}$ не параллельна магнитному полю. Действительно, для $\theta = 5^\circ$ эхо намного слабее, чем при $\theta = 0^\circ$, как можно видеть на рис. 3 и 4. Чтобы разрешить этот вопрос, был изготовлен держатель для кюветы, позволяющий с прецизионной точностью вращать образец в криостате в вертикальной и горизонтальной плоскостях (см. рис. 1). Это позволило увеличить протяжённость плато в зависимости эхо от H , благодаря более точной ориентации. Тем не менее, при $H \geq 500$ Э интенсивность эха уменьшалась с ростом H (приблизительно экспоненциально) при любой ориентации образца. Так как измерения были проведены в довольно однородном поле электромагнита, то можно предположить, что, несмотря на малый размер оптически возбуждаемого объёма в образце, существует некоторый беспорядок в направлении кристаллических осей в LuLiF_4 . Однако, это объяснение кажется маловероятным, так как численные расчёты показали, что разброс направления оси $\mathbf{C}$ по оптически возбуждаемому объёму до 5° слабо влияет на интенсивность эха. Этот вопрос остаётся открытым. Требуется дальнейшего теоретического объяснения и зависимость времени T_2 от магнитного поля.

Качественно полученные результаты описываются, как видно на рис. 3–5, феноменологическим выражением

$$I(\theta, H) = \frac{I_0 \exp\left(-\frac{4t_{12}}{T_2}\right)}{\exp\left(\frac{H_0 - H}{H_1}\right) + \exp\left(\frac{H - H_0}{H_2} + \frac{\theta}{\theta_0}\right)},$$

$$H_2 = \frac{a}{t_{12}}, \quad \theta_0 = \frac{b}{t_{12}}.$$

Здесь параметры имеют следующие значения: $T_2 = 202$ нс, $H_1 = 60$ Э, $a = 121$ Э · 60 нс, $b = 1.4^\circ \cdot 60$ нс, $H_0 = 217$ Э, $I_0 = 216 \cdot \exp(460/T_2)$, задержка t_{12} в нс.

Для объяснения поляризационной зависимости, приведённой на рис. 7, напомним, что основное и возбуждённое состояния Er^{3+} являются кramerсовыми дублетами [17]: $|\mu = \pm 3/2\rangle$ в основном и $|\mu = \pm 1/2\rangle$ в возбуждённом состояниях. Здесь μ есть кристаллическое квантовое число. Таким образом, если электрическое поле лазерной волны направлено перпендикулярно оптической оси, $\mathbf{E} \perp \mathbf{C}$, то лево- и правополяризованные компо-

ненты падающего света действуют независимо и вызывают соответственно переходы $|\mu = -3/2\rangle \rightarrow |\mu = -1/2\rangle$ и $|\mu = +3/2\rangle \rightarrow |\mu = +1/2\rangle$. Следовательно, интенсивность эха не должна зависеть от относительной поляризации падающих импульсов [18], если первый и второй импульсы распространяются вдоль оптической оси, $\mathbf{k}_1 \parallel \mathbf{k}_2 \parallel \mathbf{C}$, т.е., если поляризации импульсов перпендикулярны оптической оси $\mathbf{C}$. В наших условиях (см. геометрию эксперимента на рис. 1) $\mathbf{k}_1 \parallel \mathbf{k}_2 \perp \mathbf{C}$. Следовательно, если $\mathbf{E}_1 \perp \mathbf{C}$, как в эксперименте (рис. 1), и угол ψ электрического поля $\mathbf{E}_2$ второго лазерного импульса по отношению к полю первого не равен нулю, $\psi \neq 0$, тогда поле $\mathbf{E}_2$ не перпендикулярно оптической оси: $\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_i \cos(\psi) - \mathbf{c} \sin(\psi)$. Здесь $\mathbf{e}_i$ и $\mathbf{c}$ – единичные векторы. Компонента электрического поля $\mathbf{E}_2$, которая обращает во времени когерентную суперпозицию состояний, наведённую первым импульсом, пропорциональна $\cos(\psi)$, а интенсивность эха $\sim \cos^4(\psi)$. Это качественно объясняет уменьшение интенсивности эха, однако экспериментальная зависимость лучше описывается не четвёртой, а первой степенью косинуса (см. рис. 7).

Авторы признательны Б. З. Малкину за обсуждение результатов и А. Сабо за препринт его ранней статьи. Работа выполнена в соавторстве с сотрудниками КГУ С. Л. Кораблевой и Ю. К. Розенцвайгом. Результаты работы опубликованы в [19, 20] и доложены на международной конференции [21]. Исследования поддержаны Программами Отделения физических наук “Оптическая спектроскопия и стандарты частоты” и “Когерентные акустические поля и сигналы” и грантом РФФИ (№ 03-02-16374).

Литература

1. Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Когерентные явления в оптике. Казань: КГУ 2003. 280 с.
2. Zhang Z., Shen X.A., Kachru R.: Opt. Lett. **22**, 1068–1070 (1997)
3. MacFarlane R.M., Harris T.L., Sun Y., Cone R.L., Equall R.W.: Opt. Lett. **22**, 871–873 (1997)
4. Luo B., Elman U., Kroll S., Paschotta R., Tropper A.: Opt. Lett. **23**, 442–444 (1998)
5. Wang Y.P., Boye D.M., Rives J.E., Meltzer R.S.: J. Luminescence **45**, 437–439 (1990)
6. MacFarlane R.M., Wannemacher R., Boye D., Wang Y.P., Meltzer R.S.: J. Luminescence **48–49**, 313–317 (1991)
7. Ganem J., Wang Y.P., Boye D., Meltzer R.S., Yen W.M., MacFarlane R.M.: Phys. Rev. Lett. **66**, 695–698 (1991)
8. Wannemacher R., MacFarlane R.M., Wang Y.P., Sox D., Boyeand D., Meltzer R.S.: J. Luminescence **48–49**, 309–312 (1991)
9. MacFarlane R.M., Cassanho A., Meltzer R.S.: Phys. Rev. Lett. **69**, 542–545 (1992)
10. Wang Y.P., Landau D.P., Meltzer R.S., MacFarlane R.M.: J. Opt. Soc. Am. B **9**, 946–949 (1992)
11. Abella I.D., Kurnit N.A., Hartmann S.R.: Phys. Rev. **141**, 391–411 (1966)
12. Grischkowsky D., Hartmann S.R.: Phys. Rev. B **2**, 60–74 (1970)
13. Lambert L.Q.: Phys. Rev. B **7**, 1834–1846 (1973)
14. Rowan L.G., Hahn E.L., Mims W.B.: Phys. Rev. A **137**, A61–A71 (1965)
15. MacFarlane R.M., Meltzer R.S., Malkin B.Z.: Phys. Rev. B **58**, 5692–5700 (1998)
16. Абдулсабиров Р.Ю., Антипин А.А., Кораблёва С.Л., Рахматуллин Р.М., Розенцвайг Ю.К.: Изв. ВУЗов. Физика **2**, 24–27 (1988)
17. Kulpa S.M.: J. Phys. Chem. Solids **36**, 1317–1325 (1975)
18. Gordon J.P., Wang C.H., Patel C.K.N., Slusher R.E., Tomlinson W.J.: Phys. Rev. **179**, 294–309 (1969)
19. Lisin V.N., Samartsev V.V., Shegeda A.M., Zuikov V.A., Korableva S.L.: Laser Phys. Lett. **3**, 423–426 (2006)
20. Lisin V.N., Samartsev V.V., Shegeda A.M., Zuikov V.A., Rosenzweig Ju.K.: Laser Phys. **17**, no. 2, 1–5 (2007)
21. Samartsev V.V., Lisin V.N., Shegeda A.M., Zuikov V.A.: XV Int. Laser Phys. Workshop. July 24–28 2006, Lausanne, Switzerland.

Фотофизические и фотохимические свойства мезогенного аддукта европия (III)

Д. В. Лапаев, В. Г. Никифоров, А. А. Князев, В. С. Лобков, К. М. Салихов, Ю. Г. Галяметдинов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Синтезирован мезогенный аддукт европия (III). На его основе приготовлен сориентированный в мезофазе образец и исследованы при $T = 300$ К его абсорбционные и эмиссионные свойства. Путём численного моделирования кинетики люминесценции определены основные каналы и константы скорости внутримолекулярного переноса энергии от лигандов к ионам Eu^{3+} . Установлено, что кинетика люминесценции перехода ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ имеет нехарактерное для известных β -дикетонатных комплексов европия нарастание на временах до 300 мкс с дальнейшим спадом порядка 3500 мкс. Показано, что мезогенный аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ обладает хорошей термо- и фотостабильностью и может рассматриваться как перспективный материал для оптоэлектронных устройств.

Введение

В настоящее время изучение фотофизических свойств координационных соединений лантаноидов находится в центре внимания многих исследовательских групп. Интерес к таким соединениям вызван тем, что, в отличие от органических материалов, комплексы лантаноидов излучают в очень узком спектральном диапазоне порядка 10 нм, что обусловлено спецификой электронного строения атомов этих металлов [1]. Путём подбора лантаноидов можно получить цвет излучения от синего до ближнего инфракрасного. Специфика механизма возбуждения ионов лантаноидов теоретически позволяет повысить квантовую эффективность сконструированных на их основе устройств до 100% [2], что недостижимо для устройств на основе других материалов. Указанные свойства координационных соединений лантаноидов обеспечивают их широкое применение в химии, биологии и биомедицине в качестве люминесцентных зондов и меток [1, 3, 4]. В оптоэлектронике комплексы лантаноидов активно используются в оптических коммуникационных устройствах [5], в качестве люминофоров для флуоресцентных источников света [6], лазерных материалов [7, 8], ультрафиолетовых дозиметров [4], эмиттеров в органических светодиодах и цветных дисплеях [2, 9–12].

Известно, что люминесценция в редкоземельных комплексах происходит в результате внутримолекулярного переноса энергии с триплетного уровня лигандов, выступающих в качестве антенны, на резонансные уровни ионов лантаноидов [7, 13–16]. Для обеспечения эффективной передачи энергии к ионам редкоземельных металлов лиганды должны обладать высокой поглощательной способностью и эффективным внутрисистемным переходом с синглетного уровня на триплетный. Помимо этого, триплетный уровень лигандов должен быть расположен выше эмиссионных уровней ионов лантаноидов.

Среди лантаноидов одним из наиболее эффективных излучателей в красной области спектра является трёхвалентный ион европия. На его основе синтезировано большое количество различных соединений [12], обладающих относительно высокой квантовой эффективностью [17–23], которой, однако, недостаточно для изготовления промышленных электролюминесцентных устройств. Поскольку квантовая эффективность в значительной мере зависит от того, насколько оптимально подобрано лигандное окружение, исследования в настоящее время во многом определяются поиском нового лигандного окружения для ионов европия.

Большинство работ по люминесцентным комплексам европия с органическими лигандами посвящено β -дикетонатным комплексам благодаря их устойчивости на воздухе и относительно высокой эмиссионной активности. Недостатком этих веществ является их низкая фото- и термостабильность [12, 24]. Повысить фото- и термостабильность комплекса и тем самым существенно увеличить эффективность люминесценции ионов европия можно при переходе от β -дикетонатов европия к их аддуктам с основаниями Льюиса типа 2,2'-бипиридина или 1,10-фенантролина [4, 9].

Синтезирован мезогенный аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ [DK – β -дикетон (1-(4-додецилоксифенил)-3-(4-гексадецилоксифенил)-пропан-1,3-дион), bpy_{17-17} – 5,5'-дигептадецил-2,2'-бипиридин], где в качестве основания Льюиса используется нейтральный лиганд bpy_{17-17} . Существенным отличием синтезированного аддукта от описанных в литературе координационных соединений европия [12], является наличие у лигандов длинных торцевых алкильных заместителей, придающих ему жидкокристаллические (ЖК) свойства в области температур $T = 95\text{--}130$ °С. На основе синтезированного соединения приготовлен сориентированный в мезофазе образец и исследованы при $T = 300$ К его абсорбционные и эмиссионные свойства, а также химическая термостабильность и фотостабильность. Путём численного моделирования кинетических

кривых люминесценции установлены основные каналы и константы скорости внутримолекулярного переноса энергии от лигандов к ионам Eu^{3+} в мезогенном аддукте $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$.

Экспериментальная часть

Методика синтеза мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ приведена в работе [25]. Структурная формула соединения показана на рис. 1. Идентификация ЖК свойств аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ проводилась по данным поляризационной политермической микроскопии и дифференциальной сканирующей калориметрии.

Для приготовления ориентированного образца синтезированное соединение расплавлялось между двумя кварцевыми подложками до изотропного состояния ($T = 140^\circ\text{C}$), далее нагрев прекращался, и при температуре перехода в мезофазу проводилась ориентация путём деформационного сдвига. После этого образец резко охлаждался до комнатной температуры. С помощью поляризационного микроскопа было установлено, что охлажденный аддукт сохраняет полученную в мезофазе ориентацию. Важно отметить, что ориентация, полученная в мезофазе, стабильна в диапазоне температур $T = 77\text{--}370\text{ K}$.

Исследование при температуре $T = 300\text{ K}$ абсорбционных и эмиссионных свойств ориентированного расплава $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и приготовленного расплава DK проводилось на автоматизированном оптическом спектрометре, подробное описание которого приведено в работе [26]. В качестве возбуждающего источника использовался импульсный азотный лазер ЛГИ-21 (длина волны 337.1 nm , частота следования импульсов 50 Гц , длительность импульса 10 ns). Фотоприемником служил фотоумножитель ФЭУ-100. Коррекция спектров люминесценции на спектральную чувствительность фотоумножителя не проводилась. Сравнение спектров люминесценции по интенсивности обеспечивалось проведением измерений в одинаковых условиях.

Исследование химической термостабильности проводилось путём многократного нагревания образца до температуры $T = 140^\circ\text{C}$ и охлаждения его до комнатной температуры. Результаты показали, что при многократном нагреве и охлаждении образец не разрушается, а температуры фазовых переходов (кристаллический расплав $\rightarrow$ мезофаза $\rightarrow$ изотропная жидкость) остаются не-

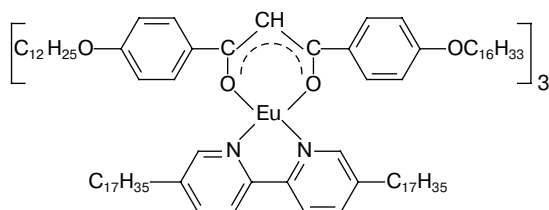


Рис. 1. Химическая структура аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$.

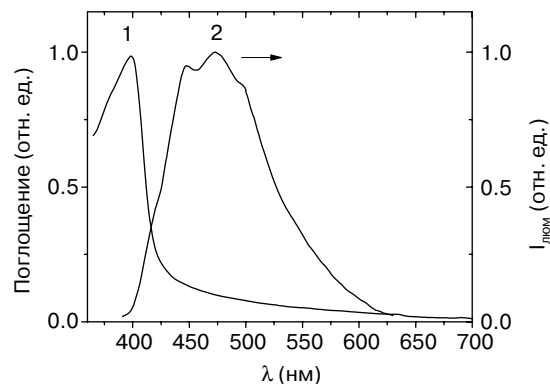


Рис. 2. Спектры поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ (1) и люминесценции лигандов DK (2) при задержке 3 мкс.

изменными. Следовательно, аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ обладает высокой химической термостабильностью.

На рис. 2 показаны спектры поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и люминесценции лигандов DK.

Аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ характеризуется полосой поглощения с максимумом на 400 nm . Спектр люминесценции свободных лигандов DK, полученный через 3 мкс после возбуждающего импульса, представляет собой структурированную полосу, с максимумом на 473 nm . Данная эмиссионная полоса соответствует излучению из нижнего триплетного уровня лигандов DK. Из спектров поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и фосфоресценции лигандов DK мы оценили положение нижнего возбуждённого синглетного уровня (25000 cm^{-1}) и нижнего триплетного уровня (21100 cm^{-1}) органической части комплекса.

На рис. 3 показаны времяразрешённые спектры люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$. Наиболее интенсивная полоса с максимумом на 610.5 nm соответствует переходу ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$. Остальные менее интенсивные полосы в области $535, 579, 592, 652$ и 701 nm , соответствуют ${}^5\text{D}_1 \rightarrow {}^7\text{F}_1$, ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$, ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_1$, ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_3$ и ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_4$.

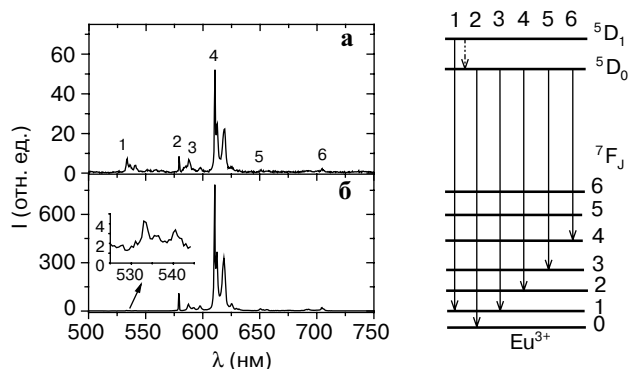


Рис. 3. Спектры люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ при временных задержках 3 мкс (а) и 280 мкс (б). На вставке показаны эмиссионные линии, соответствующие переходу ${}^5\text{D}_1 \rightarrow {}^7\text{F}_1$. Нумерация спектральных линий соответствует нумерации переходов на схеме энергетических уровней, представленных справа.

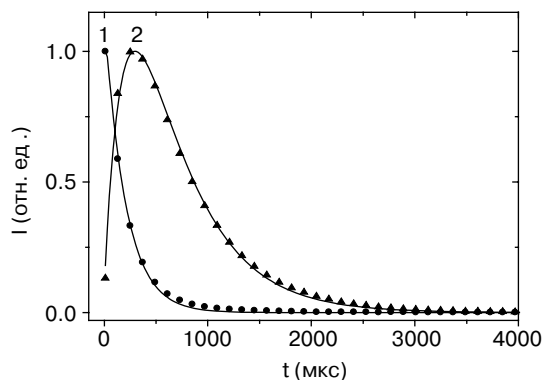


Рис. 4. Нормированные кинетические кривые люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, соответствующие переходам $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ (1) и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (2). Сплошными линиями показаны кривые, полученные из модельных расчётов.

переходам, соответственно. Сопоставление излучательных линий Eu^{3+} с соответствующими переходами производилось по энергетической структуре $4f^6$ -электронных конфигураций иона Eu^{3+} в кристаллах EuCl_3 [1]. Время-разрешённые спектры люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, представленные на рис. 3, характеризуются следующими особенностями. При задержке 3 мкс после возбуждающего импульса в спектре присутствуют эмиссионные полосы, соответствующие $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_{0-4}$ переходам. Отношение интенсивностей полос с максимумом на 533.5 нм и на 610.5 нм составляет $I(^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2)/I(^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1) = 7$. При задержке 280 мкс данное отношение составляет $I(^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2)/I(^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1) = 196$. Отмеченные особенности времяразрешённых спектров люминесценции указывают на то, что $^5\text{D}_0$ -уровень ионов Eu^{3+} накачивается через $^5\text{D}_1$ -уровень.

Во времяразрешённых спектрах люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ эмиссионная полоса от лигандов отсутствует. Соответственно, энергия возбуждения из триплетного состояния лигандов не расходуется на фосфоресценцию, что свидетельствует об эффективности процесса переноса энергии от лигандов к ионам Eu^{3+} .

На рис. 4 приведены экспериментальные кинетические кривые люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, соответствующие переходам $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ и их

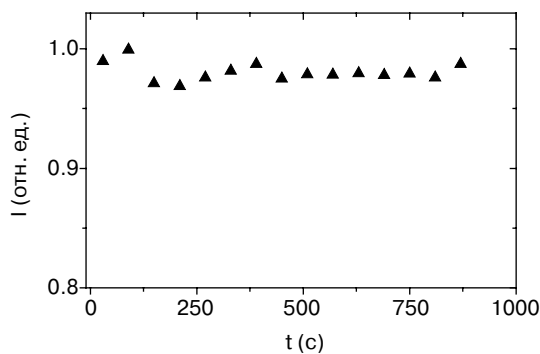


Рис. 5. Зависимость интенсивности люминесценции от времени облучения для аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$.

моделирование. Кинетическая кривая люминесценции, соответствующая переходу $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$, характеризуется неоднoэкспоненциальным затуханием и имеет время полного спада порядка 2000 мкс. Кинетическая кривая люминесценции, соответствующая переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$, характеризуется сложным поведением с нарастанием до 300 мкс и долгим спадом до 3500 мкс.

На рис. 5 показана зависимость интенсивности люминесценции, соответствующей переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$, от времени облучения для аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$.

Из рис. 5 видно, что мезогенный аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ обладает высокой фотостабильностью.

Моделирование

Известно, что для β -дикетонатных комплексов европия процессы внутримолекулярного переноса энергии протекают по следующей схеме [14, 27] (см. рис. 6).

Значения S_1 - и T_1 -состояний были оценены из спектров поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и фосфоресценции лигандов DK (см. рис. 2). Значения энергий уровней ионов Eu^{3+} заимствованы из литературных данных [1].

Для предложенной схемы процессов можно написать следующие кинетические уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{dN_3}{dt} &= -k_{32}N_3, \\ \frac{dN_2}{dt} &= k_{32}N_3 - k_{25}N_2, \\ \frac{dN_5}{dt} &= k_{25}N_2 - \left(k_{54} + \frac{1}{\tau_5}\right)N_5, \\ \frac{dN_4}{dt} &= -\frac{1}{\tau_4}N_4 + k_{54}N_5, \end{aligned} \quad (1)$$

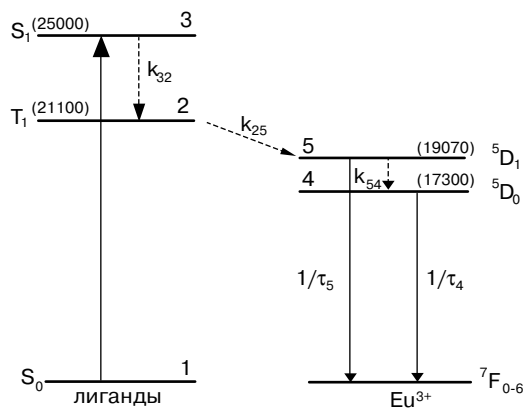


Рис. 6. Диаграмма энергетических уровней, участвующих в процессах переноса энергии в аддукте $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, вместе с нумерованной схемой. Сплошными стрелками показаны излучательные переходы, штриховыми стрелками показаны безызлучательные переходы, в скобках указаны значения энергий уровней в см^{-1} .

где N_i – населённости соответствующих состояний, τ_i – времена жизни соответствующих состояний, k_{ij} – константы скорости безызлучательных переходов с уровня i на уровень j .

Для простоты моделирования на миллисекундной временной шкале кинетических кривых люминесценции, соответствующих переходам $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ и $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$, мы приняли, что процесс возбуждения S_1 -состояния лигандов лазерным импульсом длительностью 10 нс происходит мгновенно, чему соответствуют следующие начальные условия:

$$N_3(0) = \text{const}, \quad (2)$$

остальные уровни не заселены:

$$N_2(0) = N_5(0) = N_4(0) = 0. \quad (3)$$

Анализ кинетики люминесценции переходов $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$ и $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, основанный на вышеприведённой кинетической схеме даёт $k_{32} = 5.3 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$. Эта константа, характеризующая скорость синглет-триплетного перехода, существенно меньше, чем для изученных ранее β -дикетонатных комплексов европия. Это обуславливает нехарактерное для β -дикетонатных комплексов европия нарастание кинетики люминесценции, соответствующей переходу $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, в области до 300 мкс. По-видимому, перенос возбуждения в β -дикетоне на резонансный уровень T_1 происходит не напрямую, а через промежуточный синглетный, либо триплетный уровень, из-за чего и возникает задержка.

Учитывая вышесказанное, мы провели моделирование кинетических кривых люминесценции переходов $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$ и $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, основываясь на уравнениях (1) с начальными условиями (2) и (3). Результаты моделирования приведены на рис. 4, значения используемых параметров представлены в таблице 1.

Таблица 1. Константы скорости процессов внутримолекулярного переноса энергии в аддукте $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$. Для сравнения приведены соответствующие константы скорости для типичных β -дикетонатных комплексов $\text{Eu}(\text{bzac})_3\text{bipy}$ и $\text{Eu}(\text{btfa})_3\text{bipy}$.

Переменная	$\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$	Значение (с^{-1})	
		$\text{Eu}(\text{bzac})_3\text{bipy}^*$	$\text{Eu}(\text{btfa})_3\text{bipy}^*$
k_{32}	$5.3 \cdot 10^3$	—	—
k_{25}	$1.6 \cdot 10^8$	$1.4 \cdot 10^8$	$1.4 \cdot 10^9$
k_{54}	$8.1 \cdot 10^5$	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^6$
$1/\tau_5$	$5.0 \cdot 10^5$	$2.5 \cdot 10^5$	$2.5 \cdot 10^5$
$1/\tau_4$	$1.9 \cdot 10^3$	—	$1.2 \cdot 10^3$

* Из работы [27].

Дискуссия и заключение

Синтезированный и исследованный нами мезогенный аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ обладает хорошими эмиссионными свойствами, а также высокой термо- и фотостабильностью. Молекулярная структура данного соединения отличается от изученных к настоящему времени β -дикетонатных комплексов европия наличием у лигандов длинных торцевых алкильных заместителей. Данные заместители ответственны за ЖК свойства в области температур $T = 95\text{--}130 \text{ }^\circ\text{C}$, что позволяет получать ориентированные расплавы аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$. Кинетические кривые люминесценции, представленные на рис. 4, указывают на то, что фотофизические свойства мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ существенно отличаются от изученных к настоящему моменту аддуктов β -дикетонатов европия. А именно, кинетика люминесценции перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ имеет нехарактерное для известных β -дикетонатных комплексов европия нарастание на временах до 300 мкс. Полное затухание люминесценции с $^5D_0$ - и $^5D_1$ -уровней ионов европия происходит за время порядка 3500 и 2000 мкс, соответственно.

Анализ экспериментальных данных и моделирование кинетических кривых люминесценции, соответствующей переходам $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$ и $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, позволили определить схему энергетических уровней, участвующих во внутримолекулярном переносе энергии от лигандов к ионам европия (см. рис. 6), и константы скорости данных процессов (см. таблицу 1). Положения S_1 - и T_1 -уровней лигандов были оценены нами из спектров поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и фосфоресценции лигандов DK (см. рис. 2). Основное отличие фотофизических свойств аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ от изученных ранее β -дикетонатных комплексов европия заключается в низкой скорости синглет-триплетного перехода ($k_{32} = 5.3 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$) в лигандах DK. По-видимому, перенос возбуждения в β -дикетоне на резонансный T_1 -уровень происходит не напрямую, а через промежуточный синглетный, либо триплетный уровень, из-за чего и возникает задержка. Мы полагаем, что основная причина низкой скорости синглет-триплетного перехода заключается в протяжённой пространственной структуре хромофора, который включает в себя, помимо кетонных групп, также и фенильные. Точное определение, какие именно орбитали β -дикетона участвуют в поглощении квантов света, а также точное положение промежуточного уровня требуют дополнительных исследований.

В заключение следует отметить, что, наряду с хорошими эмиссионными свойствами, аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ проявляет хорошую устойчивость к внешним температурным и световым воздействиям, в связи с чем данное соединение является перспективным материалом для оптоэлектронных устройств.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ «Ведущие научные школы» (НШ-6213.2006.2) и грантов РФФИ (№ 06-02-16491, № 05-03-34818 МФ_a).

Литература

1. Золин В.Ф., Коренева Л.Г.: Редкоземельный зонд в химии и биологии. М.: Наука 1983. 335 с.
2. Kido J., Okamoto Y.: Chem. Rev. **102**, no. 6, 2357–2368 (2002)
3. Mukkala V.-M., Takalo H., Liitti. P., Hemmila I.: J. Alloys Comp. **225**, 507–510 (1995)
4. de Sa G.F., Malta O.L., de Mello Donega C., Simas A.M., Longo R.L., Santa-Cruz P.A., da Silva Jr. E.F.: Coord. Chem. Rev. **196**, 165–195 (2000)
5. Zang F.X., Li W.L., Hong Z.R., Wei H.Z., Li M.T., Sun X.Y.: Appl. Phys. Lett. **84**, 5115–5117 (2004)
6. Ronda C.R.: J. Alloys Comp. **225**, 534–538 (1995)
7. Деркачёва Л.Д., Перегудов Г.В., Соколовская А.И.: УФН **91**, № 2, 247–260 (1967)
8. Okamoto Y.: Chem. Rev. **102**, 2347–2356 (2002)
9. Chen C.H., Shi J.: Coord. Chem. Rev. **171**, 161–174 (1998)
10. Bakker B.H., Goes M., Hoebe N., van Ramesdonk H.J., Verhoeven J.W., Werts M.H., Hofstraat J.W.: Coord. Chem. Rev. **208**, 3–16 (2000)
11. Curry R.J., Gillin W.P.: Curr. Opin. Solid State Mater. Sci. **5**, 481–486 (2001)
12. Каткова М.А., Вихтуновский А.Г., Бочкарев М.Н.: Успехи химии **74**, 1193–1215 (2005)
13. Crosby G.A., Whan R.E., Alire R.M.: J. Chem. Phys. **34**, 743–748 (1961)
14. Bhaumik M.L., Nugent L.J.: J. Chem. Phys. **43**, 1680–1687 (1965)
15. Севченко А.Н., Кузнецова В.В., Пуко Р.А., Хоменко В.С., Развина Т.И., Кожан Т.М.: Изв. Акад. наук. Сер. физ. **36**, № 5, 1013–1017 (1972)
16. Klink I., Grave L., Reinhoudt D.N., van Veggel F.C.J.M.: J. Phys. Chem. A **104**, 5457–5468 (2000)
17. Kido J., Hayase H., Hongawa K., Nagai K., Okuyama. K.: Appl. Phys. Lett. **65**, 2124–2126 (1994)
18. Okada K., Wang Y.-F., Chen T.-M., Kitamura M., Nakaya T., Inoue H.: J. Mater. Chem. **9**, 3023–3026 (1999)
19. Adachi C., Baldo M.A., Forrest S.R.: J. Appl. Phys. **87**, 8049–8055 (2000)
20. Noto M., Irie K., Era M.: Chem. Lett. **4**, 320–321 (2001)
21. Sun P., Duan J., Shih H., Cheng C.: Appl. Phys. Lett. **81**, 792–794 (2002)
22. Sun M., Xin H., Wang K.-Z., Zhang Y.-A., Jin L.-P., Huang C.-H.: Chem. Commun. no. 6, 702–703 (2003)
23. Guan M., Bian Z.Q., Li F.Y., Xin H., Huang C.H.: New J. Chem. **27**, 1731–1734 (2003)
24. Lin Q., Zhang H.J., Liang Y.J., Zheng Y.X., Meng Q.G., Wang S.B., Gou Ch.: Thin Solid Films **396**, 191–195 (2001)
25. Князев А.А., Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г.: Изв. Акад. наук. Сер. хим. № 4, 904–905 (2004)
26. Lapaev D.V., Safiullin G.M., Lobkov V.S., Salikhov K.M., Knyazev A.A., Galyametdinov Yu.G.: Rus. J. Phys. Chem. **79**, S33–S37 (2005)
27. Faustino W.M., Rocha G.B., de Silva F.R.G., Malta O.L., de Sa G.F., Simas A.M.: J. Mol. Struct. **527**, 245–251 (2000)

Влияние температуры на эмиссионные свойства мезогенного аддукта европия (III)

Д. В. Лапаев, В. Г. Никифоров, А. А. Князев, В. С. Лобков,
К. М. Салихов, Ю. Г. Галяметдинов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Исследована температурная зависимость эмиссионных свойств мезогенного аддукта европия (III). Показано, что кинетика люминесценции слабо меняется в диапазоне температур 77–300 К. При температурах выше комнатной, наблюдается резкое уменьшение времени затухания люминесценции перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, при этом рост температуры не оказывает существенного влияния на люминесценцию, соответствующую переходу $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$. Анализ кинетики люминесценции показал, что релаксация уровня $^5D_0$ в области выше 300 К происходит через состояние с переносом заряда.

Введение

Процессы переноса энергии в комплексах редкоземельных металлов являются предметом активного изучения. В настоящее время эти соединения считаются перспективными базовыми элементами для устройств оптоэлектроники [1], их уникальные люминесцентные свойства уже нашли применение в химии, биологии и биомедицине [2]. Прикладные задачи во многом определяют основное направление исследований, связанное с выяснением условий для оптимального переноса энергии от лигандов к ионам металлов и поиском соответствующего лигандного окружения.

Мы представляем результаты исследования в диапазоне температур 77–372 К эмиссионных свойств мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ [DK – β -дикетон ($\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(\text{O})-\text{CH}_2-\text{C}(\text{O})-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OC}_{16}\text{H}_{33}$), bpy_{17-17} – 5,5'-дигептадецил-2,2'-бипиридин]. Молекулярная структура лигандов данного соединения содержит длинные торцевые алкильные заместители, которые обеспечивают жидкокристаллические свойства комплекса в области температур $T = 95\text{--}130^\circ\text{C}$. Предварительные исследования фотофизических свойств $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ при комнатной температуре позволили установить следующее [3]. Соединение $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ обладает хорошими эмиссионными свойствами, проявляет устойчивость к внешним температурным и световым воздействиям. Кинетическая кривая люминесценции перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ имеет нехарактерное для известных β -дикетонатных комплексов европия нарастание на временах до 300 мкс с дальнейшим спадом на временах порядка 3500 мкс. Установлено, что это происходит из-за низкой скорости синглет-триплетного перехода ($5.3 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$) в лигандах DK, который, по видимому, осуществляется через промежуточный уровень между S_1 - и T_1 -состояниями в области $21100\text{--}25000 \text{ cm}^{-1}$. Вероятно, это связано с протяжённой пространственной

структурой хромофора, которая включает в себя, помимо кетонных групп, также и фенильные.

Целью настоящей работы является изучение безызлучательных процессов, приводящих к тушению люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$. Многочисленные исследования показали, что низкая квантовая эффективность люминесценции комплексов европия обусловлена участием в релаксационных процессах низлежащих состояний с переносом заряда (ПЗ) [4–9]. Мы показываем, что данный механизм является ответственным за резкое тушение $^5D_0$ -уровня при температурах выше комнатной.

Экспериментальная часть

Методика синтеза мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ подробно описана в работе [10]. Структурная формула синтезированного соединения и методика приготовления ориентированного образца приведены в работе [3]. Исследование в диапазоне температур 77–372 К эмиссионных свойств ориентированного расплава $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ проводилось на автоматизированном оптическом спектрометре [11].

Аддукт $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ характеризуется полосой поглощения с максимумом на 400 нм (см. рис. 1 из [3]). В области меньше 450 нм начинается резкий рост кривой, соответствующей синглет-синглетным переходам в лигандах DK. В диапазоне 500–700 нм наблюдается слабое поглощение, медленно спадающее до нуля.

На рис. 1 при различных температурах показаны спектры люминесценции мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, полученные при задержке 280 мкс после возбуждающего импульса. Видно, что по мере увеличения температуры интенсивность люминесценции ионов Eu^{3+} существенно уменьшается. Это указывает на то, что в аддукте

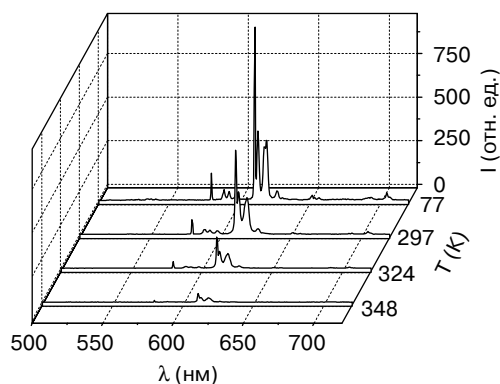


Рис. 1. Спектры люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$.

$\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, кроме излучательной релаксации из $^5\text{D}_1$ - и $^5\text{D}_0$ -состояний, существуют также каналы тушения, сильнозависящие от температуры.

На рис. 2 приведены температурные зависимости кинетических кривых люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, соответствующие переходам $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$. Видно, что в диапазоне температур 77–300 К кинетика люминесценции, соответствующая переходам $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$, не зависит от температуры. Повышение температуры выше комнатной также не оказывает существенного влияния на кинетику перехода $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$. Напротив, кинетика люминесценции, соответствующая переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$, претерпевает существенные из-

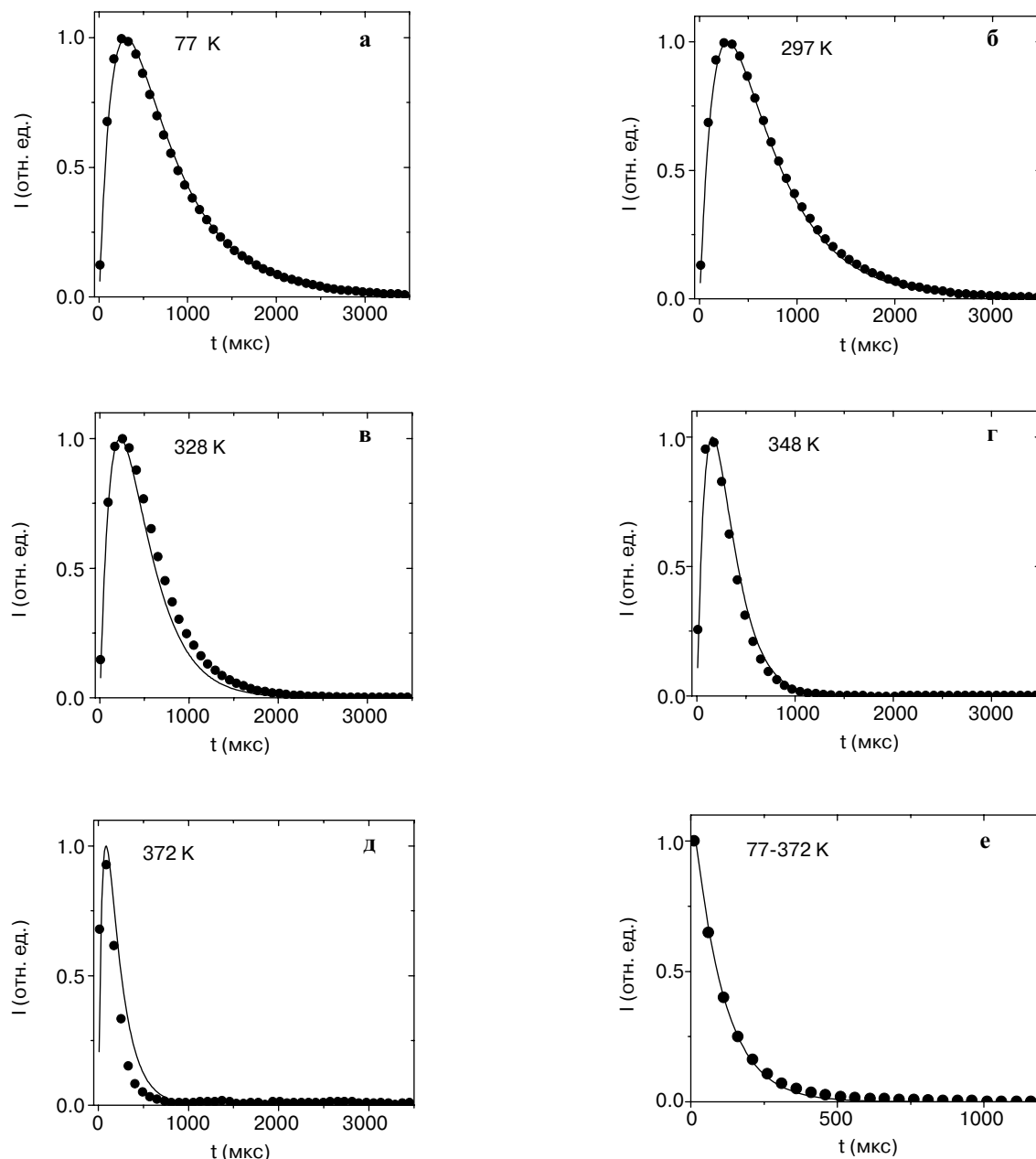


Рис. 2. Температурные зависимости нормированных кинетических кривых люминесценции аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, соответствующих переходам $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (а–д) и $^5\text{D}_1 \rightarrow ^7\text{F}_1$ (е). Сплошными линиями показаны теоретические кривые.

менения. При $T = 300$ К время полного затухания составляет 3 мс, при $T = 372$ К это значение становится меньше 1 мс.

Моделирование

Результаты исследования люминесцентных свойств мезогенного аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ при $T = 300$ К представлены в работе [3]. Согласно этой работе, перенос энергии от лигандов к ионам Eu^{3+} происходит по схеме, приведённой на рис. 3.

Значения S_1 - и T_1 -состояний были оценены из спектров поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ и фосфоресценции лигандов DK [3]. Значения энергий уровней ионов Eu^{3+} заимствованы из литературных данных [12].

Согласно схеме переноса энергии (рис. 3), лиганды DK, поглотив квант света (длина волны 337.1 нм), переходят из основного S_0 -состояния в одно из возбуждённых синглетных состояний и после процесса внутренней конверсии оказываются в нижнем возбуждённом S_1 -состоянии. Затем происходит интеркомбинационный переход на T_1 -уровень, и далее заселяются $^5D_1$ - и $^5D_0$ -уровни ионов Eu^{3+} . Процесс переноса энергии моделируется следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= -k_{12}N_1, \\ \frac{dN_2}{dt} &= k_{12}N_1 - k_{23}N_2, \\ \frac{dN_3}{dt} &= k_{23}N_2 - \left(k_{34} + \frac{1}{\tau_3}\right)N_3, \\ \frac{dN_4}{dt} &= -\frac{1}{\tau_4}N_4 + k_{34}N_3, \end{aligned} \quad (1)$$

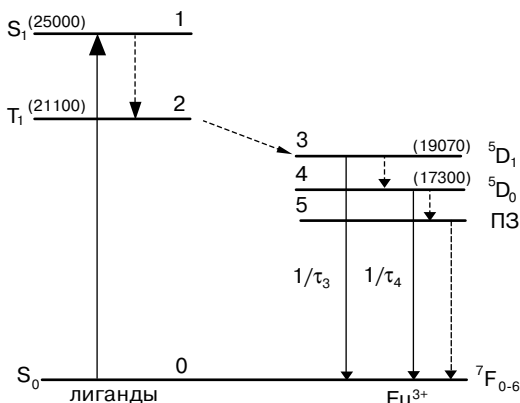


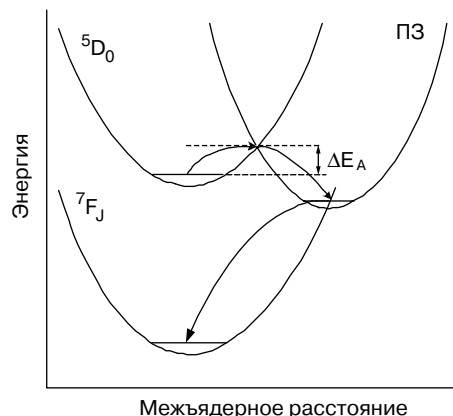
Рис. 3. Диаграмма энергетических уровней для аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$, вместе с нумерованной схемой: ПЗ – состояние с переносом заряда, сплошными стрелками показаны излучательные переходы, штриховыми стрелками показаны безызлучательные переходы, в скобках указаны значения энергий уровней в см^{-1} . Справа показан механизм релаксации $^5D_0$ -состояния через состояние с ПЗ.

где N_i – населённости соответствующих состояний, τ_3 и τ_4 – времена жизни $^5D_1$ - и $^5D_0$ -уровней Eu^{3+} , k_{ij} – константы скорости безызлучательных переходов с уровня i на уровень j . Принимая во внимание, что длительность возбуждающего лазерного импульса составляет 10 нс, начальные условия для моделирования на миллисекундной шкале выбраны следующие:

$$N_1(0) = \text{const}, \quad N_2(0) = N_3(0) = N_4(0) = 0. \quad (2)$$

Известно, что в координационных соединениях европия на увеличение скорости затухания люминесценции с $^5D_0$ -уровня существенное влияние оказывают следующие безызлучательные механизмы [5]. Многофононная релаксация, когда энергия электронного возбуждённого состояния передаётся колебательным степеням свободы, требует перекрытия колебательных волновых функций возбуждённого и основного электронных состояний. Форма потенциальных поверхностей $^5D_0$ - и ^7F_J -состояний и положения минимумов на оси междядерного смещения близки друг к другу, по энергии они разделены на 17300 см^{-1} (см. рис. 3). Это приводит к тому, что колебательный интеграл перекрытия, определяющий скорость перехода, слабо зависит от температуры, и, таким образом, многофононный механизм не может давать существенный вклад в тушение люминесценции $^5D_0$ -уровня при температурах выше комнатной [5, 7]. Механизм миграции энергии между ионами европия, который может приводить к безызлучательной релаксации $^5D_0$ -уровня [13], мы также не рассматриваем, поскольку в нашем случае ионы европия сильно экранированы друг от друга лигандным окружением.

Исследования показывают [4–9], что во многих комплексах европия релаксация $^5D_0$ -уровня осуществляется через промежуточное состояние с ПЗ, в котором электрон с лигандов переносится на ион европия. Низколежащее состояние с ПЗ также ответственно за тушение



люминесценции более высоких ^5D_J -уровней в соединениях $\text{Eu}^{3+}:\text{La}_2\text{O}_3\text{S}$ и $\text{Eu}^{3+}:\text{Y}_2\text{O}_3\text{S}$ [14]. Тушение происходит по следующей схеме. Потенциальные поверхности состояний с ПЗ и $^5D_0$ пересекаются. В точке пересечения потенциальных кривых комплекс с $^5D_0$ -уровня переходит в состояние с ПЗ. Далее происходит очень быстрая релаксация из состояния с ПЗ в основное $^7F_1$ -состояние (см. рис. 3). Согласно литературным данным, константа скорости такого перехода составляет величину порядка $10^{13}\text{--}10^{14} \text{ c}^{-1}$ [5, 6].

Принимая во внимание вышесказанное, мы полагаем, что состояние с ПЗ также является причиной сильного тушения интенсивности люминесценции, соответствующей переходам с $^5D_0$ -уровня при температурах выше комнатной. Для моделирования влияния состояния с ПЗ на скорость релаксации перехода $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, мы использовали зависимость Аррениуса с энергией активации ΔE_A [5, 7]. Соответственно, уравнение для населённости уровня $^5D_0$ принимает вид

$$\frac{dN_4}{dt} = k_{34}N_3 - \frac{1}{\tau_4}N_4 - k_{45} \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{kT}\right)N_4, \quad (3)$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура, а k_{45} – скорость переноса возбуждения из $^5D_0$ -уровня в состояние с ПЗ.

Моделирование экспериментальных данных на основании уравнения (3) вместе с уравнениями (1) и (2) показало, что энергия активации, необходимая для осуществления перехода из $^5D_0$ -уровня в состояние с ПЗ, имеет величину $\Delta E_A = 4880 \text{ см}^{-1}$. Для сравнения, энергии активации β -дикетонатных комплексов европия $\text{Eu}(\text{NTA})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ [6] и $\text{Eu}(\text{thd})_3$ [5] имеют значения 6300 и 4120 см^{-1} , соответственно. Константа k_{45} в уравнении (3), которая зависит от релаксации состояния с ПЗ в основное состояние ^7F_J , в нашем случае имеет значение $5.6 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. Для комплексов европия $\text{Eu}(\text{NTA})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ [6] и $\text{Eu}(\text{thd})_3$ [5] эта величина имеет значения $1.8 \cdot 10^{14}$ и $1.2 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, соответственно. Значения остальных констант скорости k_{ij} заимствованы из работы [3].

Обсуждение и заключение

Исследование зависимости люминесцентных свойств аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ показало, что в области температур $77\text{--}300 \text{ K}$ кинетика люминесценции, соответствующая переходам $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ и $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$, не зависит от температуры. Повышение температуры выше 300 K также не оказывает сильного влияния на люминесценцию, соответствующую переходу $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$. Напротив, время релаксации кинетики люминесценции, соответствующей переходу $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, очень сильно изменяется в области температур $300\text{--}372 \text{ K}$: при 300 K время полного затухания составляет 3 мс , при 372 K это значение становится

меньше 1 мс (см. рис. 2). Мы полагаем, что тушение люминесценции связано с образованием состояния с ПЗ, потенциальная поверхность которого пересекается с потенциальной поверхностью $^5D_0$ -уровня, и в точке пересечения происходит перенос возбуждения согласно рис. 3. Энергия активации ΔE_A преодолевается за счёт тепловых колебаний связи C-O-Eu , чем и обуславливается зависимость люминесценции $^5D_0$ -уровня от температуры. Моделирование температурной зависимости кинетических кривых люминесценции, соответствующих переходам $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$ и $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$, дало значение энергии активации $\Delta E_A = 4880 \text{ см}^{-1}$. Скорость переноса возбуждения из $^5D_0$ -уровня в состояние с ПЗ моделировалось параметром k_{45} , который имеет значение $5.6 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$.

Необходимо также добавить, что состояние с ПЗ не влияет на кинетику люминесценции, соответствующую переходу $^5D_1 \rightarrow ^7F_1$. Вероятно, это связано с тем, что пересечение потенциальных поверхностей $^5D_1$ -уровня и состояния с ПЗ создают активационный барьер, значительно превышающий 5000 см^{-1} .

Мы обращаем внимание на то, что для ряда комплексов европия, например, с ароматическими кислотами, в спектре поглощения присутствует длинноволновая полоса, соответствующая состоянию с ПЗ [4]. В спектре поглощения аддукта $\text{Eu}(\text{DK})_3\text{bpy}_{17-17}$ (см. рис. 1 из [3]) наблюдается слабое поглощение в спектральном диапазоне $500\text{--}700 \text{ нм}$. Длина волны 600 нм соответствует уровню энергии 16700 см^{-1} , который лежит ниже $^5D_0$ -уровня (17300 см^{-1}). Мы полагаем, что эта слабая полоса поглощения также ответственна за состояние с ПЗ, а также на то, что минимум потенциальной поверхности состояния с ПЗ находится ниже $^5D_0$ -уровня.

В заключение отметим, что поскольку кинетика люминесценции уровня $^5D_1$ не зависит от температуры, эффективность переноса энергии от лигандов DK, которые выступают в качестве антенны, к ионам европия в диапазоне $77\text{--}372 \text{ K}$ не меняется. Этот факт можно использовать при дальнейшем поиске и синтезе комплексов европия с высокоэффективными эмиссионными свойствами.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.2) и грантов РФФИ (№ 06-02-16491, № 05-03-34818 МФ_а).

Литература

1. Каткова М.А., Вихтуновский А.Г., Бочкарёв М.Н.: Успехи химии **74**, 1193–1215 (2005)
2. de Sa G.F., Malta O.L., de Mello Donega C., Simas A.M., Longo R.L., Santa-Cruz P.A., da Silva Jr. E.F.: Coord. Chem. Rev. **196**, 165–195 (2000)
3. Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А., Лобков В.С., Салихов К.М., Галаметдинов Ю.Г.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2006. Ежегодник, с. 37. Казань: ФизтехПресс 2007.
4. Ермолаев В.Л., Казанская Н.А., Петров А.А., Херузе Ю.И.: Оптика и спектроскопия **28**, 208–209 (1970)
5. Berry M.T., May P.S., Xu H.: J. Phys. Chem. **100**, 9216–9222 (1996)

6. Venchikov V.Ya., Tsvirko M.P.: J. Appl. Spectrosc. **68**, no. 3, 473–479 (2001)
7. An Y., Schramm G.E., Berry M.T.: J. Luminescence **97**, 7–12 (2002)
8. Carlos L.D., Fernandes J.A., Sa Ferreira R.A., Malta O.L., Gonsalves I.S., Ribeiro-Claro P.: Chem. Phys. Lett. **413**, 22–24 (2005)
9. Vila Nova S.P., Batista H.J., Alves Jr. S., de Mello Donega C., Longo R.L., de Sa G.F., Thompson L.C.: J. Luminescence **118**, 83–90 (2006)
10. Князев А.А., Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г.: Изв. РАН. Сер. хим. № 4, 904–905 (2004)
11. Lapaev D.V., Safiullin G.M., Lobkov V.S., Salikhov K.M., Knyazev A.A., Galyametdinov Yu.G.: Rus. J. Phys. Chem. **79**, S33–S37 (2005)
12. Золин В.Ф., Коренева Л.Г.: Редкоземельный зонд в химии и биологии. М.: Наука 1983. 335 с.
13. Kellendonk F., Blasse G.: J. Chem. Phys. **75**, 561 (1981)
14. Struck C.W., Fonger W.H.: J. Luminescence **10**, 1 (1975)

Особенности либраций молекул в жидкости в субпикосекундном диапазоне

В. Г. Никифоров, В. С. Лобков

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

На основе анализа сигнала сверхбыстрого оптического эффекта Керра установлены параметры колебательно-вращательной динамики молекул на фемтосекундных временах в жидкостях: ацетонитриле CH_3CN , триметилацетонитриле $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, пропионитриле $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, фтороформе CHF_3 и хлороформе CHCl_3 . Проведён анализ влияния строения молекул на особенности вращательных (диффузионных и либрационных) движений. Показано, что функция распределения либрационных частот имеет вид распределения Максвелла.

Введение

Методы оптической поляризационной спектроскопии, основанные на оптическом эффекте Керра (ОЭК) [1, 2] с применением оптического гетеродинамирования [3–7], позволяют наблюдать фемтосекундные движения молекул. Сигнал в экспериментах ОЭК является кубическим нелинейным откликом среды [8–10], который содержит низкочастотные колебательно-вращательные отклики молекул, возбуждаемые лазерными импульсами длительностью 10–100 фс. Вместе с откликами внутримолекулярных колебаний и вращательной диффузии также регистрируются отклики коллективных молекулярных движений [11–13]. Данные движения происходят в локальных потенциальных ямах благодаря взаимодействию молекул с ближайшим окружением [14]. Они носят характер либрационных (вращательных) колебаний около равновесного положения и реализуются на временах 10^{-10} – 10^{-12} с между вращательными диффузионными скачками. При этом когерентные либрации формируют в сигнале ОЭК отклик с временем релаксации менее 1 пс [1, 15].

Для описания либрационного отклика в сигнале ОЭК нами был предложен подход [16], где релаксация моделируется дефазировкой когерентных либраций. Разные либрационные движения возникают из-за локальной неоднородности жидкости и учитываются функцией распределения либрационных частот. Это позволяет описывать отклик без использования дополнительных констант необратимой релаксации. В настоящей работе данный подход мы применяем для анализа сигналов ОЭК жидких ацетонитрила CH_3CN , триметилацетонитрила $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$ и пропионитрила $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$. Выбор этих молекул обусловлен тем, что они имеют сходные группы атомов и при этом значительно различаются по пространственной структуре. Мы также проводим анализ сверхбыстрых движений молекул фтороформа CHF_3 и хлороформа CHCl_3 , экспериментальные исследования которых представлены в работе [17]. Данный выбор связан с тем, что эти молекулы вместе с молекулой $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, имеют сходное пространственное строение, но сильно различа-

ются по составляющим их атомам. Теоретический анализ сигнала ОЭК вышеперечисленных жидкостей позволил найти вид функций распределения либрационных частот и определить влияние пространственного строения молекул и межмолекулярных взаимодействий на характер вращательных (диффузионных и либрационных) движений на фемтосекундных временах.

Теоретическая часть

В эксперименте ОЭК [1, 2] используется двухимпульсное возбуждение среды. Первый накачивающий импульс E_p наводит нестационарную анизотропную поляризуемость в жидкости, которая, спустя время τ , зондируется слабым пробным импульсом E_0 . Направление поляризации пробного импульса E_0 составляет угол 45° с поляризацией поля накачки (см. рис. 1). Оптическая частота ω_0 обоих импульсов попадает в полосу прозрачности образца. Для усиления полезного сигнала в эксперименте применяется техника оптического гетеродинамирования. С этой целью поле пробного импульса смешивается с полем локального осциллятора E_{10} [6, 7], поляризация которого ортогональна поляризации пробного поля E_0 , а фаза сдвинута на 90° . Временной профиль амплитуды светового поля импульсов длительности τ_1 представим в виде гауссовой функции $E_p(t) \propto E_0(t) \propto E_{10}(t) \propto \exp(-t^2/2\tau_1^2)$.

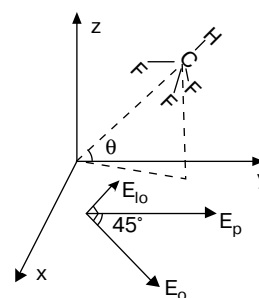


Рис. 1. Ориентация молекулы и направления поляризации накачивающего импульса E_p , пробного импульса E_0 и поля локального осциллятора E_{10} .

Для описания отклика среды введём тензор поляризуемости молекулы в молекулярной системе координат (МСК): $\alpha_{xx} = \alpha_{zz} = \alpha_{\perp}$, $\alpha_{yy} = \alpha_{\uparrow\uparrow}$, остальные компоненты равны нулю. В дальнейших вычислениях степень анизотропии поляризуемости молекулы удобно представить в виде: $\alpha_{\uparrow\uparrow}(t) - \alpha_{\perp}(t) \equiv \Delta\alpha + \delta\alpha(t)$, где слагаемое $\delta\alpha(t)$ отражает влияние ядерных колебаний. Величиной θ будем характеризовать угол между выделенной молекулярной осью (в нашем случае это – ось y в МСК) и поляризацией накачивающего импульса (см. рис. 1). В этом случае выражение для детектируемого в эксперименте сигнала $S(\tau)$ может быть записано в виде [16, 18, 19]:

$$S(\tau) = \frac{1}{T} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} s(\tau, t) dt, \quad (1)$$

где T – интервал времени наблюдения; $S(\tau, t)$ – мгновенная величина регистрируемого сигнала:

$$s(\tau, t) \propto E_{\text{ю}}(t - \tau) E_0(t - \tau) \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \{R_m(t) + R_{\text{el}}(t)\} \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (2)$$

$$R_{\text{el}}(t) \propto \gamma I_p(t), \quad (3)$$

$$R_m(\theta, t) \propto (\Delta\alpha + \delta\alpha(t)) \left(\cos^2(\theta) - \frac{1}{3} \right). \quad (4)$$

Здесь $I_p(t)$ – интенсивность накачивающего импульса; функция $R_{\text{el}}(t)$ пропорциональна коэффициенту “мгновенной” электронной кубической гиперполяризуемости γ ; функция молекулярного отклика $R_m(\theta, t)$ пропорциональна степени анизотропии поляризуемости молекулы.

Для описания разных молекулярных движений обычно пренебрегают незначительной корреляцией вращательных и внутримолекулярных колебаний [4]. Это позволяет при моделировании внутримолекулярного отклика $R_n(\theta_0, t)$ принять

$$R_n(\theta_0, t) = \left\langle R_m(t) \right|_{\theta(t) \cong \theta_0} \right\rangle_{\theta_0},$$

где θ_0 – равновесное положение молекулы в локальном потенциале, а символом $\langle \dots \rangle_{\theta_0}$ обозначено среднее значение по ориентациям молекул. Влияние совокупности внутримолекулярных колебаний на неравновесную поляризуемость $\delta\alpha(\theta_0, t)$ описывается нормальными колебательными координатами молекулы $q_i(\theta_0, t)$:

$$\delta\alpha(\theta_0, t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i^1 q_i(\theta_0, t), \quad (5)$$

где α_i^1 – коэффициент, характеризующий степень поляризуемости молекулы для колебания i -й моды; N – количество колебательных мод. Решение для колебательных координат $q_i(\theta_0, t)$ записывается в виде [20]:

$$q_i(\theta_0, t) = \frac{\alpha_i^1}{2m_i} \cos(\theta_0) \Phi_n(\Omega_n, \tau_n, t), \quad (6)$$

$$\Phi_n(\Omega_n, \tau_n, t) = (\Omega_n^2 - \tau_n^{-2})^{-1/2} \int_0^{\infty} I_p(t - t') \times \exp\left(-\frac{t'}{\tau_n}\right) \cdot \sin[(\Omega_n^2 - \tau_n^{-2})^{1/2} \cdot t'] dt', \quad (7)$$

где m_i – приведённая масса i -го осциллятора, Ω_n и τ_n – частота колебания и время релаксации n -ой моды. Для полного внутримолекулярного отклика после усреднения по равновесным углам θ_0 получим:

$$R_n(t) \propto \sum_{i=1}^N (\alpha_i^1)^2 \Phi_n(\Omega_n, \tau_n, t). \quad (8)$$

Импульс накачки наиболее эффективно возбуждает комбинационно активные колебательные моды с периодом, большим или сравнимым с длительностью импульса. Например, низкочастотные колебания бензольного кольца, сопряжённого с группами типа -ОН, -CH₃, -Cl и т.д. можно наблюдать при длительности импульсов порядка 100 фс [11, 18].

Вращательные движения возбуждаются при наличии анизотропии поляризуемости молекулы ($\Delta\alpha \neq 0$). С учётом слабой корреляции между отдельными молекулярными движениями для описания диффузионного отклика $R_d(t)$ примем

$$R_d(t) = \left\langle R_m(t) \right|_{|\delta\alpha| \ll |\Delta\alpha|} \right\rangle_{\theta_0} = \Delta\alpha \left\langle \frac{3}{2} \cdot \left(\cos^2(\theta_0(t)) - \frac{1}{3} \right) \right\rangle_{\theta_0}.$$

Решение для диффузионного отклика имеет вид [18, 21]:

$$R_d(t) \propto (\Delta\alpha)^2 D \int_{-\infty}^t \eta(t') \exp\left(-\frac{t' - t}{\tau_d}\right) dt', \quad (9)$$

где $\eta(t) = I_p(t)/kT$, k – постоянная Больцмана, T – температура, $D = 1/(6\tau_d)$ – коэффициент диффузии, τ_d – время релаксации диффузионного отклика. Характерные значения времени релаксации τ_d составляют от единиц пикосекунд для простых молекул типа дисульфида углерода [1] до десятков пикосекунд для молекул типа ацетофенона и его производных [11]. Вид отклика вращательной диффузии $R_d(t)$ представляет собой кривую, экс-

пониженно спадающую сразу после действия импульса накачки.

Описание либрационного отклика основывается на функции распределения либрационных частот $\rho(\Omega_{\text{lib}})$. Пренебрегая ролью спектральной диффузии и учитывая малость амплитуды либрационных колебаний, выражение для либрационного отклика можно представить в виде [16]:

$$R_{\text{lib}}(t) \propto \Delta\alpha^2 \int_0^\infty d\Omega_{\text{lib}} \rho(\Omega_{\text{lib}}) \Phi_{\text{lib}}(\Omega_{\text{lib}}, t), \quad (10)$$

где функция $\Phi_{\text{lib}}(\Omega_{\text{lib}}, t)$ имеет вид:

$$\Phi_{\text{lib}}(\Omega_{\text{lib}}, t) = \Omega_{\text{lib}}^{-1} \int_0^\infty I_p(t-t') \cdot \sin[\Omega_{\text{lib}} \cdot t'] \cdot dt'. \quad (11)$$

Согласно решению (10), характер либрационного отклика зависит от функции распределения либрационных частот $\rho(\Omega_{\text{lib}})$. Вид функции распределения можно найти, решая обратную задачу при анализе данных эксперимента ОЭК. Ниже такой анализ мы применяем для интерпретации сигналов ОЭК для выбранного нами ряда жидкостей.

Экспериментальная часть и моделирование

Экспериментальное исследование жидкостей CH_3CN , $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$ и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ проводилось при комнатной температуре 298 ± 1 К с использованием Ti:Sa лазера, накачиваемого лазером ЛПН-512 мощностью 7 Вт. Средняя энергия импульсов длительностью 70–80 фс на длине волны 800 нм составила $5 \cdot 10^{-9}$ Дж. В эксперименте использовалась стандартная схема, для чего луч лазера разделялся делительной пластиной на пробные импульсы (10% мощности), следующие через оптическую линию задержки, и накачивающие импульсы (90% мощности). Для улучшения отношения сигнал/шум применялась техника оптического гетеродинамирования, при этом сигнал от поля локального осциллятора и шумы, связанные с

ним, отсекались синхронным детектированием с модуляцией на частоте ~ 300 Гц [18]. Экспериментальные данные жидких CHF_3 и CHCl_3 были взяты из работы [17], где также использовалась стандартная схема с импульсами длительностью 24 фс.

Экспериментальные данные и их теоретическое моделирование представлены на рис. 2, параметры сверхбыстрой молекулярной динамики приведены в таблице 1. Анализ показал, что сигнал ОЭК жидкости $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ возникает только за счёт электронной кубической гиперполяризуемости и представляет собой автокорреляционную функцию, обусловленную слагаемым R_{el} в выражении (2). Сигнал ОЭК жидкостей CHF_3 и $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$ содержит отклик одной, а CHCl_3 – двух внутримолекулярных колебательных мод, при описании которых использовалось выражение (8). Частоты внутримолекулярных колебаний, приведённые в таблице 1 хорошо согласуются с результатами экспериментов по рамановскому рассеянию: для $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$ мы получили значение $\Omega_{\text{n1}} = 183$ см^{-1} ; из литературных данных [22] следует, что частота внутримолекулярных колебаний для CHF_3 составляет $\Omega_{\text{n1}} = 508$ см^{-1} , две частоты молекулы CHCl_3 имеют значения $\Omega_{\text{n1}} = 266.6$ см^{-1} и $\Omega_{\text{n2}} = 364.8$ см^{-1} . Продолжительный экспоненциальный спад отклика вращательной диффузии, наблюдаемый в жидкостях CH_3CN , $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, CHF_3 и CHCl_3 , моделируется выражением (9). Либрационный отклик характерен для всех жидкостей, за исключением $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$. Он носит инерционный характер, при котором сигнал достигает максимума спустя примерно 100 фс после действия импульса накачки и затем спадает до нуля за время порядка 600 фс. Численное решение обратной задачи на основе выражения (10) позволило установить вид функций распределения частот либраций $\rho(\Omega_{\text{lib}})$ для данных жидкостей. Вид этих функций хорошо моделируется распределением Максвелла:

$$\rho(\Omega_{\text{lib}}) \propto \Omega_{\text{lib}}^2 \exp\left\{-\Omega_{\text{lib}}^2/2\Omega_{\text{n,lib}}^2\right\}, \quad (12)$$

где $\rho(\Omega_{\text{n,lib}})$ – ширина функции распределения, значения которой для каждой жидкости приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры моделирования молекулярной динамики. Компоненты тензоров момента инерции J_{xx} , J_{yy} , J_{zz} соответствуют МСК.

Параметр	Соединение				
	CH_3CN	$(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$	CHF_3	CHCl_3
J_{xx} (гр/моль) $\text{м}^2 \cdot 10^{-20}$	55	182	18	48	151
J_{yy} (гр/моль) $\text{м}^2 \cdot 10^{-20}$	3	109	106	85	291
J_{zz} (гр/моль) $\text{м}^2 \cdot 10^{-20}$	55	182	118	48	151
Ω_{n1} (см^{-1})	–	180.0 ± 2.5	–	512.0 ± 2.6	260 ± 2.8
τ_{n1} (пс)	–	0.65 ± 0.07	–	0.2 ± 0.017	1.38 ± 18
Ω_{n2} (см^{-1})	–	–	–	–	365 ± 5
τ_{n2} (пс)	–	–	–	–	1.1 ± 0.3
τ_{d} (пс)	0.75 ± 0.03	0.52 ± 0.10	–	0.8 ± 0.1	1.2 ± 0.2
$\Omega_{\text{n,lib}}$ (см^{-1})	42.4 ± 1.5	28.1 ± 2.7	–	58.3 ± 3.8	31.8 ± 2.6

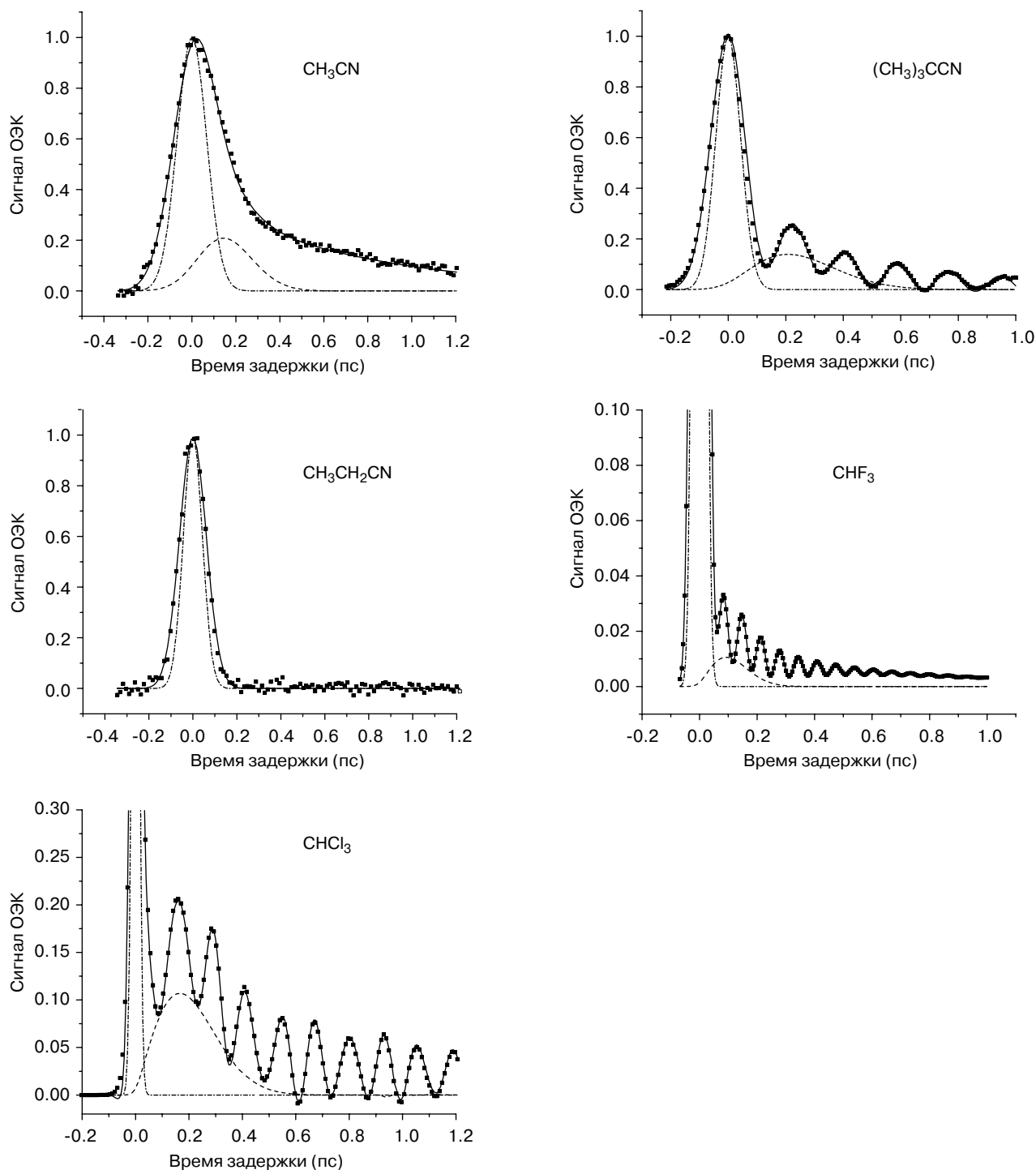


Рис. 2. Сигналы ОЗК чистых жидкостей CH_3CN , $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, CHF_3 и CHCl_3 . ■ – эксперимент, сплошная линия – моделирование сигнала ОЗК, штрих-пунктирная линия – огибающая накапливающего импульса, штриховая линия – отклик либрационных движений молекул.

Важно отметить, что моделирование либрационного отклика было проведено без использования дополнительных констант необратимой релаксации. Таким образом, анализ показал, что быстрый спад либрационного отклика происходит за счёт сильной дефазировки молекулярных осцилляций, благодаря значительному разбросу частот.

Это позволяет говорить о том, что динамические флуктуации либрационных движений на временах порядка сотен фемтосекунд не оказывают заметного влияния на релаксацию либрационного отклика.

Заключение

Результаты теоретического анализа сигнала ОЭК жидкостей CH_3CN , $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, CHF_3 и CHCl_3 позволяют сделать следующие выводы относительно вращательной динамики изучаемых молекул при комнатной температуре.

В первую очередь отметим, что для соединения $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, в отличие от сходных по атомному составу соединений CH_3CN и $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, в сигнале ОЭК не регистрируются колебательно-вращательные отклики. Это происходит из-за отсутствия низкочастотных движений с периодом более 50 фс. Мы полагаем, что основная причина заключается в том, что, по сравнению с молекулами CH_3CN и $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, пространственная структура $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ характеризуется значительной подвижностью отдельных фрагментов относительно друг друга. Это приводит к невозможности возбуждения комбинационно активных колебательно-вращательных мод лазерными импульсами длительностью 70 фс.

Мы обращаем особое внимание на то, что для жидкостей CH_3CN , $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, CHF_3 и CHCl_3 функция распределения $\rho(\Omega_{n,\text{lib}})$ имеет один и тот же вид (12). Особенности либрационной динамики моделируются единственным параметром $\Omega_{n,\text{lib}}$, определяющим ширину функции распределения. Проведенные исследования позволяют предположить, что, возможно, данный вид функции распределения характерен и для других жидкостей, молекулы которых состоят из небольшого числа атомов.

Представленные в таблице 1 данные колебательно-вращательной молекулярной динамики позволяют сделать сравнительные оценки параметров локальных потенциалов, в которых находятся молекулы. Для этого положим, что “дно” локальных потенциалов, где, в основном, и происходят либрации при комнатной температуре, имеет параболический характер $U(\Delta\theta) = \mu(\Delta\theta)^2$ (μ – параметр, описывающий ширину потенциальной ямы, $\Delta\theta$ – отклонение от равновесной ориентации).

Величину μ можно оценить, исходя из частоты либраций $\Omega_{n,\text{lib}}$ и момента инерции молекул $J_{\perp} = J_{xx} = J_{yy}$: $\mu = 1/2[(\Omega_{n,\text{lib}})^2 J_{\perp}]$. При этом амплитуду либраций $\Delta\theta_{\text{max}}$ можно найти, полагая $U(\Delta\theta_{\text{max}}) \approx kT$. Оценки величин μ и $\Delta\theta_{\text{max}}$ для изучаемых жидкостей представлены в таблице 2.

Как видно из таблицы 2, параметры локальных потенциалов μ для жидкостей $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, CHF_3 и CHCl_3 имеют близкие значения, которые в 1.5 раза отличаются

от параметра μ для CH_3CN . Здесь важно отметить, что молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$, CHF_3 и CHCl_3 сильно отличаются по массе, моментам инерции и атомным составам (см. таблицу 1). Кроме того, жидкость CHF_3 при комнатной температуре существует только при высоком давлении [17]. Однако, несмотря на существенные различия, данные соединения обладают близкой к тетраэдрической пространственной структурой. В отличие от них молекула CH_3CN имеет ярко выраженную линейную структуру. Таким образом, значения величин μ таблицы 2 указывают на то, что именно пространственная структура в первую очередь влияет на параметры локальных потенциалов в изучаемых жидкостях и, соответственно, на характер либраций молекул. При этом либрационные движения молекул характеризуются небольшими углами отклонения от равновесного положения порядка 20 градусов, которые, как мы полагаем, определяются возможностью взаимной пространственной ориентации молекулы и ее ближайшего окружения.

Работа поддержана грантом РФФР (№ 06-02-16491) и грантом Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213-2006.2).

Литература

- McMorrow D., Lotshaw W.T., Kenney-Wallace G.A.: IEEE J. Quantum Electronics **24**, 443–454 (1988)
- Righin R.: Science **262**, 1389–1390 (1993)
- Maker P.D., Terhune R.W., Savage C.M.: Phys. Rev. Lett. **12**, 507–509 (1964)
- Sala K., Richardson M.C.: Phys. Rev. A **12**, 1036–1047 (1975)
- Ho P.P., Lu P.Y., Alfano R.R.: Phys. Rev. A **21**, 1730–1734 (1980)
- Levenson M.D., Eesley G.L.: Appl. Phys. **19**, 1–5 (1979)
- Eesley G.L., Levenson M.D., Tolles W.T.: IEEE J. Quantum Electronics **14**, 45–49 (1978)
- Yan Y.J., Mukamel S.: Phys. Rev. A **41**, 6485–6504 (1990)
- Steffen T., Fourkas J.T., Duppen K.: J. Chem. Phys. **105**, 7364–7382 (1996)
- Tanimura Y., Mukamel S.: Phys. Rev. E **47**, 118–136 (1993)
- Wang Y., Ushida K., Tominaga Y., Kira A.: Chem. Phys. Lett. **299**, 576–582 (1999)
- Ricci M., Bartolini P., Chell R.I., Cardini G., Califano S., Righini R.: Phys. Chem. Chem. Phys. **3**, 2795–2802 (2001)
- Idrissi A., Bartolini P., Ricci M., Righini R.: Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 4666–4671 (2003)
- Френкель Я.И.: Кинетическая теория жидкости. М.: Изд-во АН СССР 1945. 422 с.
- Kalpouzos C., McMorrow D., Lotshaw W.T., Kenney-Wallace G.A.: Chem. Phys. Lett. **150**, 138–146 (1988)
- Nikiforov V.G., Moiseev S.A.: arXiv.org:physics/0601195 (2006)
- Laurent T.F., Henning H., Ernsting N.P., Kovalenko S.A.: Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 2691–2697 (2000)
- Lobkov V.S., Moiseev S.A., Nikiforov V.G., Salikhov K.M., Dunaev D.M.: Laser Phys. **13**, 1138–1142 (2003)
- Моисеев С.А., Никифоров В.Г.: Квантовая электроника **34**, 1077–1082 (2004)
- Ахманов С.А., Коротеев Н.И.: Методы нелинейной оптики в спектроскопии рассеяния света: активная спектроскопия рассеяния света. М.: Физматлит 1982. 544 с.
- Шен И.Р.: Принципы нелинейной оптики. Пер. с англ. под ред. Ахманова С.А. М.: Наука 1989. 557 с.
- Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П.: Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Физматлит 1970. 360 с.

Таблица 2. Оценки значений параметра локального потенциала μ и амплитуды либраций $\Delta\theta_{\text{max}}$.

Параметр	Соединение			
	CH_3CN	$(\text{CH}_3)_3\text{CCN}$	CHF_3	CHCl_3
μ (Дж/(град.) ²) · 10 ⁻²⁰	2.9	4.3	4.8	4.5
$\Delta\theta_{\text{max}}$ (град.)	20	17	16	17

Генерация и эффективный квантовый контроль двухцветного светового поля в когерентной трёхуровневой среде

С. А. Моисеев

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Предсказана возможность генерации в резонансной трёхуровневой среде двухцветного светового поля в виде стоячего волнового пакета. Изучены возможности неразрушающих манипуляций с двухцветным полем и их использование для реализации эффективной квантовой конверсии длины волны света.

Исследование нестационарных взаимодействий квантовых световых полей с резонансными когерентными атомными системами вызывает в настоящее время большой интерес в связи с возможностями реализации на этой основе оптической квантовой памяти и разработкой новых методов неразрушающего контроля и манипуляций квантовыми состояниями света. Эти проблемы стали особенно актуальными в связи с практической реализацией оптических квантовых коммуникаций на расстояния до 100 км [1]. Для увеличения предельных расстояний передачи квантовых состояний света очень важно иметь квантовые репитеры, использующие оптическую квантовую память для фотонов [2]. Особый интерес к квантовой памяти связывается с манипуляциями квантовыми состояниями света, включая изменение частоты света, увеличение времени существования света в среде, создание управляемых во времени генераторов однофотонных полей и реализацию нелинейных взаимодействий для очень слабых световых полей.

Значительные успехи в создании оптической квантовой памяти достигнуты благодаря использованию эффекта электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП) [3]. В качестве важной альтернативы в создании универсальной квантовой памяти рассматривается и фотонное эхо [4], на что указывают недавние успешно проведенные эксперименты [5]. Целью настоящего исследования явилось теоретическое изучение квантовых манипуляций слабым импульсом светового поля, используя многочастотное взаимодействие света с системой трёхуровневых атомов в условиях ЭИП.

Нами рассмотрено нестационарное взаимодействие [6–8], при котором поведение исходного пробного светового импульса, находящегося в некотором квантовом состоянии, контролируется двумя дополнительными лазерными полями, частоты которых могут достаточно сильно отличаться друг от друга (см. рис. 1). В дополнение к известной схеме ЭИП для контроля пробного светового поля добавляется взаимодействие со вторым управляющим световым полем, которое включается после вхождения пробного светового импульса в среду.

Предполагается, что исходный импульс светового поля с амплитудой A_+ обладает достаточно малой энергией, благодаря чему система атомов находится всегда близко к основному состоянию $|1\rangle$, а контролирующие лазерные поля описываются достаточно большими частотами Раби $\Omega_+(t)$ и $\Omega_-(t)$, которые варьируются во времени заданным образом. Мы анализируем пространственно-временную эволюцию квантового света после включения дополнительного интенсивного контролирующего поля $\Omega_-(t > t_2)$, которое приводит к генерации второго слабого светового поля амплитуды A_- . В свою очередь, благодаря большой когерентности среды на переходе $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$, вновь появившееся поле A_- начинает сильно взаимодействовать с исходным полем A_+ . Исследование сильного взаимодействия между данными двумя слабыми световыми полями и изучение новых особенностей в их поведении явилось главной задачей настоящей работы.

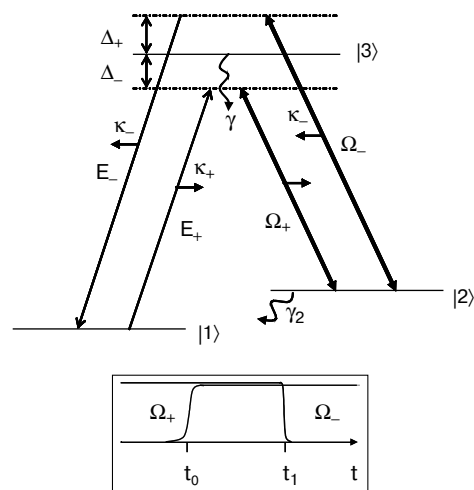


Рис. 1. Энергетические уровни и частоты световых полей, соответствующие двухцветному световому полю и двум лазерным контролирующим полям. Вставка соответствует временной схеме включения и выключения контролирующих полей, $\Omega_+(t)$ и $\Omega_-(t)$ – частоты Раби контролирующих полей, переключение которых позволяет эффективно преобразовывать исходное световое поле E_+ в новое генерированное поле E_- .

При этом важно установить спектральные особенности генерации поля A_- , когда его несущая частота достаточно сильно отличается от несущей частоты исходного пробного поля A_+ , при том, что спектральные ширины этих полей оказываются много меньше разницы частот контролируемых полей $\delta\omega_+ \ll \Delta_+ - \Delta_-$. Такая схема взаимодействия интересна для реализации высокоэффективной конверсии частоты света в небольшом спектральном интервале вблизи резонансной частоты перехода между уровнями $|1\rangle$ и $|3\rangle$ и увеличения возможностей квантового контроля слабыми световыми полями.

Проведён теоретический анализ взаимодействия между световыми полями и системой атомов, близкого к адиабатическим условиям, при которых общее квантовое состояние света и атомов, как оказалось, слабо отклоняется от так называемого “тёмного” состояния двухцветного поляризованного возбуждения. Детально свойства более общих “тёмных” состояний многоцветных бегущих и стационарных световых полей были изучены в работе [9]. Используя общие гейзенберговские уравнения для операторов светового поля и материальные уравнения для системы трёхуровневых атомов, была получена система уравнений для операторов:

$$\hat{\Psi}_{\pm} = \exp(\pm ik_0 z) \sqrt{N} g \hat{A}_{\pm} / \Omega_{\pm}(t),$$

где $g = \wp_{31} \sqrt{\omega_{31} / 2\epsilon_0 \hbar V}$ – постоянная взаимодействия фотона с атомом, $\wp_{31}$ – дипольный момент атомного перехода $|1\rangle - |3\rangle$, $N = V n_0$, n_0 – атомная плотность,

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - ik_0 \right) \hat{\Psi}_+ = -\gamma_2 \gamma_- (\xi / \beta_s) \hat{\Psi}_+ - \xi \tilde{\alpha}_- (\Psi_+ - \Psi_-) - \xi \frac{\gamma_-}{\beta_s} \frac{\partial}{\partial t} (\gamma_- \tilde{\alpha}_+ \hat{\Psi}_+ + \gamma_+ \tilde{\alpha}_- \hat{\Psi}_-), \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + ik_0 \right) \hat{\Psi}_- = \gamma_2 \gamma_+ (\xi / \beta_s) \hat{\Psi}_- - \xi \tilde{\alpha}_+ (\hat{\Psi}_+ - \hat{\Psi}_-) + \xi \frac{\gamma_+}{\beta_s} \frac{\partial}{\partial t} (\gamma_- \tilde{\alpha}_+ \hat{\Psi}_+ + \gamma_+ \tilde{\alpha}_- \hat{\Psi}_-), \quad (2)$$

где $k_0 = \omega_{21} z / c$, $\xi = N g^2 / c \gamma$ – коэффициент резонансного поглощения на переходе $|1\rangle - |3\rangle$,

$$\tilde{\alpha}_{\pm}(t) = \gamma_3 \Omega_{\pm}^2(t) / \beta_s(t),$$

$$\delta t |\beta_s(t) / (\gamma_+ \gamma_-)| \gg 1,$$

$$\gamma_{\pm} = \gamma - i\Delta_{\pm},$$

$$\Delta_{\pm} = \omega_{\pm} - \omega_{31},$$

$$\beta_s = \gamma_2 \gamma_+ \gamma_- + \gamma_- \Omega_+^2 + \gamma_+ \Omega_-^2.$$

Система уравнений (1) и (2) допускает аналитическое решение для произвольного временного поведения контролируемых полей $\Omega_+(t)$ и $\Omega_-(t)$. На основе анализа данного решения были установлено, что совместное воздействие двух контролируемых световых полей не только приводит к генерации световых полей A_+ и A_- , но и сильно изменяет их распространение в среде. Анализ динамики этих полей позволил установить наиболее приемлемые условия для эффективного квантового контроля за их поведением, которое обеспечивает наименьшее необратимое воздействие на параметры световых полей. Для этого наиболее всего подходит ситуация, когда частота пробного светового поля и второго контролирующего лазерного излучения отстроены от точного резонанса симметричным образом, так что $\Delta_+ + \Delta_- = 0$ (см. рис. 1). Интересный эффект в поведении полей A_+ и A_- наблюдается при совпадающих амплитудах контролируемых лазерных полей $\Omega_+(t) = \Omega_-(t)$, при этом исходное пробное световое поле A_+ превращается в двухцветное связанное световое поле с общей групповой скоростью, точно равной нулю. В этом случае оба квантовых поля A_+ и A_- можно задержать в среде на наибольшее время, даже в случае достаточно малых размеров среды. Было детально изучено пространственно-временное поведение и физические параметры такого стоячего двухцветного светового поля, которое испытывает некоторое пространственное расплывание во времени. Однако в оптически плотной среде такое расплывание можно значительно замедлить.

Используя генерацию двухцветного стоячего светового поля, в работе рассмотрены возможности эффективного преобразования исходной длины волны света. Было найдено, что эффективность квантового преобразования исходного света ограничивается лишь влиянием пространственного уширения общей огибающей стоячего светового импульса и может быть ослаблена выбором оптимальных частот дополнительных контролируемых лазерных полей и повышением оптической плотности среды. При этом Фурье компоненты выходного светового поля становятся близки к Фурье компонентам исходного пробного поля $\hat{\Psi}_{\pm,k}(t_1) \Big|_{\Omega_{\pm} \neq 0, \Omega_{\mp} = 0} \cong \hat{\Psi}_{\pm,k}$. Такое решение для нового поля A_- , распространяющегося в обратном направлении, соответствует появлению точной обращённой во времени реплики исходного поля A_+ . Оказалось, что полученный результат, указывающий на возможность генерации двухцветного стоячего светового поля и контролируемого преобразования несущей частоты светового поля, носит довольно общий характер и был затем теоретически обобщен на ситуацию трёхцветного [7], а затем и многоцветного светового поля [9].

Полученные результаты указывают, что предсказываемое эффективное преобразование длины волны светового поля возможно для микросекундных световых полей при использовании типичных лазерных кристаллов или газообразных атомных систем. Найденная воз-

возможность увеличения времени контроля светового поля в среде может использоваться в качестве управляемой оптической динамической линии задержки и динамической квантовой памяти, а также для поиска новых схем усиления слабых нелинейных взаимодействий однофотонных волновых пакетов. Исследования квантовых манипуляций со световыми полями на основе эффектов квантовой памяти в резонансных когерентных атомных системах представляют интерес для реализации оптимальных схем оптических квантовых коммуникаций, в особенности, при создании удобного многоцветного интерфейса [8]. При решении данных проблем необходимым является переход к световым импульсам более короткой наносекундной длительности, где возможности квантовой памяти, основанной на ЭИП и эффекте фотонного эха, приобретают более схожие черты.

Литература

1. Gisin N., Ribordy G., Mittel W., Zbinden H.: *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145–195 (2002)
2. Briegel H.J., Dur W., Cirac J.I., Zoller P.: *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5932 (1998)
3. Fleischhauer M., Imamoglu A., Marangos J.P.: *Rev. Mod. Phys.* **77**, 633 (2005)
4. Moiseev S.A., Kröll S.: *Phys. Rev. Lett.* **87**, 173601 (2001); Moiseev S.A., Ham B.S.: *Phys. Rev. A* **70**, 063809 (2004); Moiseev S.A., Simon C., Gisin N.: *quantum-ph/0609173* (2006)
5. Alexander A.L., Longdell J.J., Sellars M.J., Manson N.B.: *Phys. Rev. Lett.* **96**, 043602 (2006)
6. Moiseev S.A., Ham B.S.: *Phys. Rev. A* **73**, 033812 (2006)
7. Moiseev S.A., Ham B.S.: *J. Korean Phys. Soc.* **48**, no. 4, 540 (2006)
8. Moiseev S.A., Chen Y., Ham B.S.: *J. Korean Phys. Soc.* **49**, no. 6, 2293 (2006)
9. Moiseev S.A., Ham B.S.: *quant-ph/0606243* (2006)

Эффекты распространения, взаимодействия и интерференции световых мод в сужающемся субволновом зонде оптического микроскопа ближнего поля

Н. М. Арсланов, С. А. Моисеев

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Теоретически исследованы эффекты интерференции световых мод в зонде ближнеполевой оптической микроскопии. Используя предложенный подход, дано объяснение экспериментальным измерениям пространственной структуры TM_{1m} светового поля. Найдены условия проявления эффективного интерференционного сжатия светового поля ($\lambda = 500$ нм в свободном пространстве), при котором его поперечные размеры уменьшаются до величины порядка 20 нм при диаметре субволнового отверстия зонда 100 нм. Показано, что использование зонда с оптимальной формой может позволить увеличить интенсивность выходящего света более чем в 10 раз по сравнению с зондом конической формы. Полученные результаты указывают на возможность значительного увеличения пространственного разрешения техники ближнеполевой оптической микроскопии.

Введение

Техника ближнеполевой оптической микроскопии позволяет возбуждать на выходе субволнового зонда сильно локализованные эванесцентные поля [1], которые при взаимодействии с нанообъектами превращаются в свободно распространяющиеся фотоны (рис. 1). Параметры переизлучённых фотонов позволяют получать уникальную информацию о физических свойствах вещества с нанометровым разрешением. В настоящее время такая техника активно применяется в решении прикладных задач микроскопии, нанолитографии [2], записи и хранении информации [3], манипуляции с квантовыми точками [1], а также в изучении фундаментальных вопросов взаимодействия света с отдельными атомами и молекулами [4]. Несмотря на наличие ряда теоретических работ [5–10], описание параметров эванесцентного света на выходе из зонда остаётся сложной проблемой [1]. Надёжное теоретическое решение данной проблемы могло бы позволить

определять параметры светового поля эванесцентного светового поля в ближней зоне выходного отверстия зонда при различных параметрах зонда и правильно интерпретировать экспериментальную информацию.

Другой важной проблемой оптики ближнего поля является низкая пропускная способность зонда [1] ($\sim 10^{-3} - 10^{-4}$), которая становится одним из основных факторов, ограничивающих пространственное разрешение техники. Проводимое исследование позволит предложить оптимальные параметры зонда, позволяющие в максимальной степени уменьшить размер светового пятна и увеличить при этом интенсивность света.

В представленной работе теоретически исследованы эффекты распространения светового поля в сужающемся зонде ближнеполевой оптической микроскопии [11–14]. Данное исследование включало теоретическое определение пространственной структуры светового поля на выходе субволнового зонда, поиск возможности повышения интенсивности и разрешающей способности ближнеполевой оптической микроскопии.

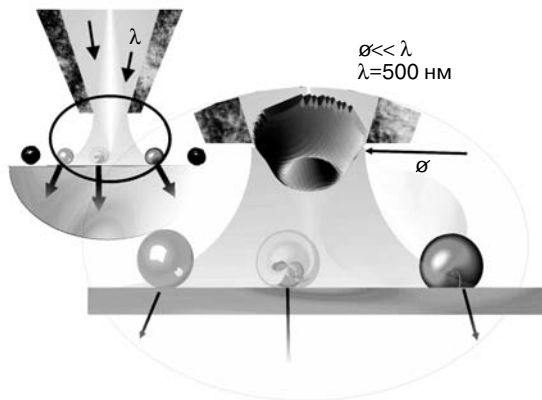


Рис. 1. Ближнеполевая оптическая микроскопия отдельных нанообъектов. На выходе из зонда эванесцентный свет имеет сложную пространственную структуру.

Оптимальная форма зонда микроскопа ближнего поля

Используя развиваемый метод [12], была математически сформулирована и решена задача о нахождении зонда с оптимальной формой, который бы позволял увеличивать прохождение света. Суть подхода, предлагаемого для поиска оптимальной геометрии зонда, состоит в следующем. В используемом методе световое поле в каждом поперечном сечении сужающегося зонда представляется как набор мод волновода с тем же радиусом $a(z)$, какой имеет зонд в этом сечении:

$$\vec{E}(z) = \sum_{-\infty}^{\infty} P_j(z) \vec{E}^j(z), \quad \vec{H}(z) = \sum_{-\infty}^{\infty} P_j(z) \vec{H}^j(z). \quad (1)$$

Коэффициенты разложения $P_j(z)$ подчиняются системе дифференциальных уравнений:

$$\frac{dP_j(z)}{dz} - ih_j(z)P_j(z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} S_{jm}(z)P_m(z), \quad (2)$$

где коэффициенты связи мод $S_{jm}(z)$ на контуре поперечного сечения “С”, проходящем по периметру стенки зонда в данной координате z в цилиндрических координатах:

$$S_{jm}(z) = \frac{a'(z)a(z)}{2h_j(z)[h_j(z) - h_m(z)]} \oint_C d\varphi \left(1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right) \times (H_z^j H_z^m - H_\varphi^j H_\varphi^m + \varepsilon_0 E_r^j E_r^m), \quad (3)$$

где ε_0 , ε – диэлектрическая проницаемость сердцевинки зонда и металлического покрытия, $h_j(z)$ – волновое число j моды.

В большей части зонда основную роль в динамике переноса излучения играет взаимодействие между ближайшими модами, когда характерно следующее соотношение коэффициентов связи мод:

$$S_{j,j\pm 1}(z) \gg S_{j,j\pm 2}(z), S_{j,-i}(z). \quad (4)$$

Так как высшие моды имеют большее затухание в зонде, то при возбуждении основной моды в зонде его оптимальная форма должна обеспечивать минимальное рассеяние этой моды в моды более высокого порядка и минимальное поглощение в стенках. Уравнение на радиус зонда $a(z)$ можно определить, налагая условие, минимизирующее коэффициент связи основной моды с модой “ m ” интегрально вдоль всей длины зонда:

$$\delta \int_0^L dz |\tilde{S}_{1,m}(z, a, a')|^2 \Big|_{a(0)=a_1}^{a(L)=a_2} = 0. \quad (5)$$

В этом случае следует ожидать слабого рассеяния энергии светового поля из основной в соседние моды. Используя (3) и (5), получаем уравнение на радиус сужающегося зонда:

$$\frac{d^2 a(z)}{dz^2} - \frac{1}{a} \left(\frac{da(z)}{dz} \right)^2 \left(1 - \frac{A_{1,m}(z, \lambda)}{2a^2} \right) - \frac{da(z)}{dz} \text{Im } h_{m,1}(z) = 0, \quad (6)$$

где $h_{m,1}(z) = h_m(z) - h_1(z)$. Для ТМ поля [12, 13]:

$$A_{1,2}(z, \lambda) = \left(\frac{\zeta i k_0 a \varepsilon_0 (h_2^2 + h_1^2) - v_2^2 h_1^2 - v_1^2 h_2^2}{h_1 h_2 (k_0^2 \varepsilon_0 - h_1 h_2)} \right)$$

$$+ \frac{v_1^2 - \zeta i k_0 a \varepsilon_0 (h_1 - h_2) - (v_1^2 - v_2^2)}{h_1^2 h_2} \Big) + k.c. \quad (7)$$

Для зонда с $\varepsilon_0 = 2.16$ и $\varepsilon = -34.5 + 8i$, сужающегося от начального радиуса $a_1 = 500$ нм до выходного $a_2 = 50$ нм при длине зонда $L = 450$ нм и света с $\lambda = 500$ нм, решение имеет вид:

$$a(z) = a_1 \exp(-C_3 z / L) \theta(z - \tilde{z}) + \frac{\lambda}{C_1} \left[K \frac{L}{\lambda} - C_2 \exp(C_1 z / L) \right] \theta(\tilde{z} - z), \quad (8)$$

где постоянные коэффициенты определяются из граничных условий $a(0) = a_1$, $a(\tilde{z}) = \tilde{a}$ и $a(L) = a_2$, $\theta(z)$ – функция Хевисайда, $\tilde{z}_2$ – критическое сечение второй моды.

Проведённое нами численное моделирование на основе решения системы уравнений (2) позволяет описывать световое поле в непосредственной близости от выходного отверстия. Из-за сложности задачи на первом этапе изучается влияние самого зонда на свойства светового поля, пренебрегая слабыми эффектами отражения света от образца $P_{-j}(z = L) = 0$. Отметим, что мы называем найденную форму зонда оптимальной формой из условия максимального прохождения света к образцу.

Для иллюстрации преимуществ зонда с оптимальной формой проведено численное моделирование распространения TM_{0m} , EH_{1m} (TM_{1m}) светового поля в следующих типичных формах зонда (рис. 2): а1, а2 – оптимальное сужение для TM_{0m} , EH_{1m} (8); б – “уширенное” сужение с радиусом $a(z) = (KL / \lambda - C_2 \exp(C_1 z / L)) \lambda / C_1$; в – коническое сужение $a(z) = a_1 + (a_2 - a_1) z / L$; г –

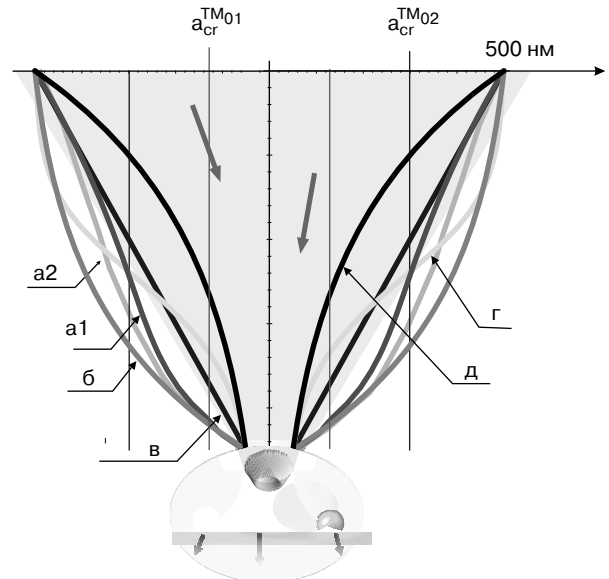


Рис. 2. Формы зонда для ТМ и ЕН света.

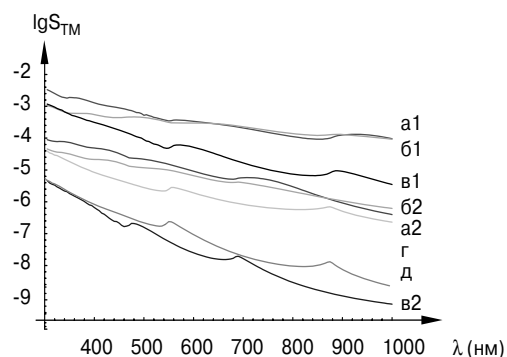


Рис. 3. Коэффициенты прохождения потока S_{TM} энергии TM_{0m} и TM_{1m} света на выходе из отверстия зонда с формой: a1, a2 – оптимальный для TM_{0m} , EH_{1m} ; b1, b2 – “уширенный” профиль для TM_{0m} , EH_{1m} ; v1, v2 – конический для TM_{0m} , EH_{1m} ; γ – профиль [9] для TM_{0m} ; д – экспоненциальный для TM_{0m} .

форма сужения, изучаемая в работе [10]; д – экспоненциальное сужение $a(z) = a_1 \exp(-C_3 z/L)$.

Коэффициенты прохождения потока энергии поля для некоторых длин волн света были определены экспериментальными и приближёнными теоретическими методами для зонда с конической формой [1]. Они совпадают с нашими расчётами, приведёнными на рис. 3, полученными для всего спектрального оптического диапазона по порядку величины [12, 13]. Проведённые расчёты демонстрируют, что применение зонда с оптимальной формой может позволить увеличить интенсивность светового поля на выходе из зонда по сравнению с коническим зондом в 10 раз для TM_{0m} света и в 100 раз для TE_{0m} света при сохранении размера выходного отверстия и величины входной интенсивности.

Пространственная структура TM_{1m} светового поля

Для совершенствования разрешения техники и правильной интерпретации информации, получаемой из экспериментов, необходимо хорошо понимать детали взаимодействия слабого локализованного светового поля с нанообъектом. Экспериментальные картины пространственного распределения интенсивности эванесцентного света в сечении зонда [2] (рис. 4) нельзя объяснить про-

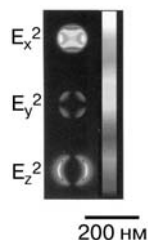


Рис. 4. Экспериментальное распределение интенсивности света в выходном сечении зонда [2] с учётом дифракции на расстоянии $z/a = 0.1$ от отверстия по теории [5, 6].

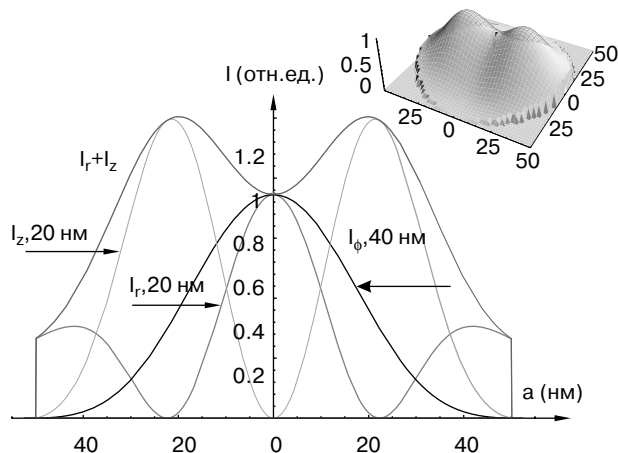


Рис. 5. Пространственная структура TM_{1m} света на выходе из зонда с углом наклона $\alpha = 30^\circ$ с $\varepsilon = -34.5 + 8i$, $\varepsilon_0 = 2.16$, $\lambda_0 = 500$ нм, $a_1 = 500$ нм, $a_2 = 50$ нм в отн. ед. Стрелкой обозначена ширина интенсивности на полувысоте. На вставке приведен трёхмерный рисунок пространственной структуры света.

стым наложением интенсивностей мод прямолинейного волновода. Они нуждаются в теоретическом анализе.

Используя предложенный метод, было проведено моделирование распространения света в зонде ближне-полевого микроскопа при падении в зонд линейно поляризованного света. Для случая возбуждения TM_{11} моды в зонде с конической формой была впервые рассчитана пространственная структура TM_{1m} света (рис. 5) в ближней зоне выходного отверстия зонда, которая хорошо описывает экспериментальные данные измерения интенсивности света на выходе [2] (сравни рис. 4, 5). В работе [2] световое поле в выходном сечении зонда изучалось посредством детектирования излучения, рассеянного отдельной молекулой, находящейся в плоскости выходного отверстия зонда. В этом случае возмущение выходного поля, вызываемого отдельной молекулой, было пренебрежимо мало.

Интерференционное пространственное сжатие света

Используя развитый подход, было теоретически исследовано влияние эффектов взаимодействия и интерференции световых мод на пространственную структуру TM_{0m} светового поля на выходе сужающегося зонда микроскопа ближнего поля.

Для малых углов наклона стенки зонда $\alpha < 45^\circ$ световое поле сосредоточено в основной TM_{01} моде, что проявляется в характерной пространственной структуре светового поля на выходном отверстии зонда, где интенсивность продольной компоненты поля

$$I_z(r, \varphi, z) \sim |P_1(z)|^2 J_0(\alpha_{01}r)^2$$

и радиальной компоненты

$$I_r(r, \varphi, z) \sim |P_1(z)|^2 J_1(\alpha_{01}r)^2.$$

При больших углах наклона стенки зонда α происходит усиление второй моды и интенсивности компонент поля в выходном отверстии и выражаются как

$$\begin{aligned} I_z(r, \varphi, z) \sim & |P_1(z)|^2 J_0(\alpha_{01}r)^2 + |P_2(z)|^2 J_0(\alpha_{02}r)^2 \\ & + 2 |P_1(z)P_2(z)| J_0(\alpha_{01}r)J_0(\alpha_{02}r) \\ & \times \cos(\theta_1 - \theta_2), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} I_r(r, \varphi, z) \sim & |P_1(z)|^2 J_1(\alpha_{01}r)^2 + |P_2(z)|^2 J_1(\alpha_{02}r)^2 \\ & + 2 |P_1(z)P_2(z)| J_1(\alpha_{01}r)J_1(\alpha_{02}r) \\ & \times \cos(\theta_1 - \theta_2), \end{aligned} \quad (10)$$

где θ_i – фаза i -ой моды.

Благодаря фазовому соотношению $\theta_1(L) - \theta_2(L) \approx \pi$ и сопоставимости амплитуд мод $P_1(L)$ и $P_2(L)$, когда значение α становится близким к 71 – 76° , интерференция мод приводит к резкому пространственному сжатию светового поля (рис. 6), которое приобретает вид узкой кольцевой структуры с шириной $d \approx 25$ нм. Для сравнения отметим, что достижение такого пространственного сжатия поля уменьшением диаметра выходного отверстия от $D_1 = 100$ нм до $D_2 = 25$ нм приведёт к уменьшению коэффициента прохождения света в $\sim (D_1/D_2)^4 = 256$ раз [1].

Отметим, что наилучшее разрешение может позволить зонд с сильным “интерференционным” сжатием света в сечении зонда, когда угол наклона стенки на выходе зонда $71^\circ < \alpha < 76^\circ$, и достаточно высокой величиной выходной интенсивности. Зонд с оптимальной формой в своих возможностях сочетает эти свойства, так

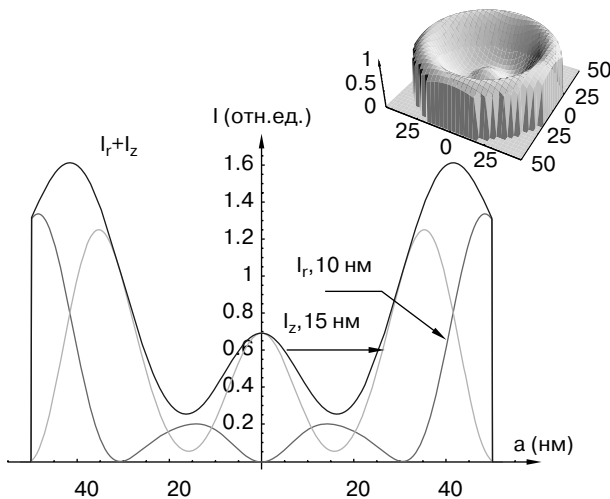


Рис. 6. Пространственная структура интенсивности светового поля на выходе из зонда (внутри зонда) с углом наклона $\alpha = 75^\circ$, $\lambda_0 = 500$ нм, $a1(0) = 500$ нм, $a2(L) = 50$ нм в отн. ед. На вставке приведен трёхмерный рисунок пространственной структуры света.

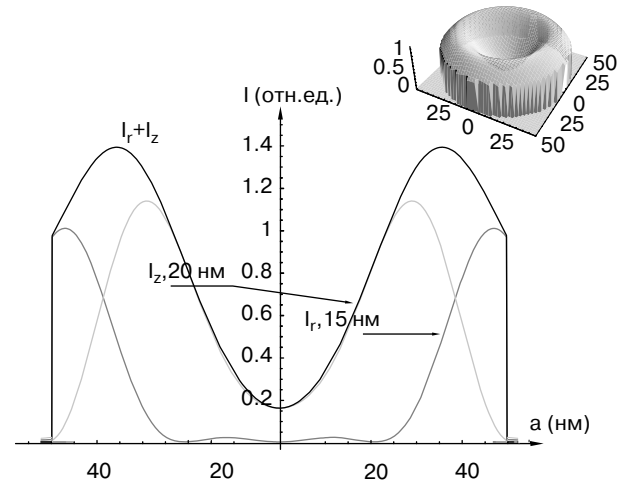


Рис. 7. Пространственная структура интенсивности TM_{0m} света в сечении отверстия зонда с оптимальной формой для $\lambda_0 = 500$ нм. На вставке приведен трёхмерный рисунок пространственной структуры света.

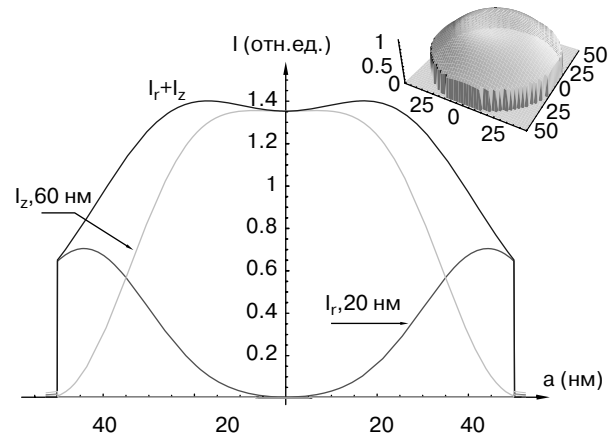


Рис. 8. Пространственная структура интенсивности TM_{0m} света в сечении отверстия зонда с конической формой $\lambda_0 = 500$ нм. На вставке приведен трёхмерный рисунок пространственной структуры света.

как имеет лучшую выходную мощность (рис. 3) и угол наклона $\alpha(L) \approx 71^\circ$. Сравнение с коническим зондом (рис. 7 и 8) показывает, что использование зонда с оптимальной формой может увеличить разрешение в 3 раза и позволит достичь разрешения в $D_2 = 20$ нм при диаметре отверстия $D_1 = 100$ нм ($\sim (D_1/D_2)^4 = 625$) при той же интенсивности светового поля у выходного отверстия зонда.

Выводы и заключения

В данной работе теоретически исследовано распространение света в зонде оптического микроскопа ближнего поля с учётом реальных параметров зонда с диаметром выходного отверстия зонда $D = 100$ нм заметно меньшим длины волны света $\lambda = 500$ нм. Используя предложенный подход, нами дано объяснение пространствен-

ной структуры TM_{1m} светового поля в ближней зоне выходного отверстия зонда с параметрами, соответствующими экспериментальным данным [2]. Хорошее согласие полученных результатов с экспериментальными данными даёт основание использовать развиваемую теорию для расчётов параметров выходного поля и определения аппаратной функции [4].

Показано, что изменение формы зонда может значительно трансформировать пространственную структуру светового поля в выходном отверстии зонда. В частности, было установлено, что эффекты интерференции мод в поведении светового поля могут привести к возникновению узкой кольцевой структуры на выходе зонда, которая наиболее сильно сжата при угле $\alpha = 75^\circ$ и характеризуется шириной $d \approx 20$ нм. Используя современные экспериментальные методы [1], можно контролировать расстояние δz между поверхностью и зондом с точностью до единиц нанометров. При достаточно малом расстоянии $\delta z \ll 1$ световое поле на поверхности практически совпадает со световым полем в выходном отверстии зонда [2]. В этом случае разрешающая способность в пространственных измерениях свойств молекул на поверхности вещества [16] будет определяться шириной пиков интенсивности поля.

Используя детальный анализ режимов взаимодействия световых мод при распространении в зонде, предложен метод определения оптимальной формы зонда ближнеполевой оптической микроскопии и получено аналитическое выражение оптимальной формы зонда. Интерференция световых мод в зонде с оптимальной формой может позволить более сильное пространственное сжатие поля в выходном сечении зонда. При диаметре отверстия 100 нм интенсивность TM_{01} светового поля в сечении зонда локализуется в кольце с шириной около

15–20 нм с интенсивностью светового поля более чем в 10 раз большей для TM_{0m} света (и в 100 раз для TE_{0m} света) по сравнению с зондом конической формы. Представленные в настоящей работе результаты указывают на возможность экспериментов по ближнеполевой оптической микроскопии с гораздо большим пространственным разрешением. Использование предсказываемого сверхсильного пространственного сжатия светового поля для изучения свойств отдельных нанобъектов на поверхности твёрдых тел является темой будущих исследований.

Литература

1. Hecht B., Sick B., Wild U.P., Deckert V., Zenobi R., Martin O.J.F., Pohl D.W.: J. Chem. Phys. **112**, 7761–7776 (2000)
2. Betzig E., Trautman J.K.: Science **257**, 189–195 (1992)
3. Hosaka S., Kikukawa A., Koyanagi H., Shintani T., Miyamoto M., Nakamura K., Etoh K.: Nanotechnology **8**, A58–A62 (1997)
4. Betzig E., Chichester R.J.: Science **262**, 1422–1425 (1993)
5. Bethe H.A.: Phys. Rev. **66**, 163–173 (1944)
6. Bouwkamp C.J.: Rep. Prog. Phys. **17**, 35–100 (1954)
7. Baida F.I., Van Labeke D., Pagani Y.: Opt. Commun. **225**, 241–252 (2003)
8. Roberts A.: J. Opt. Soc. Am. A **4**, 1970–1983 (1987)
9. Kuznetsova T.I., Lebedev V.S., Tselik A.M.: J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **6**, 338–348 (2004)
10. Novotny L., Pohl D.W., Regli P.: J. Opt. Soc. Am. A **11**, 1768–1778 (1994)
11. Арсланов Н.М.: Нанооптика ближнеполевой микроскопии: эффекты распространения светового поля в сужающемся субволновом зонде. Дис. на соиск. учён. степ. канд. физ.-мат. наук. Казань: КГУ 2006.
12. Arslanov N.M.: J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **8**, 338–344 (2006)
13. Arslanov N.M., Moiseev S.A.: J. Opt. Soc. Am. A **24**, 831–838 (2007)
14. Arslanov N.M.: Proc. SPIE (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 61811B–1 (1–8). Billingham, Washington: SPIE – The Int. Society for Optical Engineering 2006.
15. Butter J.Y.P., Hecht B.: Nanotechnology **17**, 1547–1550 (2006)

Первые примеры исследования методом ЭПР взаимодействий Cu–Tb и Cu–Gd в гетероядерных кластерах с редкоземельными ионами

В. К. Воронкова, Р. Т. Галеев, Л. В. Мингалиева, А. А. Суханов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Методом ЭПР исследованы обменные взаимодействия между ионами меди и редкоземельными ионами на примере двухъядерного кластера Cu–Gd и пятиядерного кластера Cu–Tb–Cu–Tb–Cu. Рассчитаны модельные спектры ЭПР указанных систем и зависимость их от характера и величины обменного взаимодействия. Рассмотрены возможности и перспективность метода для изучения обменных взаимодействий в таких системах. Обнаружены и изучены особенности формы спектров ЭПР систем, в которых реализуется взаимодействие между ионами меди и некрамерсовыми ионами Tb³⁺. Обнаруженные особенности позволяют из анализа формы спектра ЭПР определить характер и величину взаимодействия. Для обеих систем установлен ферромагнитный характер взаимодействия Cu–Re.

Введение

Механизмы взаимодействия между двумя ионами группы железа к настоящему моменту достаточно хорошо изучены и поняты. Знание факторов, управляющих природой и величиной парного взаимодействия, позволяет синтезировать новые соединения с заданными магнитными свойствами. В то же время закономерности формирования взаимодействия между 3d- и 4f-орбиталями в молекулярных системах остаются практически не изученными, несмотря на то, что такие системы представляются перспективными в плане создания новых материалов за счёт особенностей редкоземельных ионов (РЗ). В последние десятилетия интерес к 3d-4f взаимодействиям усилился [1–20], так как исследования закономерностей этого взаимодействия открывают возможности создания новых систем с заданными свойствами для спинтроники, молекулярной электроники и элементов памяти. Кроме того, решение фундаментальных проблем, связанных с природой и механизмами обменного взаимодействия, в которое вовлечены ионы с незаполненными 3d- и 4f-оболочками, представляют интерес в связи с исследованием особенностей магнитных свойств высокотемпературных сверхпроводников, кооперативных оптических процессов. Отсутствие фундаментальных исследований природы взаимодействий между ионами группы железа и РЗ ионами, а, следовательно, и отсутствие знаний о возможных закономерностях в их изменении, делают актуальным изучение обменных взаимодействий между РЗ ионами и ионами группы железа на примере молекулярных соединений как модельных систем.

Последние годы мы занимаемся исследованием 3d-4f взаимодействий на молекулярных системах методом ЭПР. Следует отметить, что все имеющиеся в литературе данные о 3d-4f взаимодействиях к моменту начала нашего исследования и до настоящего времени получе-

ны преимущественно методом магнитной восприимчивости. Поэтому нам приходится, прежде всего, решать вопрос о форме спектров ЭПР и особенностях спектров смешанных соединений, которые позволили бы получить надёжно информацию о взаимодействиях между ионами группы железа и РЗ ионами. Нами предыдущие исследования были проведены, главным образом, на системах, в которых ион меди взаимодействует с ионами неодима. На основании полученных ранее результатов и теоретических расчётов установлены две особенности спектров ЭПР смешанных систем, связанные с особенностями взаимодействия между быстро релаксирующим РЗ ионом и относительно медленно релаксирующим ионом меди. Были предложены методики получения сведений о взаимодействии медь-неодим из анализа температурной зависимости спектра иона меди [20, 21].

В 2006 году мы продолжили исследования методом ЭПР взаимодействия между ионами группы железа и РЗ ионами на примере изучения взаимодействия в димерах Cu–Gd и взаимодействия между ионом меди и некрамерсовым ионом тербия.

ЭПР димеров Cu–Gd

Из всех смешанных систем наиболее изученными к настоящему моменту являются соединения с взаимодействием медь-гадолиний, и практически для всех изученных примеров установлен ферромагнитный характер взаимодействия, что привело к предположению, что это взаимодействие всегда имеет ферромагнитный характер, независимо от природы лигандов и других факторов. Все исследования выполнены методом магнитной восприимчивости, интересно было рассмотреть возможности метода ЭПР для исследования димеров медь-гадолиний.

Экспериментально исследованы поликристаллические образцы соединения $\{[\text{LCu}(\text{H}_2\text{O})]\text{Gd}(\text{NO}_3)_3\}$, состоящего из димерных фрагментов Cu–Gd. В X-диапазоне изучена температурная зависимость спектров от комнатной температуры до 4.2 К, в Q-диапазоне при $T = 293$ и 4.2 К. Составлена программа для расчёта спектров ЭПР поликристаллических образцов для димеров $\text{Cu}(S_1 = 1/2)\text{--Gd}(S_2 = 7/2)$.

Спектры, рассчитанные с помощью этой программы, позволили проанализировать их форму в зависимости от параметров тонкой структуры гадолиния, от соотношения между параметрами тонкой структуры и частотой микроволнового поля, от температуры. Так как для димера Cu–Gd спектр является суммой спектров от мультиплетов с суммарными спинами $S = 3$ и 4, ожидалось, что из температурной зависимости формы спектра можно определить знак обменного взаимодействия между медью и гадолинием и оценить величину этого взаимодействия. Расчёты показали, что при наборе параметров, которые наиболее правильно описывают частотную и температурную зависимости формы спектра, изменения заселённости возбуждённого и основного мультиплетов приводят к небольшим изменениям соотношения интенсивностей сигналов и их положения. Наиболее отчётливо изменения с температурой наблюдаются в Q-диапазоне. Сравнение спектров, рассчитанных при $T = 300$ и 4.2 К для ферромагнитного и антиферромагнитного взаимодействий (рис. 1), демонстрирует, что температурные изменения соотношения интенсивностей центральных и слабополевых сигналов зависят от знака J – изотропной части взаимодействия медь-гадолиний, и, конечно, от величины этого взаимодействия. Для $|J| = 10 \text{ см}^{-1}$ форма спектров при $T = 300 \text{ К}$ для случаев антиферромагнитного и ферромагнитного взаимодействий практически совпадает. Экспериментально наблюдаемое увеличение относительной интенсивности слабополевых сигналов при низких температурах однозначно указывает на ферромагнитный характер взаимодействия в этом димере.

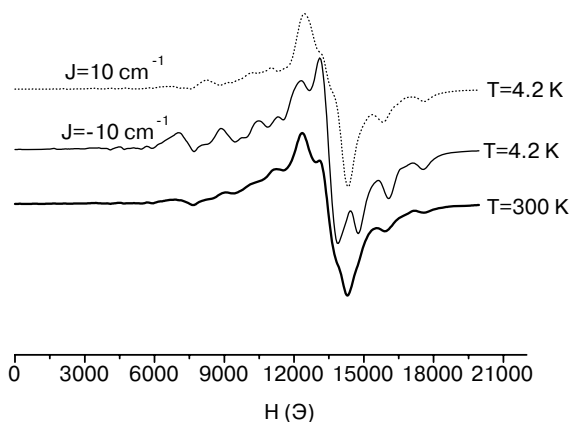


Рис. 1. Спектры ЭПР димера Cu–Gd, рассчитанные для Q-диапазона при $T = 300$ и 4.2 К, $\Delta = 0.07 \text{ см}^{-1}$, $E = -0.04 \text{ см}^{-1}$, $J = 10 \text{ см}^{-1}$ и $J = -10 \text{ см}^{-1}$. При $T = 300 \text{ К}$ форма спектров для $J = 10 \text{ см}^{-1}$ и -10 см^{-1} совпадает.

Взаимодействие Cu–Tb

Изучение взаимодействия Cu–Tb представляется интересным, так как оно даёт пример взаимодействия, в которое вовлечён некрамерсовый ион.

Взаимодействие медь-тербий было изучено на примере пятиядерного комплекса (рис. 2).

Согласно структурным данным, пятиядерный кластер $[\text{Cu}_3\text{Ln}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8]$ можно представить как линейную цепочку, в которой чередуются комплексы ионов меди и РЗ иона, связанные мостиковыми фрагментами L1 и L2: $\text{Cu}(2)\text{--L1--Ln--L2--Cu}(1)\text{--L2--Ln--L1--Cu}(2)$. Центральный комплекс меди Cu(1) и боковые комплексы Cu(2) структурно неэквивалентны: в первом случае окружение меди квадратно-плоское, во втором – квадратная пирамида. Восемь атомов кислорода образуют вокруг РЗ иона искажённую антипризму (рис. 2). В первом приближении можно рассматривать ее как сжатую антипризму. Причём ось сжатия этой антипризмы достаточно хорошо совпадает с направлением, соединяющим Cu(2) и вершину квадратной пирамиды.

Ранее нами были изучены изоструктурные кластеры $[\text{Cu}_3\text{Ln}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8]$, где $\text{Ln} = \text{Nd}(\text{III})$, $\text{Sm}(\text{III})$, $\text{Pr}(\text{III})$ [21]. В отличие от соединения $[\text{Cu}_3\text{Ln}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8]$ с $\text{Ln} = \text{Pr}(\text{III})$, который также является некрамерсовым ионом, результаты исследования ЭПР соединения с $\text{Ln} = \text{Tb}(\text{III})$ убедительно указывают на проявление взаимодействия между ионами меди и некрамерсовым ионом.

Исследования методом ЭПР проведены на поликристаллических образцах в X-диапазоне при температурах от 293 до 4.2 К (рис. 3) и в Q-диапазоне при $T = 293$ и 4.2 К (рис. 4). Известно [22–24], что из-за большой скорости спин-решёточной релаксации, спектры от ионов тербия наблюдаются только при низкой температуре. Спектр пятиядерного кластера в Q-диапазоне при $T = 293 \text{ К}$ на рис. 4а демонстрирует, что при комнатной температуре спектр ЭПР является суммой спектров от двух типов комплексов меди: Cu(1) и Cu(2). В [21] для кластера с $\text{Ln} = \text{Nd}$ было установлено, что при комнатной температуре из-за определённого соотношения между скоростью релаксации иона неодима и величиной взаимодействия Nd–Cu(2), спектр наблюдается только от центрального комплекса Cu(1), и определены параметры g-тензора комплекса Cu(1), которые использованы нами при расчёте спектра, показанного пунктиром на рис. 4а. Этот спектр смоделирован как сумма спектров двух комплексов Cu(2) и одного комплекса Cu(1). В X-диапазоне спек-

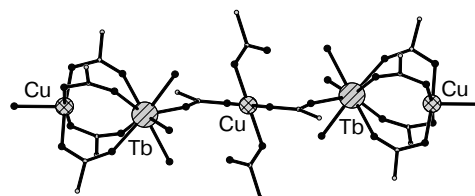


Рис. 2. Структура пятиядерного кластера.

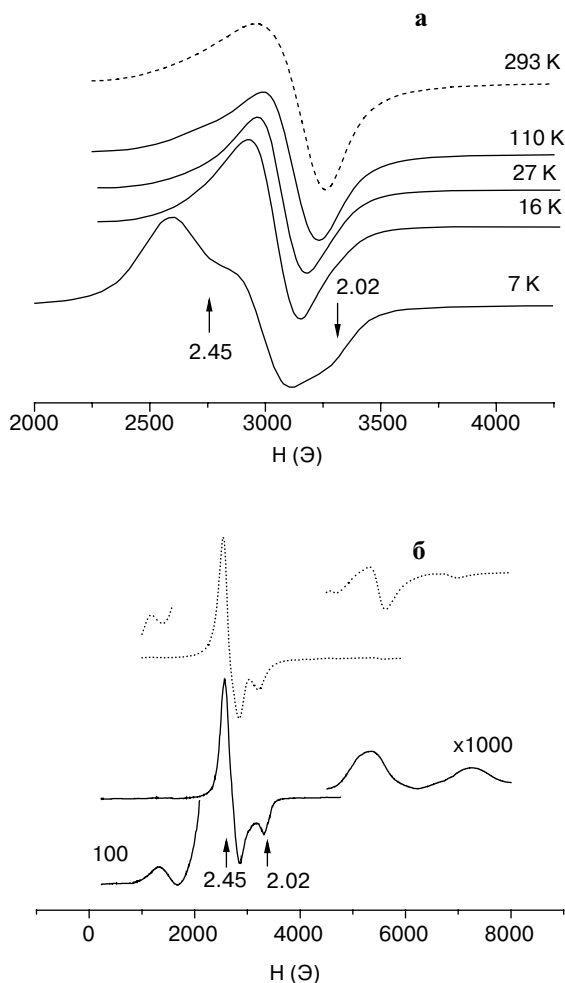


Рис. 3. Спектр поликристаллического образца пятиядерного кластера в X-диапазоне в интервале температур 7–293 К (а) и при $T = 4.2$ К (б), стрелками показаны эффективные g -факторы в некоторых характерных точках спектра. Пунктиром в б показан спектр, рассчитанный для пятиядерного комплекса с параметрами для комплексов ионов меди $g_{1z} = 2.338$, $g_{1xy} = 2.047$; $g_{2z} = 2.30$, $g_{2xy} = 2.065$, для тербия, согласно соотношениям (1), $\Delta = 10 \text{ см}^{-1}$, $J_{01} = -0.22 \text{ см}^{-1}$, $J_{02} = -0.05 \text{ см}^{-1}$.

ры от двух медных центров неразличимы (рис. 3). Трансформация спектра при понижении температуры (рис. 3а) не может быть описана как сумма невзаимодействующих центров меди и тербия и указывает на проявление спин-спинового взаимодействия между ионами меди и тербия.

Некрамерсовый ион Tb^{3+} имеет конфигурацию $4f^8$ с основным мультиплетом $^7F_6$, который в зависимости от симметрии кристаллического поля ближайшего окружения расщепляется на некоторое количество синглетов и дублетов $|\pm M\rangle$, где M – проекция полного углового момента иона тербия. Расчёты показали, что в поле сжатой антипризмы основным состоянием является синглет $|0\rangle$, а возбуждёнными состояниями – дублеты $|\pm 1\rangle$, $|\pm 2\rangle$ и т.д., и нижние состояния достаточно удалены от других состояний. Это позволило нам при рассмотрении низкотемпературных спектров кластера ввести для описания основного состояния тербия эффективный спин

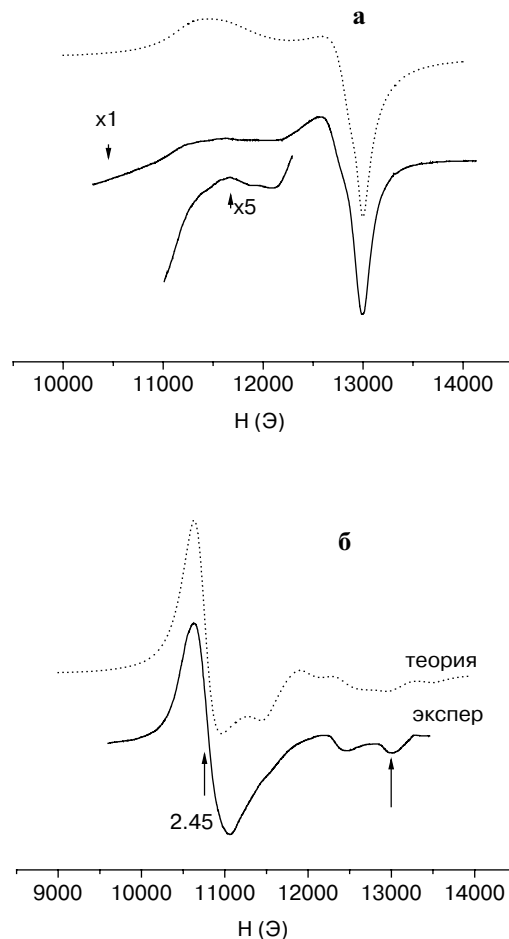


Рис. 4. Спектр ЭПР поликристаллического образца пятиядерного кластера $[\text{Cu}_3\text{Tb}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8]$ в Q-диапазоне при комнатной температуре (а) и $T = 4.2$ К (б). Пунктиром показаны рассчитанные спектры: а – как сумма спектров комплекса меди с $g_{1z} = 2.338$, $g_{1xy} = 2.047$ и двух комплексов меди с $g_{2z} = 2.30$, $g_{2xy} = 2.07$; б – для пятиядерного кластера с параметрами, как на рис. 3б.

$\tilde{S}_{\text{Tb}} = 1$ и оператор тонкой структуры $\Delta[\tilde{S}_{\text{ZTb}}^2 - 1/3\tilde{S}(\tilde{S} + 1)]$, описывающий расщепление уровней $|0\rangle$, $|\pm 1\rangle$ в кристаллическом поле.

Для интерпретации полученных результатов мы численно рассчитали форму спектров ЭПР фрагментов Cu–Tb, Tb–Cu–Tb и Cu–Tb–Cu–Tb–Cu.

При расчёте низкотемпературных спектров ЭПР в приближении слабого обмена использовался гамильтониан, выраженный через эффективный спин тербия $\tilde{S}_{\text{Tb}}$ и эффективные g -факторы $g_{z,x,y\text{Tb}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \Delta[(\tilde{S}_{\text{ZTb}})^2 - \frac{1}{3}\tilde{S}(\tilde{S} + 1)] + \beta(\tilde{S}_{\text{Tb}}\{g_{\text{Tb}}\}\mathbf{H} \\ & + \tilde{S}_{\text{Cu}}\{g_{\text{Cu}}\}\mathbf{H}) + \tilde{S}_{\text{Tb}}\{J + D\}\tilde{S}_{\text{Cu}}, \\ g_{x\text{Tb}} = & g_{y\text{Tb}} = \sqrt{21}g_J, \quad g_{z\text{Tb}} = g_J, \quad J_x = \sqrt{21}(g_J - 1)J_0, \\ J_y = & \sqrt{21}(g_J - 1)J_0, \quad J_z = (g_J - 1)J_0, \\ D_x = & \sqrt{21}D_{0x}, \quad D_y = \sqrt{21}D_{0y}, \quad D_z = D_{0z}, \end{aligned} \quad (1)$$

где Δ , $\{J\}$, $\{D\}$ – параметр тонкой структуры и тензоры обменного и диполь-дипольного взаимодействий для эффективного спина $\tilde{S}_{\text{Tb}}$; $\{g_{\text{Cu}}\}$ – g -тензор иона меди, соответственно; J_0 – параметр изотропного обмена $J_0 S_{\text{Tb}} S_{\text{Cu}}$, где S_{Tb} – оператор полного спинного момента тербия. Значения g -фактора и параметров обмена $J_{Z,X,Y}$ для эффективного спина получены из тождеств, аналогичных представленному в [22, с. 325].

Для расчёта спектров ЭПР пятиядерного кластера необходимо записать гамильтониан, учитывающий все парные взаимодействия в данном кластере: Cu(2)–Tb, Tb–Cu(1), Cu(1)–Tb, Tb–Cu(2) и зеемановские взаимодействия для пяти парамагнитных центров с учётом неэквивалентности g_{Cu1} и g_{Cu2} .

На рис. 3б и 4б представлены рассчитанные спектры для пятиядерного кластера, которые достаточно хорошо описывают экспериментальные спектры при $T = 4.2$ К на двух частотах. Согласие теории с экспериментом достигнуто при $J_{1,20} \ll \Delta$ и ферромагнитном характере взаимодействия между ионами меди и тербия. Найдено, что взаимодействие иона тербия с Cu(2) превышает взаимодействие с Cu(1): величина J_{10} оценена равной -0.2 см $^{-1}$, что соответствует $J_{1z} = -0.1$ см $^{-1}$, $J_{1x,y} = -0.46$ см $^{-1}$, а

$J_{20} \sim -0.05$ см $^{-1}$, $J_{2z} = -0.02$ см $^{-1}$, $J_{2x,y} \sim -0.1$ см $^{-1}$. При расчётах спектров диполь-дипольное взаимодействие учитывалось в программе в соответствии со структурными данными.

Особенности спектров ЭПР в случае слабого взаимодействия между ионом меди и ионом тербия в сжатой антипризме можно продемонстрировать на примере спектра пары Cu(2)–Tb (рис. 5).

Рассмотрим простой случай, когда оси всех тензоров совпадают и магнитное поле направлено вдоль одной из главных осей. Для магнитного поля вдоль оси Z матрица гамильтониана (1) решается аналитически и выражения для резонансных полей показывают, что сигнал, соответствующий невзаимодействующему иону меди, расщепляется на три сигнала:

$$H_{1,2} = \frac{h\nu \pm [(g_{\text{J}} - 1)J_0 + D_{0Z}]}{g_{Z\text{Cu}}\beta},$$

$$H_3 = \frac{h\nu}{g_{X,Y\text{Cu}}\beta}. \quad (2)$$

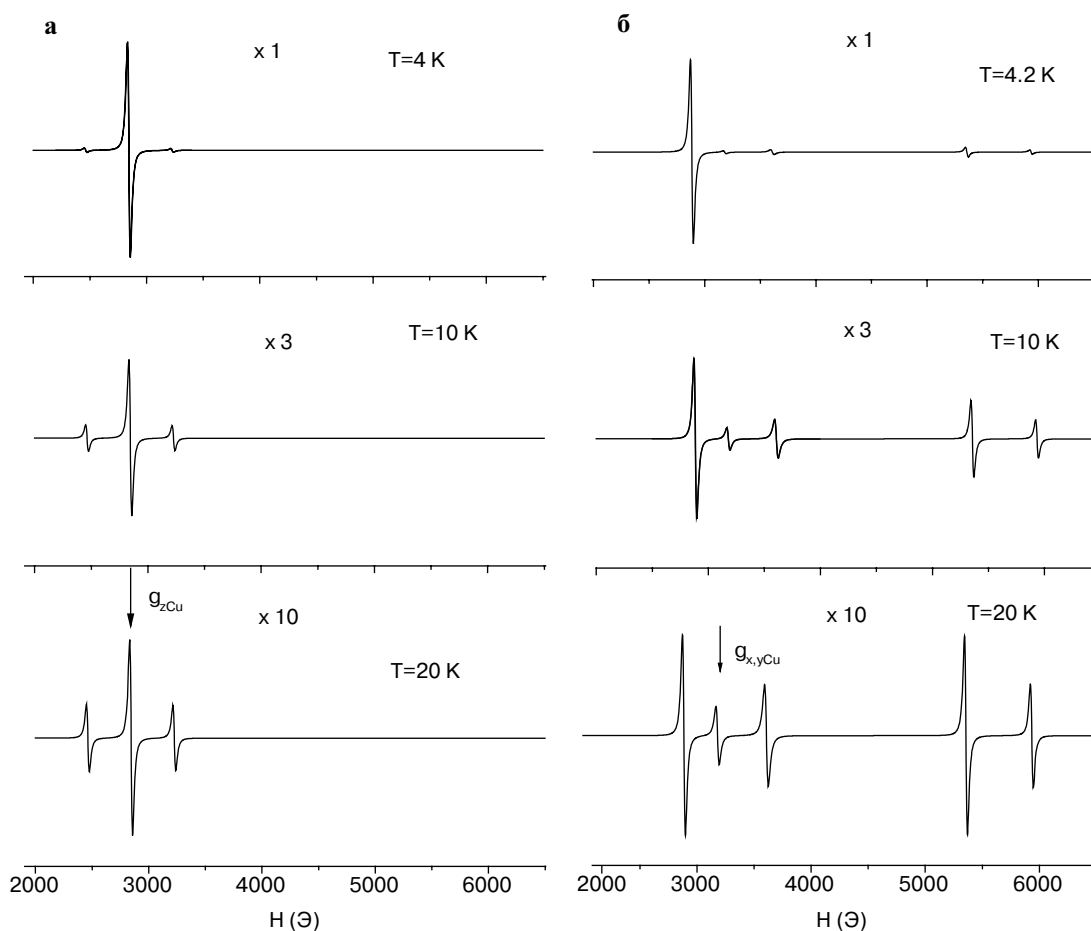


Рис. 5. Спектры двухъядерного фрагмента Cu–Tb в X-диапазоне, рассчитанные для ориентации магнитного поля вдоль оси Z (а) и осей X , Y (б) главных осей g -тензоров с учётом только обменного взаимодействия $J_0 = 0.08$ см $^{-1}$. Показано увеличение интенсивности сигнала относительно спектра при $T = 4.2$ К.

Основным отличием от обычной ситуации, когда сигналы двух неэквивалентных центров расщепляются за счёт слабого взаимодействия между ними [25], является существенное различие в интенсивности сигналов, которое изменяется от температуры (рис. 5). Дело в том, что только один сигнал соответствует переходу между нижними состояниями, а два других соответствуют переходам между возбуждёнными состояниями, отстоящими приблизительно на величину Δ .

Соотношение интенсивностей сигналов зависит от температуры и при понижении температуры интенсивность двух крайних сигналов уменьшается, поскольку они соответствуют переходам между верхними уровнями, отстоящими от основного на величину порядка Δ (рис. 5а). Поэтому в спектре при $kT < \Delta$ будет наблюдаться линия в поле H_3 , соответствующая g -фактору меди g_{Cu} . Сигналы от иона тербия для данной ориентации не наблюдаются, так как ожидаемые резонансные поля для этих переходов существенно превышают технические возможности эксперимента.

Когда магнитное поле направлено вдоль оси X или Y , также, как для параллельной ориентации, соотношение интенсивностей трёх линий изменяется с температурой и при низкой температуре, например, при $T = 4$ К, наблюдается только один интенсивный сигнал (рис. 5б). Но, в отличие от параллельной ориентации, интенсивным будет сигнал с резонансным полем, сдвинутым относительно резонансного поля (H_3) сигнала невзаимодействующего иона. В зависимости от знака J этот сигнал будет сдвинут в более слабые или более сильные поля по отношению к H_3 . Для данной ориентации магнитного поля в области $H \sim 5000\text{--}6000$ Э наблюдаются сигналы от иона тербия, расщепленные взаимодействием с ионом меди. Следует отметить, что для наглядности ширина линий задавалась одинаковой для разных переходов и при разных температурах. В реальной ситуации спектры от иона тербия наблюдаются только при низких температурах (обычно при $T = 4.2$ К) из-за большой скорости спин-решёточной релаксации. Так как спектр от тербия, расщеплённый взаимодействием с ионом меди, обусловлен переходами в возбуждённых состояниях, при $kT < \Delta$ интенсивность спектра от тербия уменьшается (высокополевая часть – рис. 5б). Это приводит к тому, что при низкой температуре наблюдается практически один сигнал с H_2 . Причём положение этого сигнала зависит от взаимного знака параметров Δ и J . В рассматриваемом случае $\Delta > 0$, поэтому при ферромагнитном взаимодействии ($J < 0$) сигнал наблюдается в более низких полях (рис. 5б), а при антиферромагнитном ($J > 0$) взаимодействии в более высоких полях.

На рис. 6 представлены спектры поликристаллического образца двухъядерного фрагмента Cu–Tb при двух температурах. В спектре ЭПР поликристалла наиболее интенсивным является сигнал, соответствующий перпендикулярной ориентации, что позволяет по положению этого сигнала в спектре определить величину и знак обменного взаимодействия между ионами меди и тер-

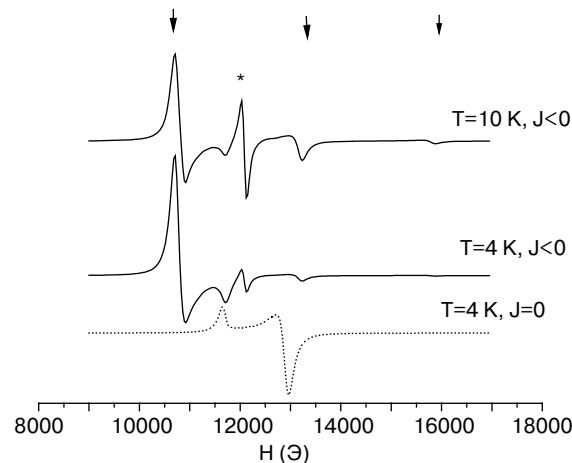


Рис. 6. Спектры, рассчитанные для поликристаллического образца двухъядерного фрагмента Cu–Tb в Q-диапазоне. Стрелочками показаны сигналы, на которые расщепляется при наличии спин-спинового взаимодействия сигнал иона меди, соответствующий переходу между уровнями энергии при ориентации магнитного поля вдоль X , Y . Звёздочкой отмечен сигнал, соответствующий иону тербия. Спектры записаны при разных увеличениях интенсивности.

бия. На рис. 6 показаны спектры фрагмента Cu–Tb для Q-диапазона, когда области магнитных полей, соответствующие спектрам ионов тербия и меди, перекрываются. Однако при $T = 4.2$ К интенсивность спектра от тербия существенно уменьшается, что позволяет следить за изменением сигнала от меди.

Анализ модельных спектров ЭПР показал, что спектр ЭПР пятиядерного кластера представляет, в основном, сумму спектров ЭПР от двух двухъядерных фрагментов, образованных крайними ионами меди и ионами тербия Cu(2)–Tb, а также спектром от центрального комплекса Cu1, расщеплённого за счёт взаимодействия с двумя ионами тербия Tb–Cu(1)–Tb. Отнесение сигналов в спектре к определённым переходам помогло правильно выбрать параметры обменного взаимодействия для согласования рассчитанных и экспериментальных спектров пятиядерного кластера.

Выводы

Впервые методом ЭПР исследованы обменные взаимодействия между ионом меди и гадолинием и меди с некрамерсовым ионом Tb³⁺. Проанализированы особенности проявления этого взаимодействия в спектрах ЭПР для димерных фрагментов Cu–Gd и Cu–Tb, а также для пятиядерных фрагментов Cu–Tb–Cu–Tb–Cu. Последние результаты представляют особый интерес, так как показана возможность определения знака и величины этого взаимодействия из спектров ЭПР для случая, когда нижними состояниями иона Tb³⁺ являются состояния $|0\rangle$, $|\pm 1\rangle$.

Для исследованного пятиядерного комплекса установлен ферромагнитный характер обменного взаимодействия

между ионами меди и трёхвалентного тербия. Причём достаточно надёжно установлено, что ферромагнитный характер взаимодействия реализуется по двум разным каналам Cu(2)–Tb и Tb–Cu(1), что говорит в пользу гипотезы о независимости характера взаимодействия от геометрии и природы лигандов мостикового фрагмента.

Образцы для исследования синтезированы и представлены М. Андрухом (Факультет химии Университета г. Бухареста, Румыния) и Г. Новицким (Институт химии Академии наук Республики Молдовы).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 04-02-17163) и гранта Президента РФ “Ведущие научной школы” (НШ- 6213.2006.2).

Литература

1. Bencini A., Benelli C., Caneschi A., Dei A., Gatteschi D.: *Inorg. Chem.* **25**, 572 (1986)
2. Benelli C., Gatteschi D., Guillou O., Pardi L.: *Inorg. Chem.* **29**, 1750–1755 (1990)
3. Guillou O., Kahn O., Oushoorn R.L., Boubekur K., Batail P.: *Inorg. Chim. Acta* **198–200**, 119–131 (1992)
4. Wang S.: *Inorg. Chem.* **30**, 2252 (1991); Wang S., Pang Z., Wagner M.J.: *Inorg. Chem.* **31**, 5381 (1992)
5. Kahn O.: *Molecular magnetism*. New York: VCH Publishers 1993. 380 p.
6. Kahn O.: *Adv. Inorg. Chem.* **4**, 179–358 (1996)
7. Chen L., Breeze S.R., Rouse R.J., Wang A., Thompson L.K.: *Inorg. Chem.* **34**, 454 (1995)
8. Miller J.S., Epstein A.J.: *Chem. Eng. News* **73**, 30–42 (1995)
9. Likodimos V., Guskos N., Gamari-Seale H., Koufoudakis A., Wabia M., Typek J., Fuks H.: *Phys. Rev. B* **54**, 12342–12352 (1996)
10. Ramade I., Kahn O., Jeannin Y., Robert F.: *Inorg. Chem.* **36**, 930–936 (1997)
11. Okawa H., Furutachi A., Fenton D.E.: *Coord. Chem. Rev.* **174**, 51–75 (1998)
12. Kahn M.L., Mathoniere C., Kahn O.: *Inorg. Chem.* **38**, 3692–3697 (1999)
13. Kahn M.L., Sutter J.P., Golhen S., Guionneau P., Ouahab L., Kahn O., Chasseau D.: *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 3413 (2000)
14. Piguet C., Edder C., Rigaut S., Bernardinelli G., Bunzli J.-C.G., Hopfgarther G.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 3999–4006 (2000)
15. Sutter J.P., Kahn M.L.: *Polyhedron* **20**, 1593 (2001)
16. Rizzi A.C., Calvo R., Baggio R., Garland M.T., Pena O., Perec M.: *Inorg. Chem.* **41**, 5609–5614 (2002)
17. Sakamoto M., Manseki K., Okawa H.: *Coord. Chem. Rev.* **219–221**, 379–414 (2001)
18. Avecilla F., Platas-Iglesias C., Rodriguez-Cortinas R., Guillemot G., Bunzli J.-C.G., Brondino C.D., Geraldine C.F.G., de Blas A., Rodriguez-Blas T.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 4659–4665 (2002)
19. Benelli C., Gatteschi D.: *Chem. Rev.* **102**, 2369 (2002)
20. Salikhov K.M., Galeev R.T., Voronkova V.K., Yablokov Yu.V., Legendziewicz J.: *Appl. Magn. Reson.* **14**, 457–472 (1998)
21. Voronkova V.K., Galeev R.G., Shova S., Novitchi G., Turta C.I., Caneschi A., Gatteschi D., Lipkowsky J., Simonov Yu.A.: *Appl. Magn. Reson.* **25**, 227–247 (2003)
22. Абрагам А., Блинн Б.: *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, т. 1. М.: Мир 1970. 651 с.
23. Альтшулер С.А., Козырев Б.М.: *Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп*. М.: Наука 1972. 672 с.
24. Baker J.M.: *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **413**, 515–528 (1987)
25. Bencini A., Gatteschi D.: *Electron paramagnetic resonance of exchange coupled systems*. Berlin, Heidelberg: Springer 1990. 287 p.

ESEEM как метод исследования диполь-дипольных взаимодействий в нитроксильных бирадикалах

Р. Б. Зарипов, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

В данной работе рассмотрены возможности применения ESEEM (electron spin echo envelop modulation – модуляция спада электронного спинового эха) эксперимента для изучения взаимодействий между двумя парамагнитными центрами.

В 2005 году был приобретён и введён в эксплуатацию новый спектрометр ЭПР EleXsys E580, который позволяет проводить исследования в традиционном стационарном и импульсных режимах. Стационарный ЭПР не позволяет получить информацию о слабых спин-спиновых взаимодействиях, таких как диполь-дипольное взаимодействие между двумя парамагнитными центрами на расстоянии более 1 нм. Использование импульсных режимов открывает новые возможности для получения информации, которая недоступна в стационарном режиме: импульсные методы позволяют исследовать слабые спин-спиновые взаимодействия между парамагнитными частицами, находящимися на расстоянии до 5 нм друг от друга. Среди импульсных методов для исследования взаимодействия между парамагнитными центрами наиболее прямым методом является методика PELDOR (pulse electron double resonance – двойной электрон-электронный резонанс) эксперимента. Однако, хорошие потенциальные возможности для исследования сравнительно слабых спин-спиновых взаимодействий имеют эксперименты по изучению модуляции спада сигналов электронного спинового эха, ESEEM эксперименты. Данное исследование направлено на освоение новых методик работы в импульсном режиме, в частности, изучение слабых диполь-дипольных взаимодействий различными протоколами метода ESEEM.

Изучение спин-спиновых взаимодействий представляет интерес, поскольку нередко мы имеем дело с системами, в которых присутствует пара взаимодействующих парамагнитных частиц. Так, например, пара может образоваться в результате внешнего воздействия на систему или же мы можем заранее ввести её в систему в качестве спиновой метки. Спиновые метки широко используются для изучения структуры и динамики полимеров и биологических объектов. Они, как правило, вводятся в макромолекулярные системы для их дальнейшего исследования. Методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) можно изучать подобные системы. При больших расстояниях между парамагнитными центрами вклады от диполь-дипольного взаимодействия маскируются неоднородным уширением линии ЭПР за счёт сверхтонкого

взаимодействия с ядрами, анизотропии g -тензора, неоднородности внешнего магнитного поля. Этого эффекта можно избежать, используя импульсные методы ЭПР, основанные на явлении спинового эха [1]. В импульсном эксперименте вклад от спин-спинового взаимодействия проявляется в виде модуляции, который накладывается на спад эха (ESEEM). Однако следует отметить, что существует ещё один источник модуляций – вклад, обусловленный сверхтонким взаимодействием. Взаимодействие электронных спинов с ядерными спинами также может вызвать периодические осцилляции, накладываемые на спад эха. Но, варьируя протокол импульсного эксперимента, мы можем подавить вклад от сверхтонкого взаимодействия в ESEEM и выявить вклад от слабого диполь-дипольного взаимодействия между двумя парамагнитными центрами.

В данной работе были сравнены возможности двух-импульсного, трёхимпульсного и четырёхимпульсного методов ESEEM. В качестве образца исследовался нитроксильный бирадикал (рис. 1).

Измерения проводились на импульсном спектрометре EleXsys E580 при температуре жидкого азота.

Ширина спектра ЭПР данного нитроксильного бирадикала 7 мТ. Полоса возбуждения СВЧ импульса для EleXsys E580 составляет до 1 мТ. Это означает, что в наших экспериментах одним СВЧ импульсом мы можем возбудить лишь небольшую часть бирадикалов. Предположим, что первым импульсом мы возбудили парамагнитный центр одного выделенного бирадикала. Вероятность того, что вторым импульсом будет возбуждён тот же самый парамагнитный центр, не больше 0.1 при тех параметрах спектра и СВЧ импульсов, которые были приведены выше. Целесообразно разделить все элект-

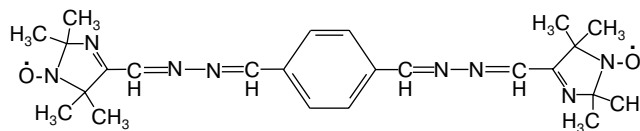


Рис. 1. Химическая структура имидазольного бирадикала.

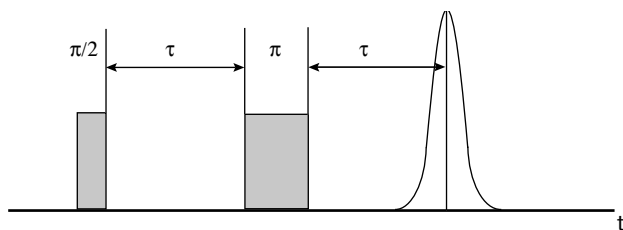


Рис. 2. Схематическое представление двухимпульсного ESEEM эксперимента (длительности импульсов 16 и 32 нс, соответственно).

ронные спины на два типа: А и В. Те спины, которые возбуждаются СВЧ импульсом, будем считать спинами А, а которые не возбуждаются, соответственно, спинами В. Для рассматриваемой ситуации в результате действия, например, двух СВЧ импульсов образуются пары типа А-А (около 10%) и типа А-В (около 90%). Различать эти пары очень важно, потому что диполь-дипольное взаимодействие между спинами А-А и А-В проявляют себя по-разному в спаде сигнала спинового эха. Например, в парах А-А диполь-дипольное взаимодействие может приводить к модуляции спада сигнала эха, в то время как в парах А-В это взаимодействие может и не проявляться.

Рассмотрим последовательно три протокола эксперимента.

а) Двухимпульсная последовательность импульсов $\pi/2$ - τ - π - τ -эхо, где τ изменяется (рис. 2). Эта последовательность известна как первичное или хановское эхо.

В парах А-А диполь-дипольное взаимодействие не будет рефокусироваться вторым, π , импульсом, и поэтому это взаимодействие приведёт к модуляции спада сигнала эха, а в парах А-В диполь-дипольное взаимодействие будет рефокусироваться π -импульсом и не внесёт вклад в модуляцию эха. Поэтому глубина модуляции первичного эха будет пропорциональна количеству А-А пар. Но доля пар типа А-А мала по сравнению с долей пар А-В, следовательно, диполь-дипольные вклады в модуляцию первичного эха будут проявляться очень сла-

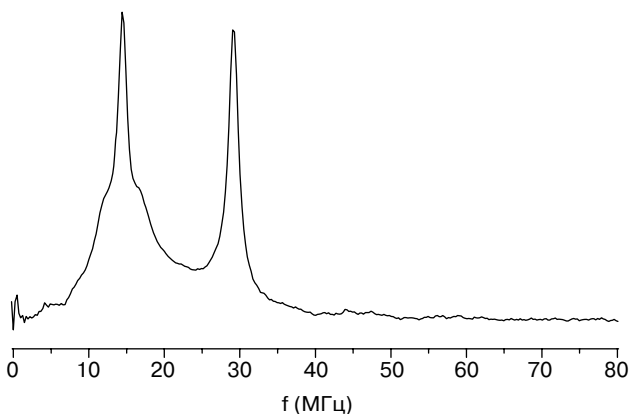


Рис. 3. Фурье спектр двухимпульсного ESEEM. Концентрация нитроксильного бирадикала, растворённого в толуоле, 2 мМ.

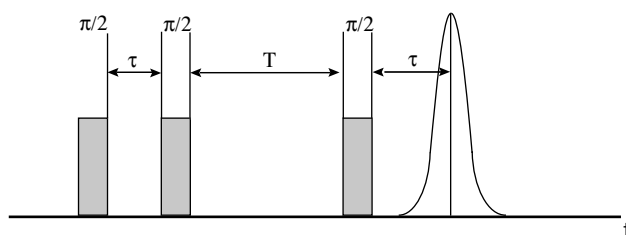


Рис. 4. Эксперимент стимулированного эха (длительности всех импульсов по 16 нс).

бо. Этот факт подтверждается экспериментальными данными (рис. 3).

В спектре присутствуют сигналы с одинарной и удвоенной ларморовскими частотами протонов (14.4 и 28.8 МГц). Диполь-дипольных вкладов в модуляцию сигнала не наблюдаем.

б) Трёхимпульсная последовательность $\pi/2$ - τ - $\pi/2$ - T - $\pi/2$ - τ -эхо, где T фиксировано, а τ изменяется (рис. 4). Этот эксперимент известен как стимулированное спиновое эхо. В этом эксперименте интервал времени T может быть на порядок больше интервала времени τ , и поэтому за время T спин-решёточная релаксация спинов может перевернуть спины электронов. В результате последовательность $\pi/2$ - T - $\pi/2$ можно рассматривать как один составной “импульс”, который изменяет ориентацию спина, что приводит к увеличению числа таких пар, где диполь-дипольное взаимодействие не рефокусируется и даёт вклад в модуляцию сигнала эха [2–4].

В эксперименте первичного эха вклад в модуляцию вносили только А-А пары. В данном эксперименте, наряду с парами А-А, вклад в модуляцию также будут вносить и А-В пары. Это происходит из-за того, что за время T спин В может перевернуться за счёт спин-решёточной релаксации, что как бы приводит к появлению пары А-А. Таким образом, мы увеличиваем число пар А-А и ожидаем, что вклад диполь-дипольного взаимодействия возрастет.

Из Фурье спектра (рис. 5) видно, что, в отличие от двухимпульсного ESEEM, не наблюдается компонента

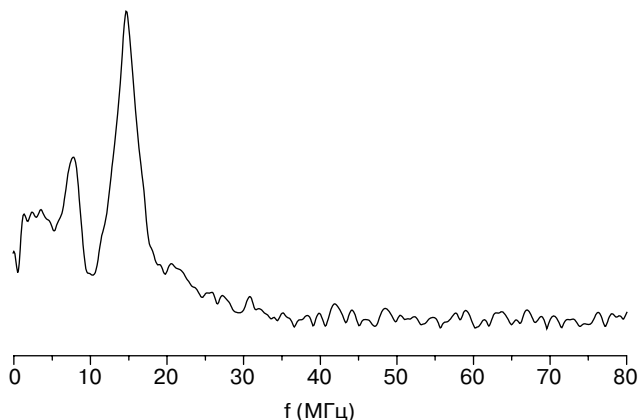


Рис. 5. Фурье спектр трёхимпульсного эксперимента.

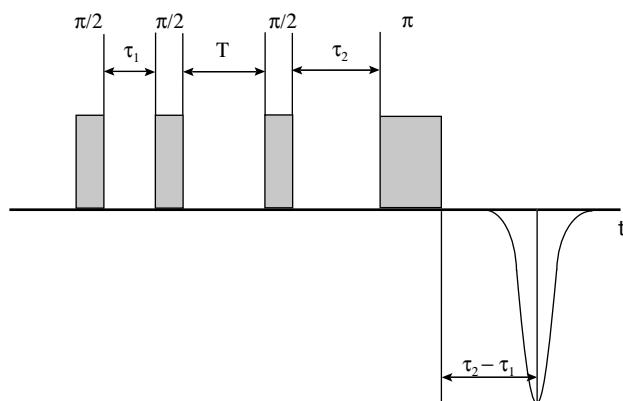


Рис. 6. Четырёхимпульсный ESEEM эксперимент.

при удвоенной частоте от протона, но зато виден вклад от диполь-дипольного взаимодействия на частоте 7.4 МГц. Таким образом, в ходе данного эксперимента нам удаётся зарегистрировать вклад слабого диполь-дипольного взаимодействия в спад сигнала эха.

в) Четырёхимпульсная последовательность импульсов $\pi/2$ - τ_1 - $\pi/2$ - T - $\pi/2$ - τ_2 - π -эхо (рис. 6), где T фиксировано, а τ_1 , τ_2 варьируются ($\tau_2 > \tau_1$ и $T \gg T_m$) [5]. От предыдущего эксперимента она отличается тем, что в момент времени τ_2 подаётся π импульс, который рефокусирует стимулированное эхо в момент времени $\tau_2 - \tau_1$ после последнего импульса.

Согласно рис. 7, вклады от сверхтонкого взаимодействия удаётся подавить, и можем наблюдать только вклад от диполь-дипольного взаимодействия. Частота диполь-дипольного взаимодействия в данном случае 7.14 МГц. Из данного эксперимента следует, что последовательность рефокусированного стимулированного эха наилучшим образом позволяет выделить вклад слабого диполь-дипольного взаимодействия из модуляции спада сигнала эха.

Для того, чтобы вычислить расстояние между двумя неспаренными электронами (рис. 1), полагаем, что $J = 0$, поскольку перекрытия оболочек неспаренных электронов для данной структуры бирадикала не ожидается [2]. Из приведённых на рис. 5 и 7 спектров находим диполь-дипольную частоту ω_{dd} и, используя формулу

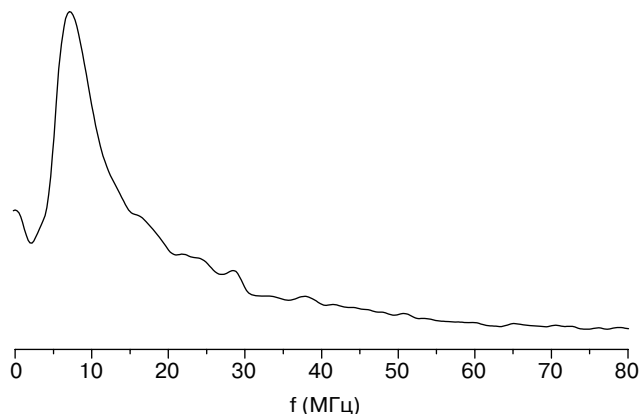


Рис. 7. Фурье спектр последовательности рефокусированного стимулированного эха.

$$\omega_{dd} = \frac{\mu_0 g^2 \beta_e^2}{4\pi\hbar} \frac{1}{r_{AB}^3} (3 \cos^2 \theta_{AB} - 1),$$

находим расстояние между неспаренными электронами, равное 2.1 нм.

Из полученных результатов следует, что последовательность рефокусированного стимулированного эха имеет преимущество в изучении относительно слабых диполь-дипольных взаимодействий между двумя парамагнитными центрами по сравнению с двух- и трёхимпульсными протоколами ESEEM.

Работа выполнялась совместно с Л. В. Куликом и С. А. Дзубой (Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск).

Литература

1. Салихов К.М., Семёнов А.Г., Цветков Ю.Д.: Электронное спиновое эхо и его применение. М.: Наука 1976. 342 с.
2. Kulik L.V., Dzuba S.A., Grigoryev I.A., Tsvetkov Yu.D.: Chem. Phys. Lett. **343**, 315–324 (2001)
3. Жидомиров Г.М., Салихов К.М.: ЖЭТФ **56**, 1933–1939 (1969)
4. Salikhov K.M., Dzuba S.A., Raitsimring A.M.: J. Magn. Reson. **42**, 255–276 (1981)
5. Schweiger A., Jeschke G.: Principles of pulse electron paramagnetic resonance. Oxford: Oxford University Press 2001. 604 p.

Применение времяразрешённого ЭПР и оптической спектроскопии для исследования фотодинамических реакций, возникающих при импульсном лазерном фотолизе

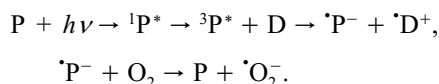
А. А. Обычный, В. С. Июдин, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

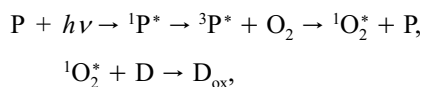
В данной работе исследуются фотодинамические реакции (ФДР), протекающие при лазерном возбуждении фотосенсибилизаторов методом времяразрешённого ЭПР (ВР ЭПР). Показано, что присутствие молекулярного кислорода, растворённого в образце, влияет на спектры ЭПР. Зафиксирован эффект переноса энергии и поляризации электронных спинов между молекулами порфиринов при фотолизе смешанных растворов порфиринов.

Введение

Реакции фотосенсибилизированного окисления органических соединений кислородом известны давно. Однако их молекулярные механизмы остаются предметом дискуссии. По современным представлениям предполагается два типа фотодинамических реакций (ФДР). Первым типом ФДР является фотовосстановление триплетной молекулы фотосенсибилизатора окисляемым соединением, затем фотовосстановленный краситель передаёт электрон молекулярному кислороду [1]:



При ФДР “второго” типа первичным является перенос энергии от триплетной молекулы фотосенсибилизатора на кислород с заселением синглетного состояния (${}^1O_2$), затем синглетный кислород осуществляет окисление соответствующих субстратов [1]:



где P , ${}^1P^*$ и ${}^3P^*$ – молекулы фотосенсибилизатора в основном и возбуждённом синглетном и триплетном состояниях, соответственно, а D – субстрат окисления.

Оба типа реакций широко распространены. Эти реакции являются причиной фотодеструктивного действия порфиринов при их избыточном накоплении в клетках растений и животных [2], определяют фотодинамическую терапию раковых опухолей [2, 3]. Одним из путей исследования механизма ФДР является изучение ${}^1O_2^*$. Было обнаружено, что фотосенсибилизированная генерация ${}^1O_2^*$ в насыщенных воздухом растворах сопровождается фосфоресценцией в ИК диапазоне (1270 нм). Одновременно наблюдалось коротковолновое свечение в видимой области спектра. Интенсивность этого свече-

ния пропорциональна квадрату концентрации ${}^1O_2^*$ [4]. Это свечение обязано димерам возбуждённых молекул кислорода [5]. С открытием явления поляризации электронных спинов в фотохимических реакциях и разработки техники времяразрешённого электронного парамагнитного резонанса (ВР ЭПР) появилась возможность прямой регистрации партнера синглетного кислорода в ФДР, фотосенсибилизатора [6].

В настоящей работе методами ВР ЭПР и люминесценции исследовались фотовозбуждённые порфирины и их взаимодействие с кислородом.

Методика и техника эксперимента

Приготовление образцов

Гематопорфирин IX, тетрафенилпорфин цинка, мезопорфирин, тетрафенилпорфин магния, октоэтилпорфин, были поставлены фирмой Aldrich и дальнейшей очистке не подвергались. Используемый в качестве растворителя коммерческий толуол и тетрагидрофуран подвергались очистке по стандартным методикам [7, 8]. Для определения содержания растворённого кислорода в образце использовался стабильный радикал ТЕМПО. Методика приготовления образцов с разным содержанием растворённого кислорода в образце описана в работе [9].

Аппаратура

Для исследования фотодинамических реакций, возникающих при импульсном лазерном фотолизе были применены методы ЭПР спектроскопии (ВР ЭПР и ЭПР в стационарном режиме) и оптической спектроскопии. Исследования поляризации электронных спинов возбуждённых триплетных состояний порфиринов были выполнены на модифицированном спектрометре ЭПР ER 200-E-

SRC фирмы Брукер в X-диапазоне. Описание установки для исследования времяразрешённых спектров ЭПР дано в работе [6]. Количество растворённого кислорода в образцах определялось на спектрометре ЭПР ER 200-E-SRC фирмы Брукер, работающем в стационарном режиме. Эксперименты по исследованию переноса энергии проводились на импульсном спектрометре EleXsys E580. Оптические спектры поглощения тетрафенилпорфирина цинка и мезопорфирина были получены на спектрометре Perkin Elmer Lambda для УФ и видимой области спектра. Спектр синглетного кислорода был зарегистрирован на установке по регистрации люминесценции с использованием ФЭУ 83С.

Результаты и обсуждения

На рис. 1 представлены полученные ВР ЭПР спектры порфиринов (гематопорфирин IX, тетрафенилпорфин цинка, мезопорфирин, тетрафенилпорфин магния) при температуре 140 К. Спектры зарегистрированы при заданном (фиксированном) моменте времени τ ($\tau = 0.28$ мкс) после импульса лазера.

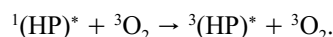
Наблюдается сильная зависимость этих спектров от типа центрального атома порфиринового кольца и от заместителей макроцикла.

Характерной особенностью спектров ЭПР триплетных состояний порфиринов является сильная зависимость от температуры и количества растворённого кислорода в образце.

На рис. 2 показано влияние температуры на поляризацию электронных спинов молекул порфиринов в пределах от 140 до 300 К. Как видно из рисунка, при увеличении температуры происходит изменение спектра. Мы это связываем со спин-решёточной релаксацией.

В качестве примера влияния растворённого кислорода в образце на форму спектра ЭПР на рис. 3 показаны спектры гематопорфирина IX. Как видно из рисунка, наблюдается изменение интенсивности и формы линий спектра ЭПР гематопорфирина IX в зависимости от количества растворённого кислорода в системе [9].

Увеличение интегральной интенсивности поляризации электронных спинов триплетных состояний гематопорфирина IX с содержанием растворённого кислорода до 0.005 мМ в образце, по сравнению с откаченным образцом гематопорфирина IX, по-видимому, связано с явлением катализа интеркомбинационной конверсии (см. рис. 4, область малых концентраций кислорода):



При дальнейшем увеличении содержания растворённого кислорода в образце наблюдается уменьшение интегральной поляризации (см. рис. 4). По нашему мнению это связано с переносом энергии с возбуждённой молекулы порфирина на триплетный кислород, т.е. тушением триплетных порфиринов по механизму:

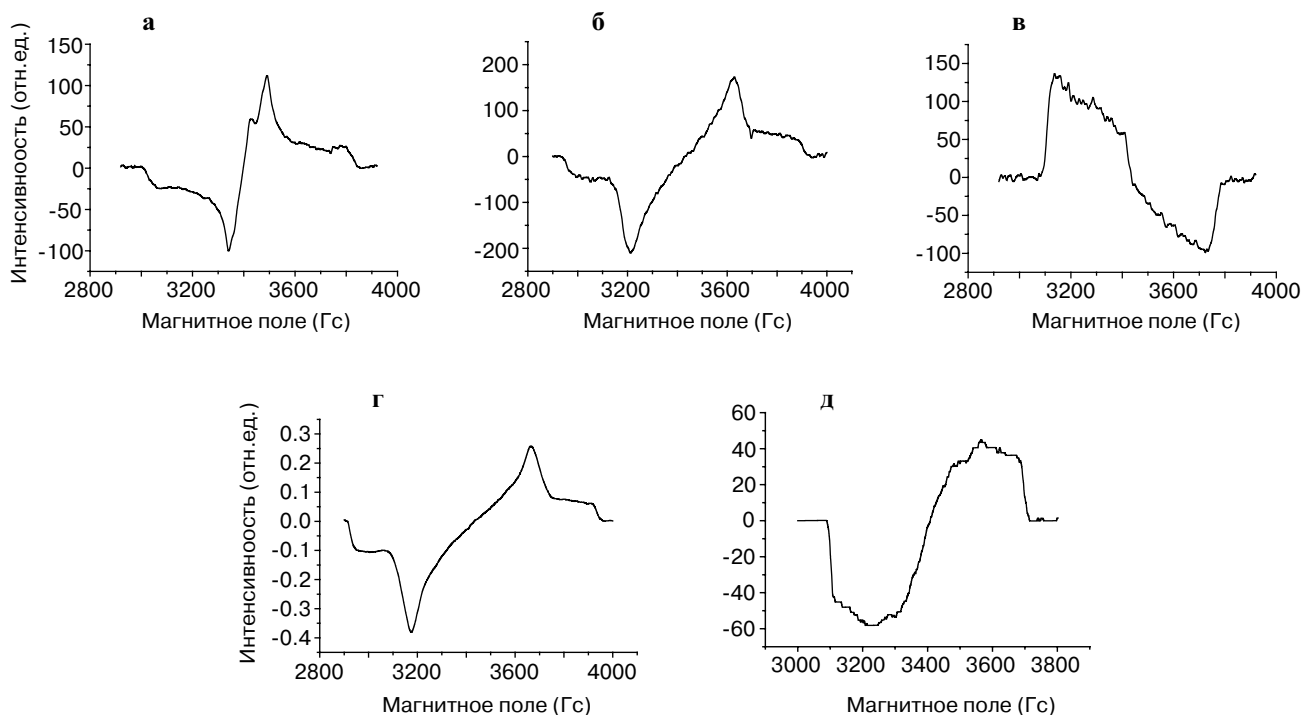
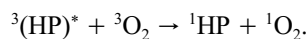


Рис. 1. Спектры ВР ЭПР молекул порфиринов при температуре 140 К, $\tau = 0.28$ мкс. Окно интегрирования $t_0 = 0.2$ мкс. **а** Мезопорфирин; **б** гематопорфирин IX; **в** тетрафенилпорфин цинка; **г** октоэтилпорфин; **д** тетрафенилпорфин магния.

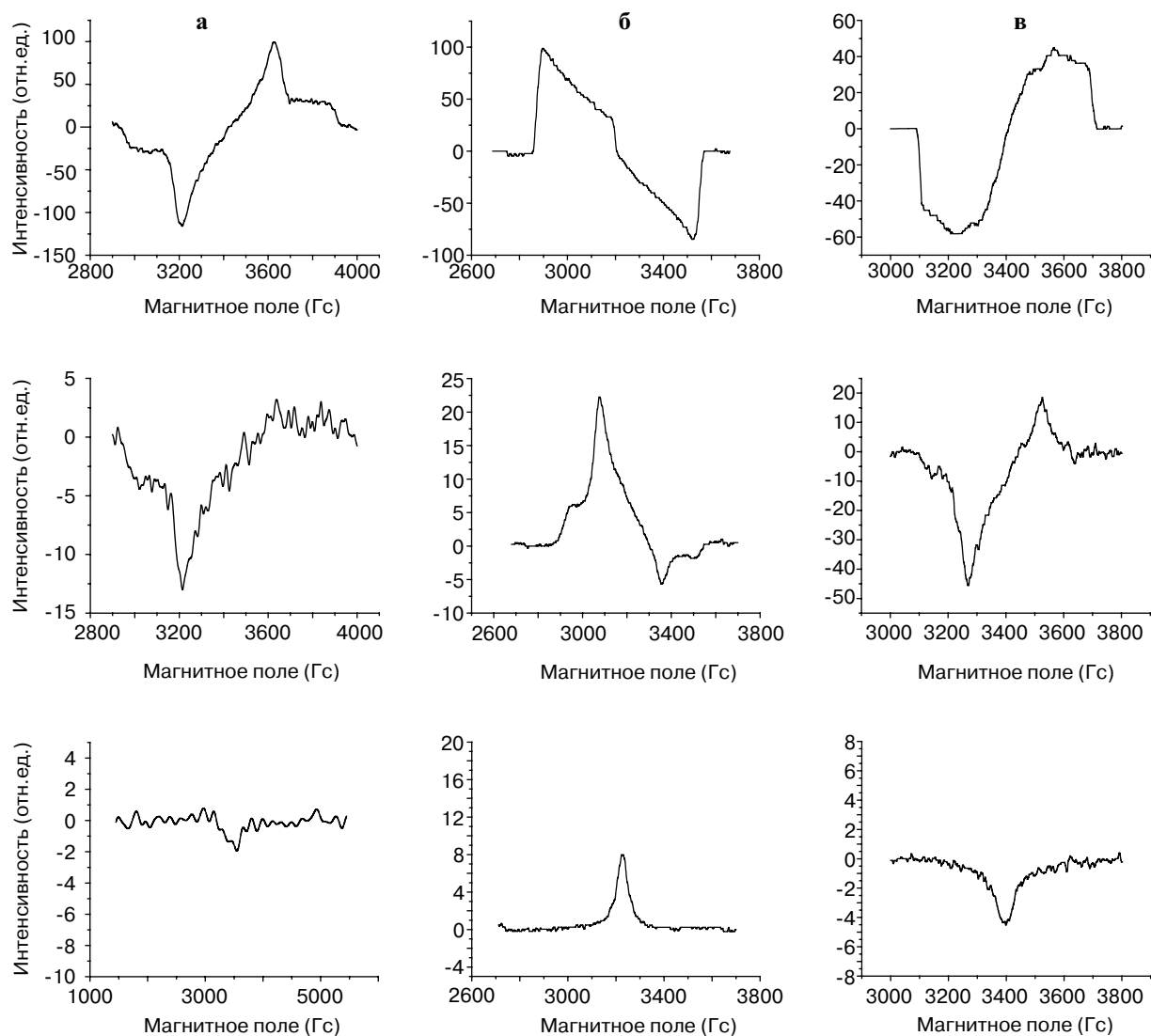


Рис. 2. Спектры ВР ЭПР молекул порфиринов при температуре 140 (верхний ряд), 200 (в центре) и 300 К (нижний ряд): **а** гематопорфирин IX; **б** тетрафенилпорфирин цинка; **в** тетрафенилпорфирин магния.

Этот процесс аналогичен триплет-триплетной аннигиляции. Прямым доказательством этого процесса является обнаруженная нами люминесценция $^1\text{O}_2$ (см. рис. 5).

С точки зрения увеличения эффективности ФДР весьма интересными являются системы с двумя сенсбилизаторами. В этом случае появляется дополнительная степень свободы – перенос энергии между сенсбилизато-

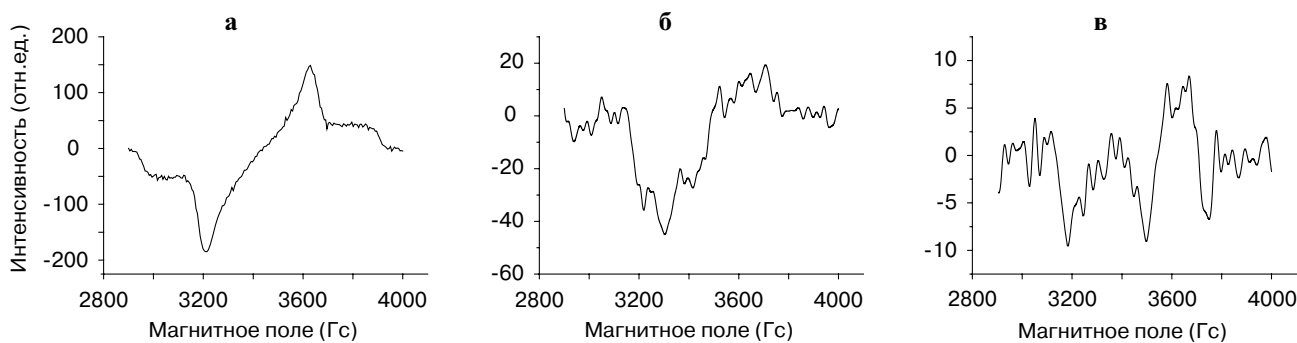


Рис. 3. Спектры ВР ЭПР молекулы гематопорфирина IX при разном содержании растворённого кислорода: **а** 0 мМ; **б** 0.0062 мМ; **в** 0.015 мМ.

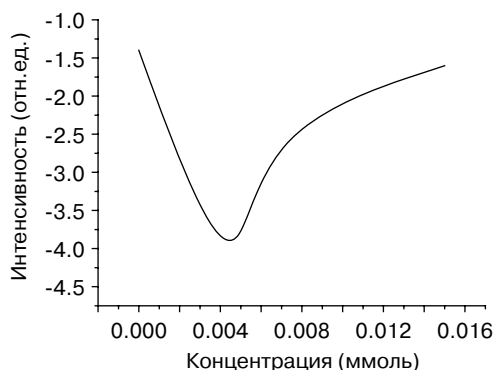


Рис. 4. Интегральная интенсивность поляризации электронных спинов триплетных состояний гематопорфирина IX в зависимости от концентрации растворённого кислорода в образце.

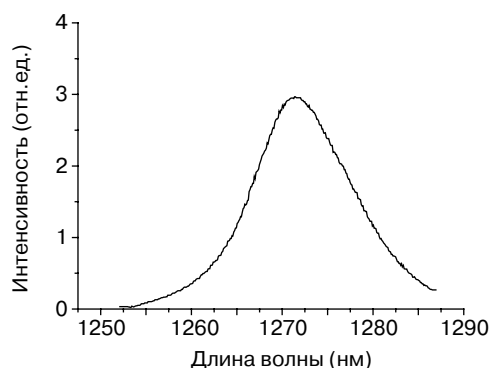


Рис. 5. Спектр люминесценции синглетного кислорода в системе гематопорфирин IX – толуол ($\lambda_{\text{max}} = 1272$ nm).

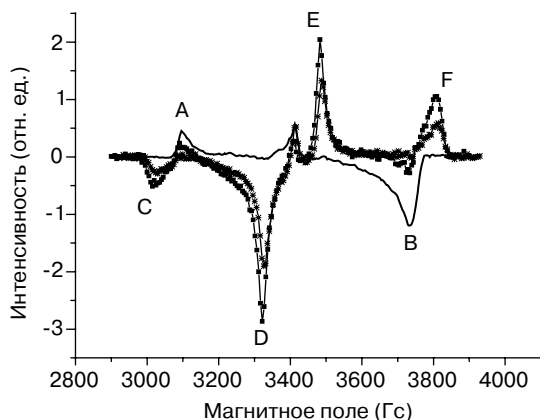


Рис. 6. Спектр ВР ЭПР смеси тетрафенилпорфин цинка и мезопорфирина: А, В – линии, относящиеся к ZnTPP (сплошная линия); С, D, E, F – линии, относящиеся к H_2TPP (■) и $\text{H}_2\text{TPP} + \text{ZnTPP}$ 1:1 (*).

рами. Процесс межмолекулярного переноса энергии нами был зарегистрирован для целого ряда бинарных систем: фуллерен-ZnTPP, ZnTPP-гематопорфирин IX, ZnTPP- H_2TPP и т.д. В качестве примера на рис. 6 приведены спектры поляризации электронных спинов триплетных состояний ZnTPP, H_2TPP и смеси ZnTPP + H_2TPP = 1:1. Из рисунка видно, что при проведении реакции лазерного фотолиза смеси порфиринов ZnTPP+ H_2TPP с соотношением 1:1 интенсивность сигнала от H_2TPP значительно превосходит интенсивность сигнала от молекул ZnTPP, что свидетельствует о переносе возбуждения с ZnTPP на H_2TPP . Энергия возбуждения триплетного состояния молекулы ZnTPP равна 13000 см^{-1} , а энергия возбуждения триплетного состояния молекулы H_2TPP равна 11640 см^{-1} , что указывает на возможность процесса переноса энергии.

Выводы

Показано влияние кислорода на поляризацию электронных спинов триплетных порфиринов, которые могут служить сенситизаторами ФДР. Показано, что в изученных системах действительно образуется синглетный кислород. В системах с двумя сенситизаторами ФДР методом ВР ЭПР обнаружен перенос энергии между сенситизаторами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 04-03-97514) и фонда НИОКР РТ (№ 06-6.3-69/2006).

Литература

1. Фут К.: Свободные радикалы в биологии, т. 2. М.: Мир 1979. 150 с.
2. Kennedy J.C., Poitter R.H.: J. Photochem. Photobiol. Bull. Biol. **14**, 275–292 (1992)
3. Миронов А.Ф.: Итоги науки и техники. Современные проблемы лазерной физики, т. 3, с. 5. М.: ВИНТИ 1990.
4. Красновский А.А. (мл.): Биофизика **21**, № 4, 748–749 (1976)
5. Krasnovsky A.A., Neverov K.V.: Chem. Phys. Lett. **167**, no. 6, 591–597 (1990)
6. Gnezdilov O.I., Mambetov A.E., Obynochny A.A., Salikhov K.M.: Appl. Magn. Reson. **25**, 157–198 (2003)
7. Riddick J.A., Bunger W.B.: Techniques of chemistry, vol. 2. New York: John Wiley & Sons 1971. 500 p.
8. Vogel A.J.: A textbook of practical organic chemistry. New York: John Wiley & Sons 1966. 1188 p.
9. Обыночный А.А., Июдин В.С., Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2005. Ежегодник, с. 77–80. Казань: ФизтехПресс 2006.

Численные расчёты неравновесной поляризации электронных спинов триплетных экситонов, вызванной их взаимной аннигиляцией

М. Х. Бренерман, А. Е. Мамбетов, К. М. Салихов

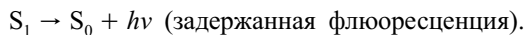
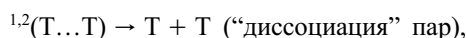
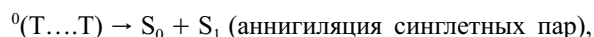
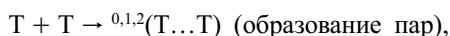
Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Проведены первые численные расчёты спиновой поляризации триплетных экситонов в молекулярных кристаллах, вызванной взаимной аннигиляцией экситонов. Использована теория ударного оператора, позволяющая последовательно учесть диффузионное движение экситонов в кристалле, случайным образом модулирующее взаимодействие между экситонами.

Введение

Недавно было показано [1, 2], что взаимная аннигиляция триплетных возбуждённых состояний может служить источником неравновесной поляризации электронных спинов. Вкратце идея состоит в следующем.

Когда сталкиваются два возбуждённых триплетных состояния (например, молекулы в жидкости или газе, или, в нашем случае, экситоны в молекулярном кристалле), суммарный спин такой пары может быть равным 0, 1 или 2. Пара с суммарным спином ноль может аннигилировать – один из партнёров возвращается в основное состояние S_0 , а второй переходит в состояние S_1 , из которого также возвращается в основное состояние, излучая при этом квант света на частоте флюоресценции. Последний процесс называется задержанной флюоресценцией. Эти процессы показаны на следующей схеме:



Если положить начальную матрицу плотности ансамбля триплетов единичной, т.е. взять полностью неполяризованный ансамбль, то сразу после первого столкновения матрица плотности пар, переживших аннигиляцию, имеет вид [1]:

$$\rho(0) = \frac{1}{9}(P_1 + P_2) \equiv \frac{1}{9}\left(\frac{2}{3}S^2 - \frac{1}{12}S^4\right),$$

$$S = S_A + S_B.$$

Здесь P_1 и P_2 – проекционные операторы на подпространства пары спинов А и В с суммарным спином 1 и 2, соответственно. Ансамбль пар в состоянии $\rho(0)$ является ансамблем спин-коррелированных триплетов [1]. На-

пример, среднее скалярное произведение векторов спинов партнёров не равно нулю: $\langle(S_A S_B)\rangle = \text{Tr}(\rho(0)(S_A S_B)) = 2/9$. Также не равны нулю средние значения произведения соответствующих компонент квадрупольных моментов партнёров. В дальнейшем спиновая динамика в таких спин-коррелированных парах преобразует ненулевые значения корреляторов компонент дипольных и квадрупольных моментов партнёров пар в ненулевые значения компонент дипольных и квадрупольных моментов отдельных триплетов. Оценки по временной теории возмущений дали ненулевые значения компонент квадрупольного момента во 2-м порядке, а дипольного – в 4-м.

Проявление этого механизма поляризации было впервые наблюждено экспериментально во временной зависимости спектров ЭПР триплетных экситонов в молекулярных кристаллах А/TCNB и Ph/TCNQ [3, 4], соответствующие молекулы приведены на рис. 1.

В данной работе развивается количественная теория этого механизма поляризации для триплетных экситонов в молекулярных кристаллах, которая последовательным образом учитывает диффузионное движение экситонов в кристалле, случайным образом модулирующее взаимодействие между экситонами.

Для построения соответствующей математической модели в данной работе нами была использована теория бимолекулярных квазирезонансных реакций, предложенная в [5, 6] и развитая в [7]. На основе идей, изложенных в указанных работах, нами было сформулировано кинетическое уравнение для одночастичной спиновой матри-

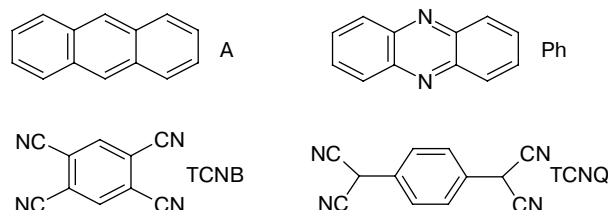


Рис. 1. Структура молекул кристаллов А/TCNB и Ph/TCNQ.

цы плотности триплетных экситонов с учётом бимолекулярного процесса взаимной аннигиляции триплетных экситонов и получено дифференциальное уравнение для расчёта оператора столкновений. Поскольку аналитически это уравнение в общем случае решить не удаётся, мы составили и отладили программу для численных расчётов оператора столкновений и численно решили кинетические уравнения.

Модель

В этой работе мы будем предполагать, что концентрация триплетных экситонов достаточно низкая, чтобы можно было пренебречь вероятностью одновременной встречи трёх и более экситонов. Критерий применимости этого приближения будет приведён ниже. Спин-гамильтониан одного триплетного экситона во внешнем постоянном магнитном поле $\mathbf{H}_0$ в базисе собственных осей тензора расщепления в нулевом поле имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_T = \beta \mathbf{H}_0 \hat{\mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}} + D \left(\hat{S}_z^2 - \frac{2}{3} \hat{I} \right) + E (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2). \quad (1)$$

Собственную эволюцию спина такого “изолированного” экситона с учётом процессов релаксации и фосфоресценции будем моделировать уравнением:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_T(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_T, \hat{\rho}_T(t)] - (\hat{R}_{\text{rel}} + \hat{\tau}^{-1}) \hat{\rho}_T(t). \quad (2)$$

Формальное выражение $(\hat{R}_{\text{rel}} + \hat{\tau}^{-1})\rho(t)$, феноменологически описывающее процессы релаксации по триплетным состояниям и гибель триплетных экситонов (фосфоресценция, возвращение в основное состояние), означает:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} &= -K_1(\rho_{11} - p_1 \rho_{22}) - K_3(\rho_{11} - p_3 \rho_{33}) - \frac{\rho_{11}}{\tau_1}, \\ \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} &= -K_1(p_1 \rho_{22} - \rho_{11}) - K_2(\rho_{22} - p_2 \rho_{33}) - \frac{\rho_{22}}{\tau_2}, \\ \frac{\partial \rho_{33}}{\partial t} &= -K_2(p_2 \rho_{33} - \rho_{22}) - K_3(p_3 \rho_{33} - \rho_{11}) - \frac{\rho_{33}}{\tau_3}, \\ \frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} &= -G_{12} \rho_{12} + G \rho_{23}, \\ \frac{\partial \rho_{23}}{\partial t} &= -G_{23} \rho_{23} + G \rho_{12}, \\ \frac{\partial \rho_{13}}{\partial t} &= -G_{13} \rho_{13} \end{aligned} \quad (3)$$

(и аналогичные для $\partial \rho_{21}/\partial t, \partial \rho_{32}/\partial t, \partial \rho_{31}/\partial t$), где

$$p_1 = \exp\left(\frac{E_2^0 - E_1^0}{kT}\right), \quad p_2 = \exp\left(\frac{E_3^0 - E_2^0}{kT}\right),$$

$$p_3 = \exp\left(\frac{E_3^0 - E_1^0}{kT}\right),$$

а E_1^0, E_2^0, E_3^0 – собственные значения гамильтониана (1), параметры G_{12}, G_{23}, G_{13} характеризуют скорости фазовой релаксации, а параметр G характеризует скорость переноса когерентности.

Для пары взаимодействующих триплетных экситонов А и В выберем спин-гамильтониан вида:

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{H}}_T^A + \hat{\mathcal{H}}_T^B + \hbar J(\mathbf{r}) \hat{S}^A \hat{S}^B, \quad (4)$$

где $J(\mathbf{r})$ – обменный интеграл между парой взаимодействующих экситонов, причём

$$J(\mathbf{r}) = J(r) = J_0 \exp[-\kappa_V(r - r_0)]. \quad (5)$$

Здесь r_0 – радиус предельного сближения экситонов, κ_V – константа. Мы пренебрегаем диполь-дипольным взаимодействием и оставляем только гейзенберговское обменное взаимодействие.

Относительное движение партнеров в паре случайным образом модулирует взаимодействие спинов. В этой работе мы полагаем, что изменение спиновых состояний взаимодействующих экситонов не влияет на кинематику их относительного движения. Поэтому в расчётах расстояние r между экситонами пары будем считать внешним классическим параметром для квантово-механической задачи об эволюции ансамбля пар экситонов. Относительное движение экситонов в паре полагаем диффузионным и описываем с помощью модели непрерывной диффузии.

Ансамбль всех пар экситонов разбиваем на подансамбли с заданным расстоянием r между партнёрами пары А и В. Уравнение для парциальной матрицы плотности подансамбля пар с заданным $r, \rho(r, t)$, можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}(r, t)}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(r), \hat{\rho}(r, t)] - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{R}_{\text{rel}}^B + \hat{\tau}_A^{-1} + \hat{\tau}_B^{-1}) \hat{\rho}(r, t) \\ &\quad - \frac{K_S(r)}{2} [\hat{P}_S, \hat{\rho}(r, t)]^{\text{Анти}} + D \Delta_r \hat{\rho}(r, t), \end{aligned} \quad (6)$$

где D – коэффициент взаимной диффузии А и В, Δ_r – радиальная часть лапласиана.

$$\hat{P}_S = |S\rangle\langle S| = 1 - \frac{2}{3} \hat{S}^2 + \frac{1}{12} \hat{S}^4$$

есть проектор на подпространство пары с нулевым суммарным спином, $\hat{S} = \hat{S}_A + \hat{S}_B$ – оператор суммарного спина пары, $K_S(r)$ – феноменологически введённая константа скорости триплет-триплетной аннигиляции:

$$K_S(\mathbf{r}) = K_S(r) = K_0 \exp[-\kappa_K(r - r_0)],$$

где κ_k – константа.

Следуя идеям, развитым в работах [5–7], кинетические уравнения для одночастичных спиновых матриц плотности σ_A и σ_B подансамблей А и В с учётом парных столкновений можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}^A(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^A, \hat{\sigma}^A(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{\tau}_A^{-1}) \hat{\sigma}^A(t) \\ &\quad + C_B \text{Tr}_B \left[\hat{P} \hat{\sigma}^A(t) \otimes \hat{\sigma}^B(t) \right], \\ \frac{d\hat{\sigma}^B(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^B, \hat{\sigma}^B(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^B + \hat{\tau}_B^{-1}) \hat{\sigma}^B(t) \\ &\quad + C_A \text{Tr}_A \left[\hat{P} \hat{\sigma}^A(t) \otimes \hat{\sigma}^B(t) \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Если в системе имеются экситоны только одного типа, то в (7) заменяем В на А. При этом кинетические уравнения (7) становятся идентичными, так что получаем одно кинетическое уравнение.

Столкновительный член в (7) записан из следующих соображений. Из статистической механики хорошо известно, что изменение одночастичной спиновой матрицы плотности σ можно выразить через парную матрицу плотности ρ_2 . В рассматриваемой задаче для одночастичной матрицы плотности, например, частицы А с учётом ее парного взаимодействия с частицами сорта В, $V_{AB}(\mathbf{r})$, а также процесса гибели синглетного состояния пары из-за взаимной аннигиляции имеем следующее уравнение движения:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}^A(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^A, \hat{\sigma}^A(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{\tau}_A^{-1}) \hat{\sigma}^A(t) \\ &\quad - \frac{1}{V} \text{Tr}_B \sum_{k=1}^{N_B} \int \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_{AB}(\mathbf{r}_k), \hat{\rho}_2(\mathbf{r}_k, t)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_S(\mathbf{r}_k)}{2} [\hat{P}_S, \hat{\rho}_2(\mathbf{r}_k, t)]^{\text{Анти}} \right) d\mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (8)$$

$\mathbf{r}_k$ – расстояние от частицы А до k -ой частицы сорта В. Интегрирование ведётся по всем возможным положениям частицы В относительно частицы А, суммирование проводится по всем частицам сорта В, а Tr_B означает свёртку по спиновым состояниям частиц сорта В. После перехода к термодинамическому пределу $V, N_B \rightarrow \infty$ так, что $N_B/V \rightarrow C_B$, с учётом того, что все частицы сорта В в среднем дают одинаковый вклад в столкновениях с частицами А, имеем:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}^A(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^A, \hat{\sigma}^A(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{\tau}_A^{-1}) \hat{\sigma}^A(t) \\ &\quad - C_B \text{Tr}_B \int \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{V}_{AB}(\mathbf{r}), \hat{\rho}_2(\mathbf{r}, t)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_S(\mathbf{r})}{2} [\hat{P}_S, \hat{\rho}_2(\mathbf{r}, t)]^{\text{Анти}} \right) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (9)$$

В общем случае изменение двухчастичной матрицы плотности “зацепляется” за трёхчастичную матрицу плотности. Но в приближении парных столкновений вкладом тройных столкновений мы пренебрегаем. Поэтому в уравнении (9) в качестве двухчастичной матрицы плотности $\rho_2(r, t)$ можно использовать матрицу плотности $\rho(r, t)$ усреднённой изолированной пары, найденную из решения (6). Для получения кинетических уравнений, в уравнении (9) парную матрицу плотности выражаем через одночастичные, и с этой целью решение (6) ищем в виде (см. [8]):

$$\hat{\rho}(r, t) \approx \hat{G}(r, t) \hat{\sigma}^A(t) \otimes \hat{\sigma}^B(t). \quad (10)$$

Подставляя (10) в (6) и учитывая, что в (6) взаимодействие выделенной пары учтено в явном виде, левую часть (6) преобразуем следующим образом. В выражении

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}(r, t)}{dt} &= \frac{d\hat{G}(r, t)}{dt} \hat{\sigma}^A \otimes \hat{\sigma}^B + \hat{G}(r, t) \frac{d\hat{\sigma}^A}{dt} \otimes \hat{\sigma}^B \\ &\quad + \hat{G}(r, t) \hat{\sigma}^A \otimes \frac{d\hat{\sigma}^B}{dt} \end{aligned}$$

в левой части (6) используем приближение:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\sigma}^A(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^A, \hat{\sigma}^A(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{\tau}_A^{-1}) \hat{\sigma}^A(t), \\ \frac{d\hat{\sigma}^B(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}}_T^B, \hat{\sigma}^B(t) \right] - (\hat{R}_{\text{rel}}^B + \hat{\tau}_B^{-1}) \hat{\sigma}^B(t). \end{aligned}$$

Последнее приближение означает, что мы пренебрегаем изменением одночастичной матрицы плотности за счёт парных столкновений на временах столкновения, $\tau_{\text{столкн}}$, так как парные столкновения изменяют одночастичную матрицу на временах “свободного пробега” между парными столкновениями. В результате, из (6) получаем уравнение для $G(r, t)$ в представлении Лиувилля:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{G}(r, t)}{\partial t} &= D\Delta_r \hat{G}(r, t) + (\hat{W}(r) + \hat{F}(r)) \hat{G}(r, t) \\ &\quad + [\hat{Q}_0, \hat{G}(r, t)], \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{W}(r) &= iJ(r) [(\hat{S}^A \hat{S}^B)^{\text{tr}} \otimes \hat{I} - \hat{I} \otimes (\hat{S}^A \hat{S}^B)], \\ \hat{F}(r) &= -\frac{K_S(r)}{2} [\hat{P}_S^{\text{tr}} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{P}_S], \\ \hat{Q}_0 &= \frac{i}{\hbar} [(\hat{\mathcal{H}}_T^A + \hat{\mathcal{H}}_T^B)^{\text{tr}} \otimes \hat{I} - \hat{I} \otimes (\hat{\mathcal{H}}_T^A + \hat{\mathcal{H}}_T^B)] \\ &\quad - (\hat{R}_{\text{rel}}^A + \hat{\tau}_A^{-1} + \hat{R}_{\text{rel}}^B + \hat{\tau}_B^{-1}). \end{aligned}$$

Здесь все операторы (с одной шляпкой) действуют в гильбертовом пространстве пары спинов, I – единичный оператор в нём же. В стационарном режиме, на временах $t \gg \tau_{\text{столкн.}}$, $G(r, t)$ удовлетворяет уравнению:

$$D\Delta_r \hat{G}(r) + (\hat{W}(r) + \hat{F}(r))\hat{G}(r) + [\hat{Q}_0, \hat{G}(r)] = 0. \quad (12)$$

Сформулируем граничные условия для $G(r)$. При удалении партнёров пары друг от друга, корреляция между их спиновыми состояниями должна ослабевать [8]. Отсюда имеем первое граничное условие:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \hat{G}(r) = \hat{I}.$$

Принимая во внимание, что на радиусе наибольшего сближения кинематический поток взаимной диффузии экситонов равен нулю, имеем второе граничное условие:

$$\nabla_r \hat{G}(r = r_0) = \hat{0}.$$

Нестационарное уравнение (11) следует решать при начальном условии $G(r, 0) = 1$. Граничные условия те же, что и для стационарной задачи.

Супероператор столкновений $\hat{P}$ (ударный оператор) описывает изменение парной матрицы плотности в областях взаимодействия и, согласно уравнениям (9) и (10), определяется выражением:

$$\hat{P} = \int (\hat{W}(r) + \hat{F}(r))\hat{G}(r) dr. \quad (13)$$

P по сути есть матрица рассеяния экситонов. Если переписать уравнения (7) как уравнения на полную систему спиновых наблюдаемых – всех дипольных и квадрупольных моментов триплетов, то получится замкнутая система уравнений с постоянными коэффициентами. Коэффициенты, полученные из элементов P – константы скорости соответствующих бимолекулярных процессов. Эффективные радиусы R_{eff} этих процессов вычисляем, считая константы скорости $K = 4\pi D C R_{\text{eff}}$, аналогично работе [9]. Теперь можно записать условие применимости бимолекулярного приближения: $(4\pi/3)\max(R_{\text{max}})^3 C \ll 1$, где C – концентрация триплетных экситонов.

Результаты расчётов

Нами была составлена и отлажена программа для пакета MatLAB, решающая матричную краевую задачу (12) конечно-разностным методом, а также сформулировано доказательство сходимости решения разностной схемы к решению дифференциального уравнения (12). Решение разностной схемы подставлялось в формулу для ударного оператора (13), интеграл в (13) вычислялся по

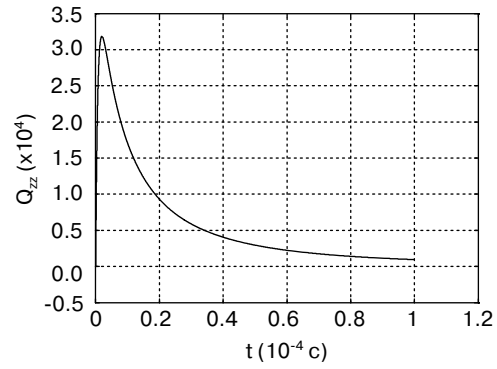


Рис. 2. Зависимость Q_{zz} от времени с учётом взаимной аннигиляции экситонов, которая была рассчитана при следующих параметрах: $T = 300$ К, коэффициент взаимной диффузии экситонов $D = 10^{-6}$ см²/с, параметры тензора расщепления в нулевом поле $D_z = 400$ Гс, $E_{xy} = 0$ Гс, $B_0 = 3000$ Гс, параллельно собственной оси Z D -тензора, $r_0 = 0.3$ нм. $\kappa_V = 2 \cdot 10^7$ см⁻¹, $\kappa_K = 10^8$ см⁻¹, $K_1 = K_2 = 10^5$ с⁻¹, $K_3 = 0$ с⁻¹, $G_{12} = G_{23} = 5 \cdot 10^5$ с⁻¹, $G_{13} = G = 0$ с⁻¹, $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = 0.01$ с, g -тензор взят изотропным, равным g -фактору свободного электрона, $J_0 = 10^{12}$ рад/с, $K_0 = 1.7 \cdot 10^{11}$ рад/с, начальная матрица плотности – единичная. Начальная концентрация триплетов – 10^{18} см⁻³.

формуле Симпсона. Полученная таким образом матрица ударного оператора подставлялась в уравнения (7) временной зависимости одночастичных матриц плотности. Уравнения (7) решались методом Рунге-Кутты 4-го порядка. После чего рассчитывались наблюдаемые: были рассчитаны временные зависимости компонент дипольного и квадрупольного моментов триплетных экситонов для различных наборов параметров.

Временные зависимости компоненты дипольного момента S_z и компоненты квадрупольного момента Q_{zz} были рассчитаны с учётом процесса взаимной аннигиляции экситонов и без его учёта, и полученные результаты приведены на рис. 2–5.

На рис. 2 и 3 асимптотика описывает равновесное значение компоненты квадрупольного момента Q_{zz} . Видно, что результат весьма существенно зависит от учёта

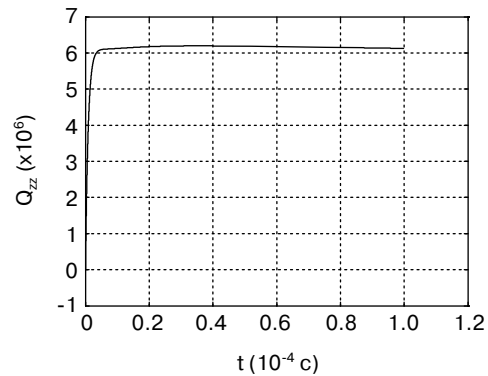


Рис. 3. Зависимость Q_{zz} от времени без учёта взаимной аннигиляции экситонов. Расчёты проведены при тех же значениях параметров, как и на рис. 2, за исключением $K_0 = 0$.

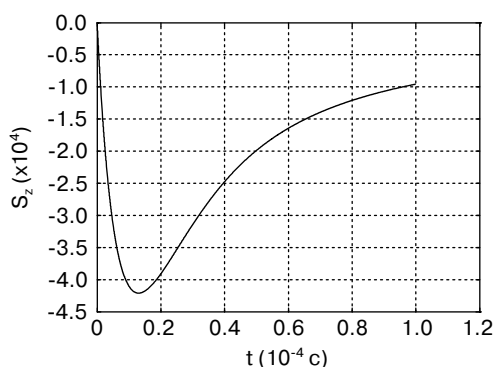


Рис. 4. Зависимость S_z от времени с учётом взаимной аннигиляции экситонов. Расчёты проведены при тех же значениях параметров, как и на рис. 2.

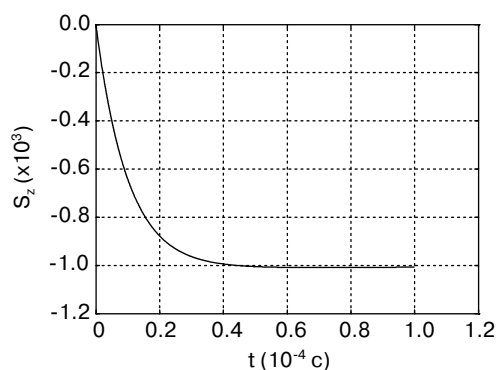


Рис. 5. Зависимость S_z от времени без учёта взаимной аннигиляции экситонов. Расчёты проведены при тех же значениях параметров, как и на рис. 3.

взаимной аннигиляции экситонов. С учётом взаимной аннигиляции $Q_{zz}(t)$ проходит через максимум, причём максимальное значение Q_{zz} примерно на два порядка больше равновесного значения. Максимум проявляется на временах “свободного пробега”, т.е. максимум появляется, когда происходит бимолекулярное столкновение триплетов. Спад квадрупольного момента связан с гибелью триплетов и их спин-решёточной релаксацией. В максимуме неравновесная квадрупольная поляризация на два порядка больше равновесной величины.

На рис. 4 и 5 приведены временные зависимости компоненты дипольного момента S_z с учётом и без учёта взаимной аннигиляции экситонов.

Из рис. 5 видно, что в отсутствие процесса аннигиляции дипольный момент монотонно выходит на стационарное равновесное значение. Дипольный момент, возникающий за счёт взаимной аннигиляции экситонов, имеет направление, противоположное направлению равновесного дипольного момента (ср. рис. 4 и 5). Но по величине неравновесная дипольная поляризация существенно меньше равновесной поляризации.

Выводы

Записаны кинетические уравнения для одночастичной спиновой матрицы плотности триплетных экситонов в молекулярном кристалле в бимолекулярном приближении, учитывающие диффузионное движение экситонов, обменное взаимодействие и взаимную аннигиляцию экситонов.

Создана программа для расчёта кинетических коэффициентов и решения собственно кинетического уравнения. Доказана сходимость выбранного численного разностного метода к решению дифференциального уравнения для ударного оператора.

Для ряда значений магнитно-резонансных и молекулярно-кинетических параметров рассчитана временная зависимость неравновесной поляризации электронных спинов триплетных экситонов, вызванной их взаимной аннигиляцией. Показано, что взаимная аннигиляция экситонов является эффективным механизмом поляризации электронных спинов: возникновения неравновесных дипольных и квадрупольных моментов триплетов.

Эта работа была поддержана грантами РФФИ (№ 06-03-32175) и грантом Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.2).

Литература

1. Salikhov K.M.: Appl. Magn. Reson. **26**, 135–144 (2004)
2. Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2003. Ежегодник, с. 19–21, Казань: ФизтехПресс 2004.
3. Corvaja C., Franco L., Salikhov K.M., Voronkova V.K.: Appl. Magn. Reson. **28**, 181–193 (2005)
4. Воронкова В.К., Салихов К.М.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2003. Ежегодник, с. 30–33, Казань: ФизтехПресс 2004.
5. Салихов К.М.: Кинетика процессов, обусловленных спин-спиновым взаимодействием частиц в магнито-разбавленных системах. Дис. на соиск. учён. степ. д-ра физ.-мат. наук. Казань 1974.
6. Салихов К.М.: Теор. и эксперим. химия **10**, № 3, 310–317 (1974)
7. Doktorov A.B.: Physica A (Amsterdam) **90**, 109–136 (1978)
8. Боголюбов Н.Н.: Избранные труды по статистической физике, с. 343. М.: МГУ 1979.
9. Мамбетов А.Е., Салихов К.М.: ЖЭТФ **128**, № 5, 1013–1024 (2005)

К расчёту спектров ЭПР спин-коррелированных разделённых зарядов в фотосинтетических реакционных центрах

А. Р. Мурсалимов, Ю. В. Садчиков, С. К. Черников, К. М. Салихов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии; лаборатория моделирования физико-химических процессов и систем

Проведены численные расчёты спектров ЭПР спин-коррелированных разделённых зарядов в фотосинтетических реакционных центрах. Впервые влияние неразрешённой сверхтонкой структуры спектров ЭПР учтено последовательным образом с помощью метода Монте-Карло. Для реализации этих расчётов разработаны программные средства, ориентированные для использования на параллельных вычислительных устройствах с определённой памятью. Полученные результаты сравнены с результатами существующих приближённых расчётов с помощью метода конволюции. Проведено сравнение расчётных спектров по методу Монте-Карло с экспериментальными спектрами.

Введение

На ранней стадии ассимиляции солнечной энергии фотосинтетическими системами (растениями, бактериями) происходит разделение зарядов в супрамолекулярном образовании, которое называется реакционным центром (РЦ). Электронно-возбуждённый димер хлорофилла, P , отдаёт электрон первичному акцептору A_0 (например, молекуле хлорофилла в фотосистеме I). Время жизни электрона на этом акцепторе лежит в пикосекундном диапазоне, поэтому в природных системах на этой стадии пару $P^+A_0^-$, как правило, не удаётся наблюдать непосредственно методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Далее электрон перескакивает на второй акцептор A_1 (например, филлохинон в РЦ фотосистемы I). Время жизни электрона в паре $P^+A_1^-$ лежит в микросекундном диапазоне, и на этой стадии процесса идеальными для исследования разделённых зарядов в РЦ становится метод ЭПР [1]. ЭПР разделённых зарядов в РЦ обладает замечательными особенностями, связанными с формированием неравновесной спиновой поляризации (см., например, [2]). Реакция переноса электрона в РЦ является неадиабатической, и в качестве начального состояния пара разделённых зарядов наследует синглетное спиновое состояние возбуждённого димера хлорофилла P^* . Синглетное состояние является ненаблюдаемым для ЭПР, однако в результате спиновой динамики в спин-коррелированных парах формируется неравновесная поляризация электронных спинов и проявляется ЭПР [3]. Одним из замечательных особенностей ЭПР разделённых зарядов является то, что на временах меньше времени декогеренизации электронных спинов, т.е. на временах порядка сотен наносекунд, в спектре ЭПР можно наблюдать при одних значениях индукции внешнего постоянного магнитного поля усиление резонансного поглощения СВЧ поля, а при других значениях индукции поля – эмиссию СВЧ поля. Для того, чтобы из экспериментальных спектров ЭПР извлечь необходимую

информацию о взаимном расположении донора и акцепторов электрона (расстояние между ними, взаимная ориентация и т.д.) и константы скорости переноса электрона, необходимо численными методами симулировать спектры ЭПР разделённых зарядов в РЦ. Наблюдаемый в эксперименте спектр ЭПР является результатом усреднения по всем возможным ориентациям РЦ относительно направления внешнего постоянного магнитного поля B_0 . Кроме этого необходимо учесть проявление сверхтонкого взаимодействия (СТВ) с магнитными ядрами. Обычно это делается двояким образом. Для некоторых выделенных ядер СТВ учитывается явным образом при симуляции спектра. Например, при изучении РЦ в фотосистеме I такими выделенными ядрами являются протоны метильной группы в филлохиноне. Вклад большого количества остальных магнитных ядер кофакторов РЦ в спектр ЭПР учитывается приближённо. Эти ядра дают неразрешённую сверхтонкую структуру спектров ЭПР, которая рассматривается как неоднородное уширение линий ЭПР партнёров пары в РЦ. Предполагается, что эти магнитные ядра создают для электронных спинов локальные магнитные поля $B_{\text{лок}}$, которые складываются с внешним полем. Разным конфигурациям ядерных спинов отвечают разные значения $B_{\text{лок}}$. Локальное поле представляет собой суммарный вклад от многих ядер, причём каждый из них даёт малый вклад $\pm \Delta B(k)$, где k – номер ядра. В соответствии с центральной предельной теоремой теории вероятностей распределение локальных магнитных полей $B_{\text{лок}}$ описывается нормальным распределением

$$\varphi(B_{\text{лок}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{B_{\text{лок}}^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1)$$

где σ^2 – дисперсия локального поля. В РЦ каждый парамагнитный центр характеризуется своей дисперсией локального магнитного поля. Последовательный подход к

расчёту спектра ЭПР в такой ситуации состоит в следующем. Нужно рассчитать спектр для всех возможных значений локального поля для партнеров пары парамагнитных частиц в РП и сложить их с весами в соответствии с распределениями (1). Это можно сделать методом Монте-Карло с помощью генератора случайных чисел, который даёт нормальное распределение, разыгрываются значения локальных полей на партнёрах пары и с этими значениями локальных полей рассчитываются спектры ЭПР, усреднённые по всем ориентациям РЦ, и эти спектры складываются. Однако реализация обозначенной стратегии расчёта спектра ЭПР для разделённых зарядов в РЦ требует значительного времени. Действительно, по нашей оценке, для этого компьютеру требуется выполнить порядка 10^{15} операций. В связи с этим обычно используют приближённый подход: без учёта локальных полей рассчитываются спектры ЭПР каждого партнера пары, далее линии каждого из этих спектров уширяются методом конволюции с помощью соотношений вида

$$I_q(B_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_q^2}} \int I_{sq}(B'_0) \exp\left(-\frac{(B_0 - B'_0)^2}{2\sigma_q^2}\right) dB'_0, \quad (2)$$

где $I_{sq}(B_0)$ – спектры ЭПР разделённых зарядов P^+ ($q = P$) и A^- ($q = A$), рассчитанные без учёта локальных магнитных полей ядер. Спектр пары P^+A^- есть сумма

$$\sum_q I_q(B_0).$$

Как уже отмечалось, в спин-коррелированных парах в РЦ формируется неравновесная спиновая поляризация в результате спиновой динамики. Для поляризации спинов наиболее благоприятной является ситуация, в которой разность зеемановских частот электронов партнеров пары в суммарном внешнем и локальном поле соизмерима с энергией спин-спинового взаимодействия в паре в частотных единицах. Неравновесная поляризация не возникает, если разность зеемановских частот электронов партнёров пары в суммарном внешнем и локальном поле равна нулю или очень велика [3]. В силу такой нелинейной зависимости спиновой поляризации от разности частот, а значит и от значений локальных магнитных полей, учёт неразрешённой сверхтонкой структуры при симуляции спектров ЭПР спин-коррелированных пар в РЦ методом конволюции (2), в принципе, может исказить форму спектров. В конечном итоге это может сказаться на величине определяемых структурных и кинетических параметров РЦ.

По сравнению с описанным приближённым подходом последовательный учёт неразрешённой сверхтонкой структуры на порядки увеличивает время расчёта спектров ЭПР разделённых зарядов в РЦ на персональном компьютере. Однако последовательные расчёты стано-

вятся возможными, если использовать многопроцессорные вычислительные устройства и параллельные алгоритмы и программы, эффективно работающие на этих устройствах.

В этой работе проведено сравнение результатов, которые получаются при симуляции спектров ЭПР разделённых зарядов в РЦ фотосинтетических систем с учётом неразрешённой сверхтонкой структуры методом Монте-Карло (последовательный подход) и методом конволюции (приближенный подход), дано сравнение симулированных спектров ЭПР разделённых зарядов в РЦ фотосинтетических систем по методу Монте-Карло с экспериментальным спектром в РЦ фотосистемы I.

Модель и методика расчёта

При моделировании спиновой динамики разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтеза учитываются:

1. анизотропия сверхтонкого, зеемановского и спин-спинового взаимодействий;
2. спин-решётчная релаксация и спин-спиновая релаксация электрон-дырочной пары;
3. всевозможные ориентации реакционного центра относительно внешнего магнитного поля;
4. магнитные ядра, которые дают в спектре ЭПР разделённых зарядов неразрешённую сверхтонкую структуру.

Для матрицы плотности ρ , описывающей состояние электрон-дырочной пары с заданной ориентацией в пространстве и с заданным значением локальных магнитных полей для партнеров пары, кинетическое уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[\mathcal{H}, \rho] + R\rho - \frac{K_s}{2}(P_s\rho + \rho P_s) - \frac{K_T}{2}(P_T\rho + \rho P_T), \quad (3)$$

где $\mathcal{H}$ – спин-гамильтониан электрон-дырочной пары в реакционном центре фотосинтеза; R – оператор, который описывает спин-решётчную и спин-спиновую релаксацию; K_s и K_T – скорости рекомбинации электрон-дырочной пары из синглетного и триплетного состояний, соответственно; P_s и P_T – проекционные операторы на синглетное и триплетное состояния электрон-дырочной пары.

Спин-гамильтониан электрон-дырочной пары

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_{ss} + \mathcal{H}_{HF} + \mathcal{H}_{MW}$$

описывает зеемановское взаимодействие электрона и дырки с внешним магнитным полем ($\mathcal{H}_Z$), спин-спиновое взаимодействие между электроном и дыркой ($\mathcal{H}_{ss}$),

сверхтонкое взаимодействие электрона и дырки с магнитными ядрами ($\mathcal{H}_{\text{HF}}$), взаимодействие электрона и дырки с СВЧ полем ($\mathcal{H}_{\text{MW}}$).

Сверхтонкое взаимодействие с CH_3 группой в акцепторе A_1 сравнительно большое и поэтому оно учитывалось явным образом. Сверхтонкое взаимодействие электрона и дырки с магнитными ядрами, которые дают неразрешённую СТС в спектрах ЭПР, учитывается как случайный разброс резонансных частот электрона и дырки. Для заданной ориентации спинов ядер ($\{m_1, m_2, \dots\}$, m_k – проекция k -го ядерного спина на направление внешнего магнитного поля) сверхтонкое взаимодействие даёт сдвиг резонансной частоты электронного спина на величину $\Delta\omega\{m_1, m_2, \dots\} = \sum a_k m_k$, где a_k – константы сверхтонкого взаимодействия. В ансамбле реакционных центров реализуются всевозможные ориентации ядерных спинов. Для достаточно большого числа магнитных ядер распределение парамагнитных центров по величине сдвига $\Delta\omega$ можно описывать гауссовским распределением вида (1), $\Delta\omega = \gamma B_{\text{лок}}$, где γ – гиромагнитное отношение для электрона.

Расчёты спектров ЭПР были проведены для реакционного центра фотосистемы I. Были использованы параметры, приведённые в работах [4–6].

Для каждого значения резонансной частоты донора и акцептора решалось кинетическое уравнение для матрицы плотности электронно-дырочных пар (3). Усредняя по всем ориентациям реакционного центра и случайным значениям локальных полей донора и акцептора, строился спектр ЭПР разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтеза.

На персональном компьютере, используя метод конволюции, спектр ЭПР разделённых зарядов считается около десяти часов. Предложенный последовательный учёт взаимодействия с магнитными ядрами требует на порядок больше времени при расчёте спектров ЭПР разделённых зарядов, чем при методе конволюции, так как для получения приемлемой точности каждой точки вычисляемого спектра ЭПР необходимо рассматривать не менее 500 ориентаций реакционных центров относительно внешнего магнитного поля и более 100000 случайных значений локальных полей донора и акцептора. Эту проблему удаётся решить, если использовать многопроцессорные вычислительные устройства и параллельные алгоритмы и программы, которые эффективно работают на этих устройствах. Это позволило повысить производительность вычислений и сделало возможным рассчитать спектры по предлагаемой методике. Для иллюстрации того, что в рассматриваемой задаче действительно надо использовать не менее 10^5 случайных значений сверхтонких локальных полей, на рис. 1 приведены расчётные спектры ЭПР РЦ для трёх выборок N случайных полей. Видно, что $N = 1000$ и даже $N = 10000$ недостаточно усредняют расчётный спектр. При $N = 100000$ расчётный спектр получается достаточно гладким.

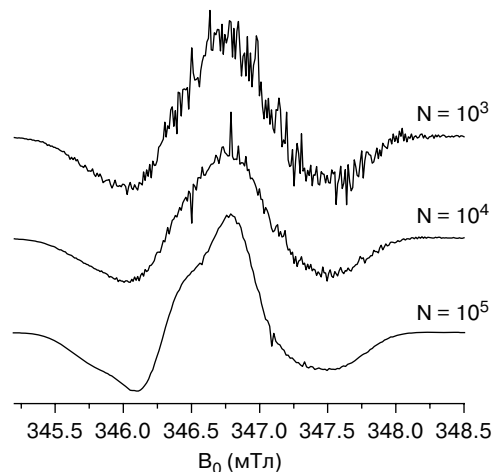


Рис. 1. Симулированные спектры разделённых зарядов в РЦ фотосинтеза при различных объёмах выборки N случайных сверхтонких локальных полей.

Результаты расчётов

На рис. 2 приведены спектры ЭПР разделённых зарядов в РЦ, которые были рассчитаны с учётом неразрешённой СТС линий ЭПР методом конволюции и последовательным методом (методом Монте-Карло). Видно, что при одних и тех же значениях магнитно-резонансных и молекулярно-кинетических параметров парамагнитных центров формы спектра, рассчитанные приближенно и последовательно, существенно отличаются. На рис. 3 приведено сравнение экспериментального спектра ЭПР разделённых зарядов в РЦ (прерывистая линия), который любезно предоставил авторам профессор Д. Штелик, и расчётного спектра ЭПР разделённых зарядов в РЦ (сплошная линия), которые были рассчитаны с учётом неразрешённой сверхтонкой структуры линий ЭПР

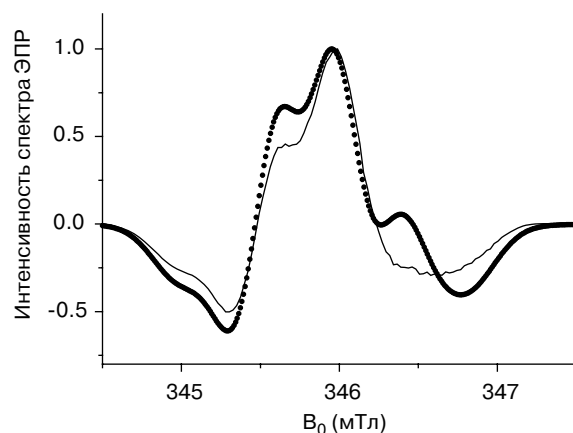


Рис. 2. Симулированные спектры ЭПР разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтеза. Прерывистая линия – учёт сверхтонкого взаимодействия осуществляется с помощью метода конволюции, сплошная линия – с помощью метода Монте-Карло. Параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1. Расчётные параметры.

g-тензоры			
	g_x	g_y	g_z
P^+	2.00308	2.00264	2.00226
A^-	2.00622	2.00507	2.00218
A-тензор (в МГц) ¹			
	A_x	A_y	A_z
A^-	9.0	12.8	9.0
Спин-спиновое взаимодействие (мТл)			
	D	J	
P^+A^-	-170	1.0	
Геометрические параметры ²			
	α_g	β_g	γ_g
P^+	81°	126°	182°
	α_A	β_A	γ_A
CH_3	25°	0°	0°
	θ_D	φ_D	
Z_D	90°	0°	
Неоднородная ширина линии ³ (мТл)			
$\Delta B(P^+)$	0.30		
$\Delta B(A^-)$	0.17		

¹ A_x, A_y, A_z – главные значения тензора сверхтонкого взаимодействия в CH_3 группе.

² Углы Эйлера α, β, γ описывают относительную ориентацию главных осей тензора $g(P^+)$ к главным осям тензора $g(A^-)$. $\alpha_A, \beta_A, \gamma_A$ – углы Эйлера, которые характеризуют ориентацию CH_3 группы в системе осей тензора $g(A^-)$. Полярный и азимутальный углы, θ_D и φ_D , соответственно, описывают ориентацию аксиальной оси тензора диполь-дипольного взаимодействия в паре в системе координат главных осей тензора $g(A^-)$: $Z_D = (-\sin\theta_D\cos\varphi_D, \sin\theta_D\sin\varphi_D, \cos\theta_D)$.

³ ΔB соответствует ширине между двумя пиками в первой производной спектра.

методом Монте-Карло. При расчёте предполагалось, что в каждом из 500 направлений ориентации РЦ, построенных в соответствии с [7], рассматривается 10^5 случайных значений резонансных частот для донора и акцептора. Очевидно хорошее совпадение расчётного спектра с результатами эксперимента.

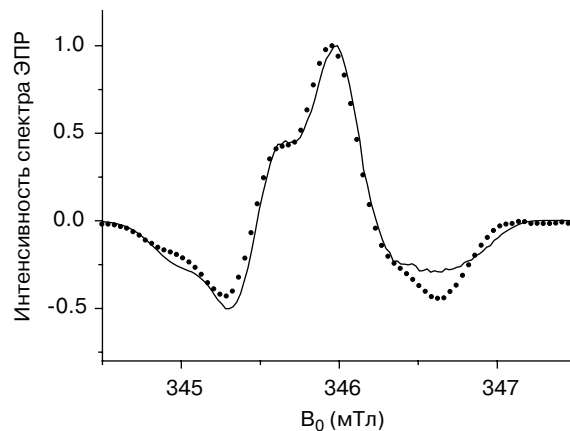


Рис. 3. Симулированный спектр ЭПР разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтеза, рассчитанный с учётом неразрешённой сверхтонкой структуры методом Монте-Карло (сплошная линия) и экспериментальный спектры ЭПР разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтеза (прерывистая линия). Параметры приведены в таблице 1.

Заключение

Создана программа, которая позволила впервые осуществить симуляцию спектра ЭПР разделённых зарядов в реакционном центре фотосистемы I, в которой неразрешённая СТС спектров ЭПР учтена последовательным образом на стадии формирования электронной спиновой поляризации. Показано, что при одних и тех же значениях магнитно-резонансных и молекулярно-кинетических параметров разделённых зарядов методы Монте-Карло и конволюции приводят к существенно разным формам спектра ЭПР. Также показано, что симулированные спектры ЭПР разделённых зарядов в РЦ фотосинтетических систем по методу Монте-Карло достаточно хорошо совпадают с экспериментальными спектрами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.2), гранта РФФИ (№ 06-03-32175), гранта НИОКР РТ (№ 06-6.3-10) и гранта CRDF BRHE REC-007.

Литература

1. Stehlik D.: Transient EPR spectroscopy as applied to light-induced functional intermediates along the electron transfer pathway in photosystem I. *Advances in Photosynthesis and Respiration* (Golbeck J.H., ed.), vol. 24, pp. 361–386. Dordrecht: Springer 2006.
2. Салихов К.М.: УФН **176**, 664–669 (2006)
3. Salikhov K.M., Molin Yu.N., Sagdeev R.Z., Buchachenko A.L.: Spin polarization and magnetic effects in radical reactions. Budapest, Amsterdam: Elsevier 1984. 419 p.
4. Salikhov K.M., Zech S.G., Stehlik D.: *Mol. Phys.* **100**, 1311–1321 (2002)
5. Kandrashkin Yu.E., Vollmann W., Stehlik D., Salikhov K.M., van der Est A.: *Mol. Phys.* **100**, 1431–1443 (2002)
6. Salikhov K.M., Pushkar Y.N., Golbeck J.H., Stehlik D.: *Appl. Magn. Reson.* **24**, 467–482 (2003)
7. Ponti A.: *J. Magn. Reson.* **138**, 288–297 (1999)

Исследование молекулярной подвижности альфа-кристаллина методами ЯМР спектроскопии

Т. А. Зинкевич, О. И. Гнездилов

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии

Молекулярная подвижность альфа-кристаллина в растворе исследована методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля при изменении температуры и влиянии ионного детергента. Проведён сравнительный анализ ^{13}C ЯМР спектров альфа-кристаллина в растворе и твёрдом состоянии (сухом и увлажнённом).

Введение

Наряду с ДНК, белки являются основными биологическими макромолекулами, благодаря которым на Земле существует жизнь во всех её формах. Они выполняют важные для живых организмов функции – транспортные, ферментативные, регуляторные, механохимические и многие другие. Белок представляет собой длинную одномерную полимерную цепь, состоящую из звеньев-аминокислот. Длина полипептидной цепи для различных белков варьируется от 30–40 до многих сотен аминокислот. Наличие водородных связей между звеньями полипептидной цепи, а также ван-дер-ваальсовы силы между боковыми радикалами обуславливают несколько уровней пространственной структуры молекул белка – от первичной до третичной (четвертичной) [1]. Принципиально важным отличием белков от синтетических биополимеров является то, что каждый белок способен выполнять свою биологическую функцию.

Белки-шайпероны отвечают за корректную сборку (фолдинг) пространственной структуры многих белков и за предотвращение неконтролируемой денатурации и агрегации белков. Шайпероны – наименее изученный класс белков, так как многие из них не кристаллизуются и поэтому невозможно провести рентгеноструктурный анализ [2]. Цель исследования организации белковой молекулы – это понимание механизма её биологического функционирования, что очень важно для биотехнологии и медицины. Для изучения механизмов взаимодействия белков необходимо определить характеристики различных типов молекулярных движений. Частотный диапазон колебаний этих движений очень широк. Характерное время самых быстрых движений – фемтосекунды, самых медленных – секунды и даже минуты. Фемтосекундная область соответствует колебаниям валентных связей и валентных углов. Пикосекундная область и всё, что медленнее, обуславливается конформационными степенями свободы структуры белка – двугранными (торсионными) углами, обеспечивающими гибкость основной цепи белка, а также двухгранными углами, определяющими конформацию бо-

ковых цепей аминокислотных остатков. Время корреляции крупномасштабных конформационных переходов находится в микро- и миллисекундном диапазонах. Следует отметить, что временной масштаб этой медленной динамики совпадает с временным масштабом многих молекулярно-биологических процессов (связывание с субстратом, катализ, фолдинг). Поэтому вполне естественно предположить, что именно изучение медленной конформационной динамики наиболее важно для понимания биологической функции белка [3].

Образцы и методы эксперимента

Объектом исследования в данной работе являлся белок альфа-кристаллин, обладающий высокой шайперонной активностью. Его основная функция – сохранение прозрачности хрусталика глаза за счёт образования растворимых комплексов с другими белками хрусталика, которые из-за возрастных изменений переходят в предденатурационное состояние. Альфа-кристаллин имеет огромное значение для жизнедеятельности организма, нарушение его работы ведёт ко многим серьезным болезням, таким как катаракта, болезни Альцгеймера, Паркинсона и некоторым другим. В последнее время альфа-кристаллин интенсивно исследовался различными методами, но вопрос о роли молекулярной динамики в его шайперонной активности практически не затрагивался. Поэтому важно и интересно определить характеристики различных типов молекулярных движений альфа-кристаллина как целой глобулы, так и отдельных её доменов, в свободном и связанном с целевым белком состояниях и проследить корреляцию этих характеристик с изменением шайперонной активности белка, модулированной различными воздействиями (изменение температуры, влияние различных реагентов, фосфорилирование и т.п.). Известны два гена альфа-кристаллина: альфа-А и альфа-В. В растворе альфа-кристаллин образует полидисперсные агрегаты со средней молекулярной массой около 800 кД, состоящие из альфа-А и альфа-В гомологических субъединиц, молекулярным весом по 20 кД каждая [4]. Раст-

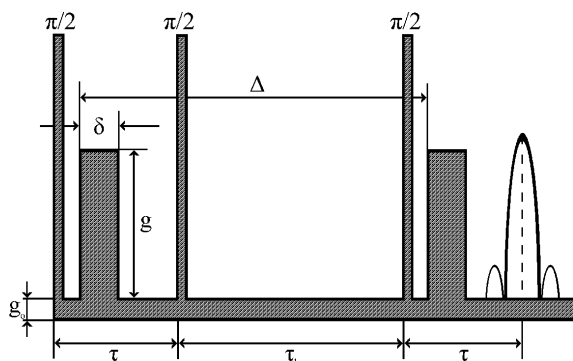


Рис. 1. Схема импульсной последовательности для измерения коэффициента самодиффузии.

воры готовились смешением компонентов с последующим центрифугированием. Для уменьшения сигнала от воды использовалась дейтерированная вода (98%). Концентрация растворов определялась взвешиванием и контролировалась спектрофотометрически.

Основным методом исследований в нашей работе была ЯМР спектроскопия на ядрах углерода в растворе и твёрдом состоянии. Для изучения влияния температуры и некоторых химических агентов на молекулы белка дополнительно был применён метод ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля. Основное преимущество метода ЯМР для наших целей в изучении молекулярной динамики белков – это селективность структурной и динамической информации. При измерении коэффициентов трансляционной самодиффузии (КСД) молекул белка мы пользовались методикой стимулированного эхо. Вид импульсной последовательности показан на рис. 1. Действие этой импульсной последовательности заключается в следующем: первый радиочастотный (РЧ) импульс поворачивает вектор намагниченности в плоскость $xу$. Далее подаётся первый импульс градиента магнитного поля, “расфазировывающий” спиновые изохроматы. Второй РЧ импульс доворачивает изохроматы в плоскость xz и в течение времени τ_1 проходит процесс спин-решёточной релаксации. Третий РЧ импульс возвращает намагниченность в плоскость $xу$, инвертируя фазы изохроматов. Одновременно подаётся второй “фазировывающий” градиентный импульс. При полной идентичности двух градиентных импульсов точное сфазирование изохромат произойдет в том случае, если частоты их прецессии в течение действия последовательности не изменились, что возможно, если не изменилось их положение в пространстве. Пренебрегая перемещением ядер за время действия градиента δ и величиной постоянного градиента магнитного поля g_0 , среднеквадратичная величина фазы $\langle \Phi^2 \rangle$, приобретённая в результате перемещения ядер за время Δ между градиентными импульсами, определяется выражением: $\langle \Phi^2 \rangle = \gamma^2 \delta^2 g^2 \langle r^2 \rangle$, где величина среднеквадратичного перемещения спинов связана с КСД молекулы отношением $\langle r^2 \rangle = 2D \cdot \Delta$, а затухание эха будет определяться соотношением:

$$A(g, \tau, \tau_1) = \frac{A_0(0)}{2} \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2} - \frac{2\tau_1}{T_1}\right) \times \exp(-\gamma^2 \delta^2 g^2 D(\Delta - \delta/3)),$$

где A_0 – амплитуда сигнала ЯМР, измеренная сразу после 90° -го импульса эха в начальный момент времени; D – коэффициент самодиффузии; g – величина градиента магнитного поля; T_1 и T_2 – времена спин-решёточной и спин-спиновой релаксации, соответственно.

Значение КСД можно определить из тангенса угла наклона огибающей амплитуд сигнала, имеющей вид прямой в координатах $\lg A - f(g^2)$ при постоянных g и D [5].

Для записи спектров ^{13}C ЯМР альфа-кристаллина в твёрдом состоянии мы пользовались как одноимпульсным возбуждением системы спинов (режим DP), так и методикой кросс-поляризации (режим CP).

Все измерения выполнены на мультядерном спектрометре ЯМР Avance 400 фирмы Брукер, позволяющем получать 1-D и 2-D спектры ЯМР жидкостных и твёрдых образцов, с динамической развязкой, проводить релаксационные измерения и измерения коэффициентов самодиффузии.

Экспериментальные результаты и обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены спектры ЯМР ^1H и ^{13}C 4% раствора альфа-кристаллина в D_2O . Спектры получены при комнатной температуре. Длинные времена корреляции молекулярных движений, связанные с большим размером агрегатов альфа-кристаллина приводят к плохо разрешённому спектру ЯМР ^1H . Кроме широкой компоненты на спектре, также наблюдаются узкие резонансные линии. Эти линии связаны, во-первых, с протонами

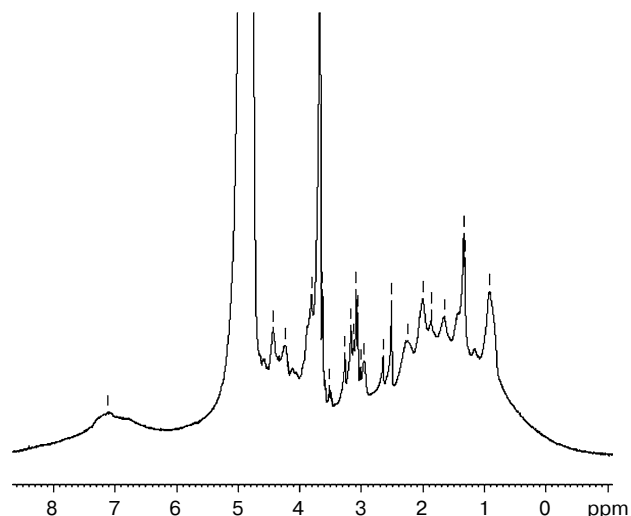


Рис. 2. Протонный спектр 4% раствора альфа-кристаллина в дейтерированной воде.

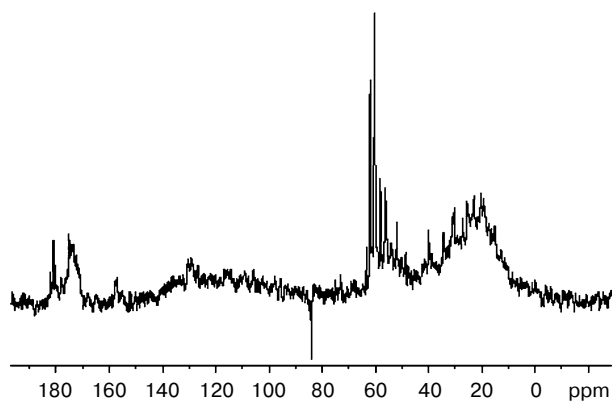


Рис. 3. Спектр ЯМР ^{13}C 4% раствора альфа-кристаллина в дейтерированной воде.

участков альфа-кристаллина, которые имеют большую степень свободы по сравнению с основным агрегатом белка; во-вторых, оказалось, что исходный препарат белка содержит низкомолекулярную примесь неизвестной природы. Наличие низкомолекулярной примеси подтвердили и измерения КСД растворов альфа-кристаллина. Диффузионный спад при комнатной температуре имеет две компоненты с КСД $0.25 \cdot 10^{-10}$ и $4.5 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{сек}$. Компонента с малым КСД соответствует агрегатам альфа-кристаллина, с большим – примеси. Величина КСД последней компоненты даёт размер примесных молекул меньше молекулы белка, но больше размера молекул воды. На рис. 4 продемонстрирована зависимость КСД альфа-кристаллина при комнатной температуре от добавления детергента-диоксиколата. Цель добавления детергента – добиться диссоциации агрегатов альфа-кристаллина. Ранее было показано, что диоксиколат разбивает агрегаты альфа-кристаллина до тетрамеров, и при этом вторичная структура белка не изменяется. Эксперимент показал, что при концентрации диоксиколата до 1.5% КСД белка не изменяется, а при концентрации 4% и выше

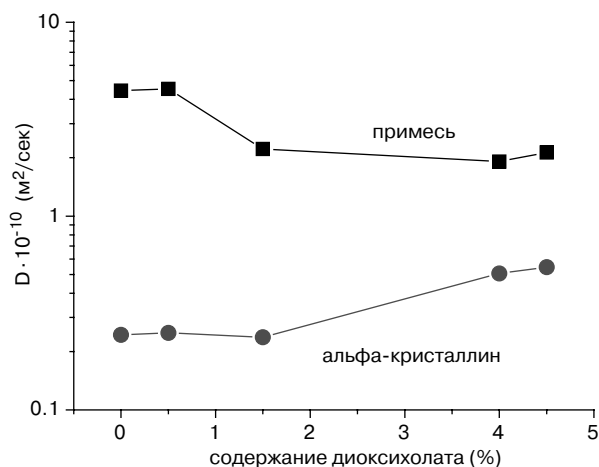


Рис. 4. Зависимость коэффициента самодиффузии альфа-кристаллина от концентрации диоксиколата.

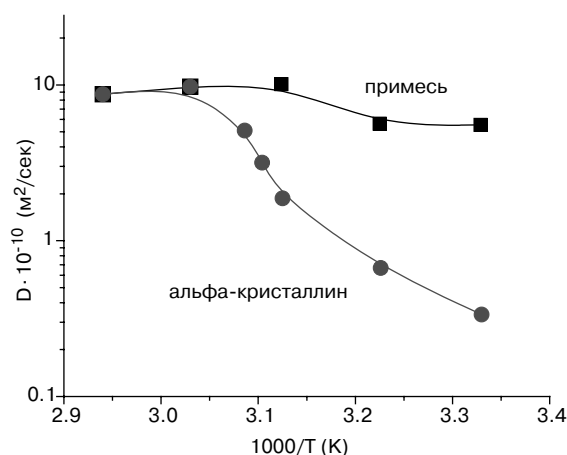


Рис. 5. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии альфа-кристаллина.

он увеличивается примерно в два раза, что указывает на диссоциацию агрегатов. При этом выяснилось, что раствор альфа-кристаллина нестабилен – в течение нескольких дней образуется мутный осадок, что делает невозможным проведение длительных экспериментов с такими образцами.

Для определения температурно-зависимых конформационных переходов в альфа-кристаллине были проведены спектральные и диффузионные ЯМР измерения альфа-кристаллина при различных температурах (рис. 5). Данные по калориметрии и тушению флуоресцентной метки свидетельствуют, что альфа-кристаллин испытывает два конформационных перехода: один между 35 и 50°C, другой между 50 и 70°C. Эксперимент показал, что в растворе от комнатной температуры до 55–60°C проходит монотонное увеличение КСД и также монотонный дрейф химических сдвигов линий в спектре ^1H

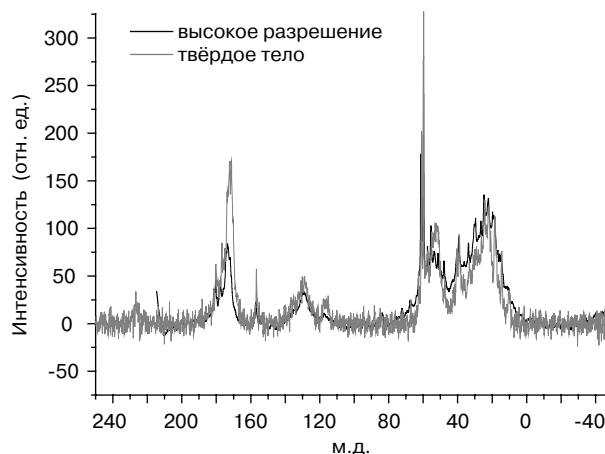


Рис. 6. Сравнение спектров ЯМР ^{13}C высокого разрешения и твёрдого тела в режиме прямой поляризации альфа-кристаллина. Применено экспоненциальное умножение спада свободной индукции с параметром уширения 40 Гц.

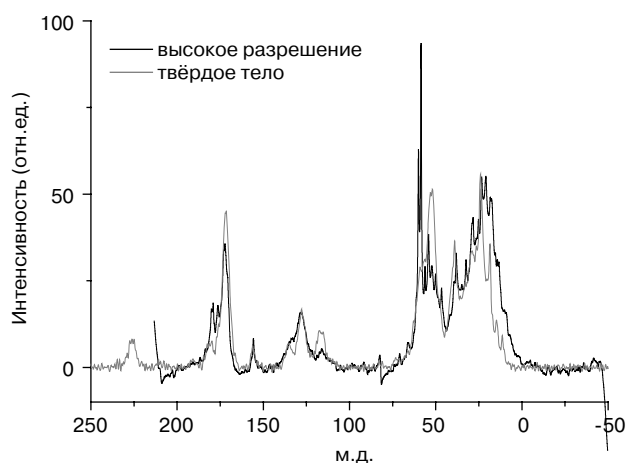


Рис. 7. Спектры ЯМР ^{13}C высокого разрешения и твёрдого тела в режиме кросс-поляризации альфа-кристаллина. Применено экспоненциальное умножение спада свободной индукции с параметром уширения 60 Гц.

ЯМР альфа-кристаллина, что говорит об отсутствии переходов в этом диапазоне температур. В то же время при 55–60°C происходит явный перелом в зависимости КСД, что однозначно свидетельствует о температурном переходе. При этой температуре происходит увеличение размеров диффундирующих частиц, что говорит об увеличении степени агрегации альфа-кристаллина и/или термической денатурации белка и увеличении мономеров.

Сравнение спектров ЯМР ^{13}C альфа-кристаллина в твёрдом состоянии и растворе в режиме DP (прямая поляризация) и CP (кросс-поляризация) записи спектров (рис. 6 и 7) показали, что спектры на ядрах ^{13}C естественного содержания альфа-кристаллина в твёрдом увлажнённом состоянии и растворе очень похожи. Это говорит о том, что в твёрдом состоянии белок не претерпевает существенных структурных изменений по сравнению с раствором. Таким образом, полученный результат является косвенным свидетельством того, что внутренняя динамика глобулярного белка в твёрдом состоянии и в растворе тоже одинакова, конечно, при условии, что в твёрдом состоянии белок полностью гидратирован.

Интересно отметить, что спектральные измерения на ядрах ^{13}C в твёрдом состоянии (как в сухом, так и в увлажнённом до 50%) показали (рис. 8), что спектры белка в диапазоне температур от 0 до 75°C практически идентичны. Это говорит о том, что сам белок конформационных переходов при высокой температуре не испытывает, а наблюдаемые в растворе изменения зависимости КСД связаны, по-видимому, со степенью агрегации альфа-кристаллина.

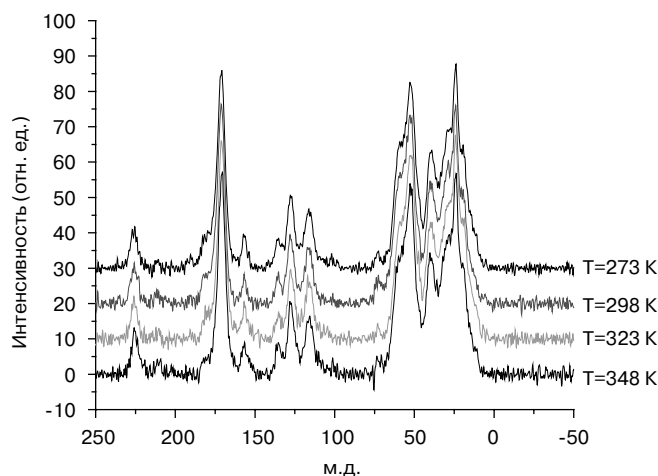


Рис. 8. Зависимость от температуры спектров твёрдого тела высушенного альфа-кристаллина в режиме кросс-поляризации.

Заключение

Представленные результаты являются одним из направлений работы по совместному с КИББ КазНЦ РАН проекту, поддержанному грантом РФФИ № 06-04-48828. Дальнейшие работы будут в основном проводиться по изучению динамики альфа-кристаллина в твёрдом состоянии. Для этого будут проведены релаксационные (T_1 и $T_{1\rho}$ – время релаксации во вращающейся системе координат) измерения, чувствительные к молекулярным движениям в нано- и микросекундном диапазонах времен корреляции. Кроме этого, мы планируем применить одномерную твёрдотельную обменную ЯМР спектроскопию [6]. Этот тип экспериментов даст информацию о переориентации тензора анизотропии магнитных ядер в миллисекундном и секундном диапазонах времён корреляции.

Авторы выражают благодарность А. Г. Крушельницкому (с.н.с. лаборатории молекулярной биофизики КИББ) за сотрудничество и помощь при проведении экспериментов.

Литература

1. Кнорре Д.Г., Мызина С.Д.: Биологическая химия. М.: Высшая школа 2002. 479 с.
2. Augusteyn R.C.: Clinical and Exp. Optometry **87**, 356–366 (2004)
3. Parak F.G.: Rep. Progr. Phys. **66**, 103–129 (2003)
4. Horwitz J.: Exp. Eye Research. **76**, 145–153 (2003)
5. Johnson C.S.: Progr. Nucl. Magn. Res. Spectrosc. **34**, 203–256 (1999)
6. Крушельницкий А.Г.: УФН **175**, № 8, 117–127 (2005)

Атомно-силовая микроскопия композитных электродов с каталитическими свойствами

С. А. Зиганшина, А. П. Чукланов, А. А. Бухараев

Лаборатория физики и химии поверхности

Морфология поверхности композитных электродов, обладающих каталитическими свойствами, была изучена с помощью атомно-силовой микроскопии. Установлено, что формирование высокодисперсной структуры наноразмерных частиц палладия на высокоориентированном пирографите или нафионовой плёнке приводит к увеличению каталитической активности платинового металла при электроокислении щавелевой кислоты.

Введение

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является на сегодняшний день одним из основных инструментов исследования физических и химических свойств поверхности, имея ряд неоспоримых преимуществ перед другими методами исследования поверхности [1, 2]. Полуконтактный режим работы АСМ является самым распространённым среди АСМ методик благодаря своей высокой чувствительности и меньшей силе взаимодействия с поверхностью. При сканировании в этом режиме можно регистрировать сразу несколько параметров колеблющегося зонда: амплитуду и фазу колебаний, смещение резонансной частоты. Игла в полуконтактном режиме находится в непосредственном контакте с образцом очень непродолжительное время (порядка 1 мкс). Это позволяет исследовать с помощью АСМ широкий класс объектов: наночастицы [3], полимеры [4–6], живые клетки и ткани [7, 8].

Последнее время перед АСМ стоит проблема перехода от простого исследования морфологии к исследованию физических и химических свойств поверхности. В полуконтактной АСМ анализ сдвига фазы колеблющегося кантилевера по отношению к фазе вынужденных колебаний пьезомодулятора позволяет регистрировать области с разными упругими, адгезионными или вязкими свойствами с разрешением до нескольких нанометров. Таким образом, если на поверхности образца имеются области с неодинаковыми упругими или адгезионными свойствами, то в процессе сканирования, регистрируя изменение фазы колебаний, можно получать карту распределения этих свойств по поверхности образца с нанометровым разрешением и тем самым, например, визуализировать структуру многофазных нанокомпозитов [4–6].

Композитные электроды на основе химически модифицированных электродов (ХМЭ) с электрокаталитическими свойствами широко используются в электроаналитической химии [9]. В качестве катализаторов-медиаторов ХМЭ используют металлы, их оксиды, металлокомплексы и электронпроводящие полимеры, которые иммобилизуют на поверхности или в объёме электрода. Дос-

таточно универсальными катализаторами для многих электрохимических реакций являются металлы платиновой группы [10]. Нанесение каталитической системы на поверхность электрода проводят разными способами [9–13], среди наиболее часто используемых следует выделить электроосаждение. При варьировании условий электроосаждения на поверхности электрода можно получать частицы различной формы и размера. Особый интерес представляют наночастицы металлов, которые приобретают специфические свойства, отличные от свойств макрокристаллов [11–14]. С наночастицами становится возможным протекание реакций, которые практически не идут на поверхности макрокристаллов. Известно [11], что уменьшение размера частиц платиновых металлов часто приводит к росту каталитического эффекта.

В настоящей работе рассмотрено влияние состояния поверхности и размера частиц кристаллитов Pd, электроосаждённых на поверхности высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) или на ВОПГ с нафионовой (Нф) плёнкой, на каталитические свойства металла при электроокислении щавелевой кислоты.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

В качестве рабочих использовались следующие электроды: ВОПГ; ВОПГ с электроосаждёнными частицами палладия (ВОПГ-Pd); ВОПГ, покрытый полимерной Нф плёнкой (ВОПГ-Нф); ВОПГ, покрытый Нф плёнкой с электроосаждёнными частицами палладия (ВОПГ-Нф-Pd).

Электродом сравнения служил хлоридсеребряный электрод, вспомогательным электродом – платиновая проволока.

Композитные полимерные электроды создавали в две стадии: сначала поверхность ВОПГ покрывали Нф плёнкой методом “капельного испарения”, затем проводили электроосаждение Pd на полимерную плёнку.

Для получения электролитических осадков Pd использовали потенциостатический электролиз при потенциале -0.4 В. Электроосаждение Pd на ВОПГ или ВОПГ с по-

лимерами проводили из сернокислого раствора PdCl_2 (фирма Aldrich). Для исключения влияния растворённого кислорода, исходный раствор в некоторых случаях продувался аргоном в течение 15 мин. Поверхность рабочих электродов обновляли электрохимически.

Исходные водные растворы щавелевой кислоты готовили растворением ее точной навески. Растворы меньших концентраций готовили разбавлением исходного раствора непосредственно перед измерениями. В качестве фонового электролита использовали 0.1 М раствор H_2SO_4 .

Состояние поверхности электродов изучали методом АСМ с помощью микроскопа Solver P47 фирмы НТ-МДТ (г. Зеленоград).

Были получены АСМ изображения в режимах топографии и фазового контраста наночастиц Pd, электроосаждённых на поверхность ВОПГ (время электроосаждения $t_s = 5$ с). При этом на поверхности электрода формируются наночастицы металла размером от 50 до 200 нм, которые лежат островками (рис. 1). Наиболее часто встречаются частицы размером 100 нм. При сопоставлении топографии поверхности с АСМ изображениями, полученными в режиме фазового контраста, можно отметить, что частицы, полученные при данных условиях, имеют сложную форму, т.е. состоят из нескольких наночастиц. Вместе с тем, следует отметить, что на поверхности электрода видны участки, непокрытые наночасти-

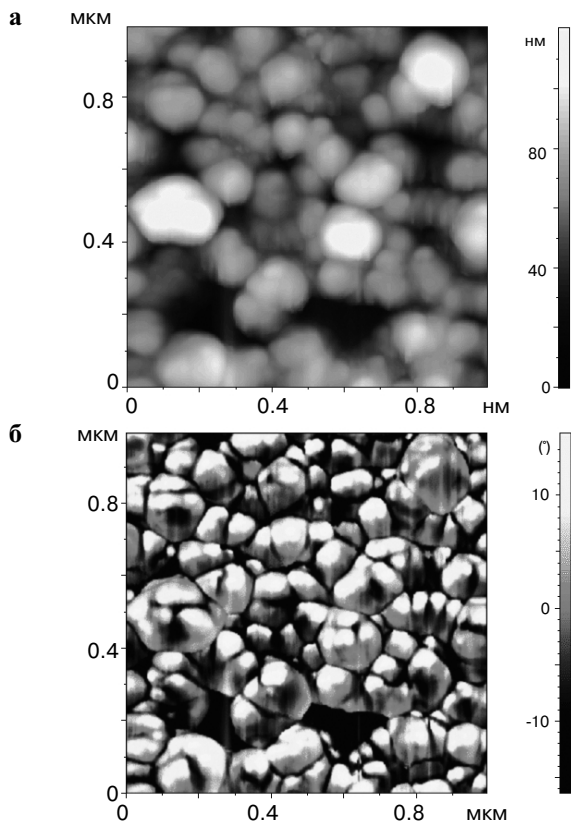


Рис. 1. АСМ изображения, полученные с разным увеличением, в режиме топографии (а) и фазового контраста (б) поверхности ХМЭ после электроосаждения Pd в течение 5 с.

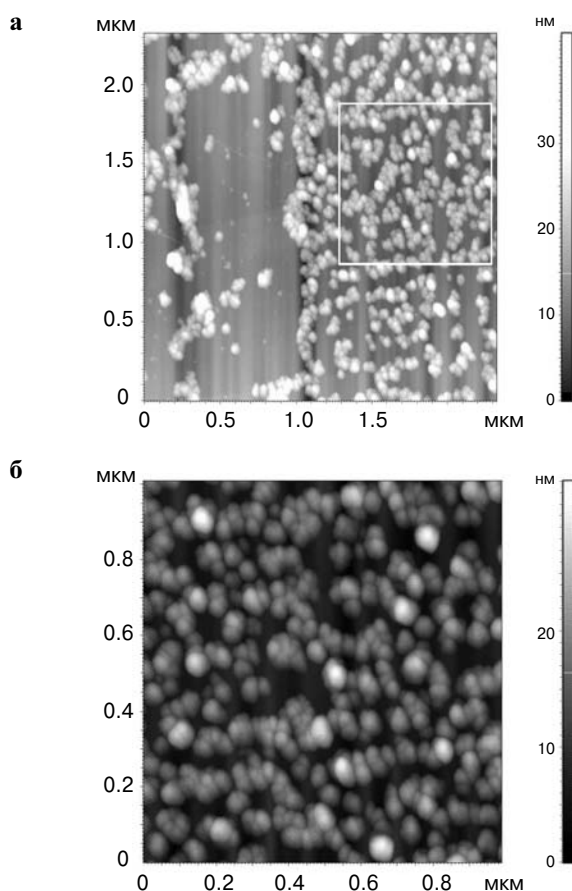


Рис. 2. АСМ изображение поверхности ВОПГ-Pd. Электроосаждение Pd проводили в течение 5 с из раствора PdCl_2 , продутого аргоном. б – фрагмент рисунка а.

цами Pd, т.е. местами встречается чистая поверхность ВОПГ.

После продувания исходного раствора PdCl_2 аргоном электроосаждённые на поверхность ВОПГ частицы Pd имеют меньший размер, что следует из полученных АСМ изображений (рис. 2).

Из рис. 2а видно, что частицы Pd, полученные электроосаждением из продутого аргоном раствора, также не полностью покрывают поверхность ВОПГ. Однако, по сравнению с электродом ВОПГ-Pd, полученного из раствора с растворённым кислородом (рис. 1а), плотность частиц на поверхности ВОПГ-Pd, полученного из продутого раствора (рис. 2б) больше, а размер частиц меньше.

Были получены АСМ изображения поверхности ВОПГ-Нф, а также ВОПГ-Нф-Pd, полученных в течение 5 и 10 с.

На рис. 3 приведены АСМ изображения поверхности электрода ВОПГ-Нф. Для полимерного электрода характерна ровная поверхность (разброс по высоте на 1 мкм^2 составляет 6 нм), на которой выделяются и равномерно распределённые впадины диаметром от 50 до 1500 нм. Присутствие этих впадин, вероятно, связано с наличием гидрофильных ионных кластеров в полимерной матри-

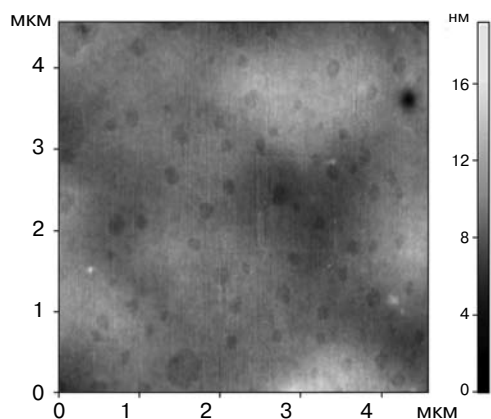


Рис. 3. АСМ изображение поверхности электрода ВОПГ-Нф.

це. Известно [15], что Нф состоит из нескольких фаз, одна из которых представляет собой гидрофильные ионные кластеры, состоящие из сульфогрупп, противоионов и воды, а другая фаза – это гидрофобный фторуглеродный скелет, окружающий эти кластеры. Нф хорошо сорбирует воду, причём часть поглощённой воды связывается с сульфогруппами, часть взаимодействует с органической матрицей, а остальная часть образует водные кластеры.

На рис. 4 приведено АСМ изображение композитного электрода ВОПГ-Нф-Pd. Электроосаждение Pd проводили в течение 5 с из раствора, содержащего растворённый кислород.

Из рис. 4 видно, что на Нф плёнке при таком режиме электроосаждения (в присутствии растворённого кислорода) формируются изолированные частицы палладия, причём частицы равномерно расположены по поверхности полимера.

Нф обладает катионообменными свойствами за счет наличия сульфогрупп. Возможно, катионы Pd диффундируют по гидрофильным каналам, содержащим отри-

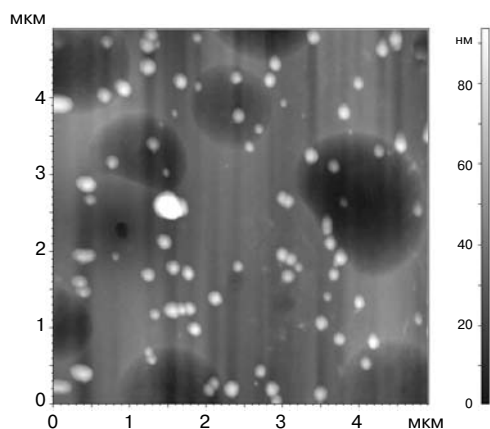


Рис. 4. АСМ изображение поверхности электрода ВОПГ-Нф-Pd в режиме топографии. Электроосаждение Pd проводили из раствора, содержащего растворённый кислород, в течение 5 с.

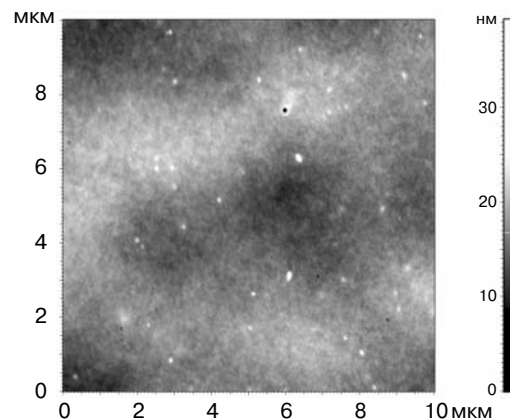


Рис. 5. АСМ изображение поверхности ВОПГ-Нф-Pd, полученного электроосаждением Pd в течение 5 с из раствора, продутого аргоном.

цательно заряженные сульфогруппы, к графитовой подложке, где происходит зародышеобразование и начальное формирование кристаллитов Pd и дальнейший их рост по каналам от частицы к частице [16], что приводит к увеличению дисперсности частиц по сравнению с частицами, осаждёнными на ВОПГ.

Было проведено электроосаждение Pd в течение 5 с на поверхность ВОПГ-Нф из раствора, продутого аргоном. АСМ изображение поверхности такого композитного электрода приведено на рис. 5.

При сравнении рис. 4 и 5 установлено, что, несмотря на одинаковые электрохимические условия электроосаждения Pd (время осаждения, приложенный потенциал и т.д.), отсутствие в электролите растворённого кислорода ведёт к менее эффективному образованию наночастиц металла на поверхности.

Полученные АСМ изображения поверхностей композитных электродов, содержащие частицы Pd были проанализированы с помощью компьютерной программы, позволяющей оценить распределение наночастиц по размеру.

Для получения распределения наночастиц Pd по размеру АСМ изображения поверхности композитных электродов были изучены с помощью разработанной в нашей лаборатории компьютерной программы [17]. Поверхность сенсора состояла из ВОПГ-Нф. Исследовались электроды с временем осаждения 5 и 10 с в присутствии растворённого кислорода. Результаты обработки изображений поверхности этих электродов представлены на рис. 6 и 7. Из гистограммы распределения наночастиц Pd по размеру (рис. 6б) видно, что на поверхности ВОПГ-Нф-Pd преимущественно образуются частицы Pd с диаметром 170 нм. При увеличении времени осаждения Pd до 10 с на поверхности ВОПГ-Нф преимущественно формируются частицы с диаметрами от 80 до 115 нм (рис. 7в).

Были изучены электрохимические и электрокаталитические свойства композитных электродов при окислении щавелевой кислоты, результаты этих исследований представлены в работе [18]. Установлено, что по сравнению с ВОПГ каталитические свойства электроосаждён-

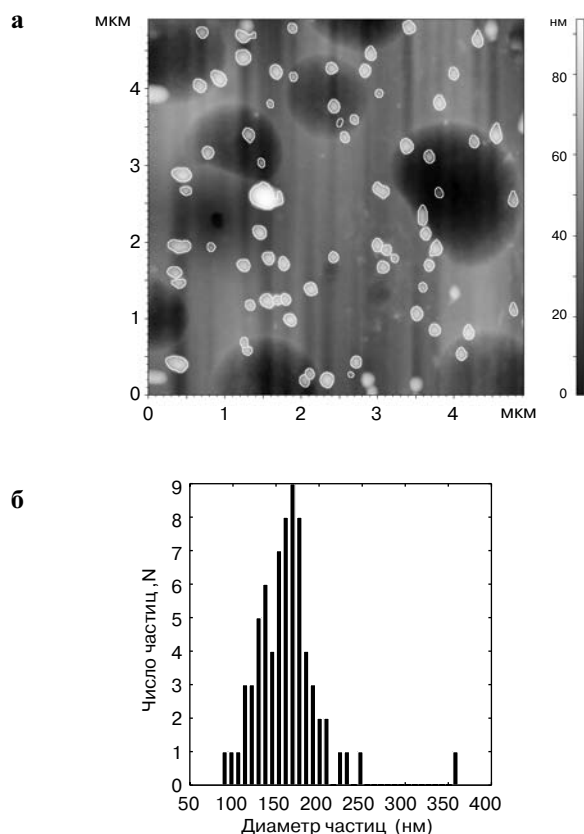


Рис. 6. а Оконтурное АСМ изображение наночастиц Pd, осаждённых в течение 5 с на поверхность ВОПГ-Нф; б гистограмма распределения частиц по размерам, максимум распределения – 170 нм.

ного Pd проявляются в уменьшении потенциала и в увеличении тока окисления щавелевой кислоты. При этом на электроде ВОПГ-Нф-Pd регистрируется каталитический эффект в примерно 2 раза больший, чем на ВОПГ-Pd. Электрод ВОПГ-Нф в реакции электроокисления щавелевой кислоты каталитической активностью не обладает. Возможно, увеличение каталитического эффекта связано с повышением активности частиц Pd в результате формирования мелкодисперсного осадка металла на поверхности плёночного электрода.

Выводы

Таким образом, полученные результаты демонстрируют, что АСМ является эффективным инструментом для изучения морфологии катализаторов на основе наночастиц металлов. Сравнение электрохимических свойств и АСМ изображений приводит к выводу, что среди рассматриваемых электродов максимальную каталитическую активность в реакции окисления щавелевой кислоты проявляют электроды с частицами Pd, имеющими размер около 170 нм и осаждёнными на поверхность ВОПГ-Нф из раствора с растворённым кислородом, когда на поверхности композитного электрода происходит формирова-

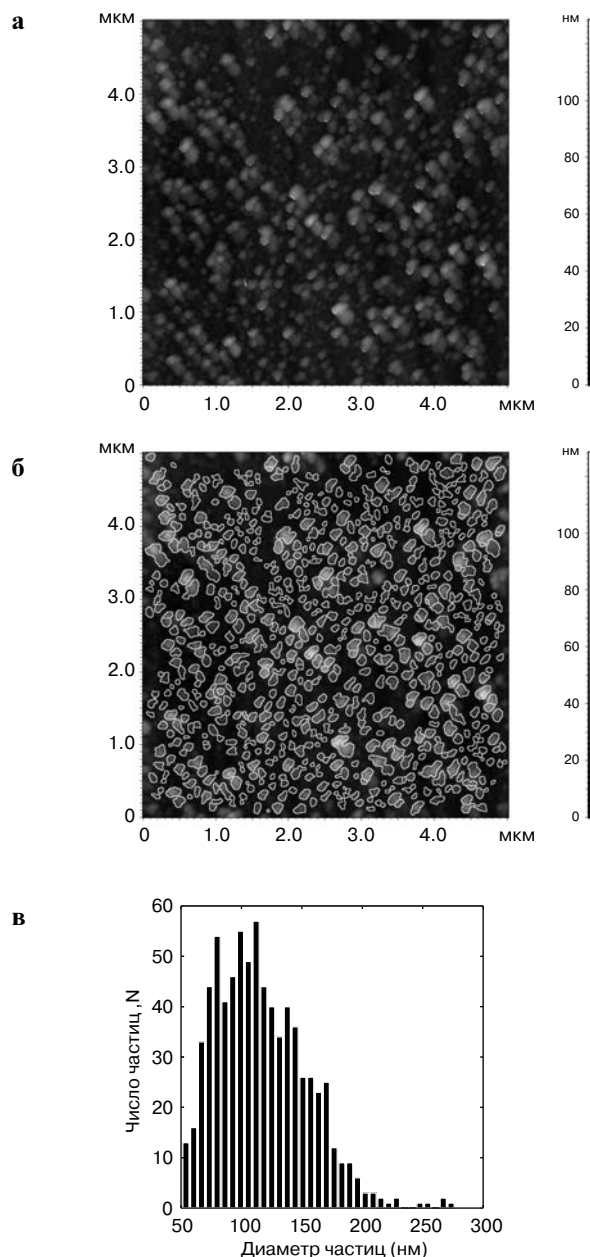


Рис. 7. а АСМ изображение наночастиц Pd, осаждённых в течение 10 с на поверхность ВОПГ-Нф; б оконтурное изображение а; в гистограмма распределения частиц по размерам, максимум распределения находится в интервале 80–115 нм.

ние равномерной структуры изолированных наноразмерных частиц металла.

Авторы выражают благодарность к.х.н. И. А. Челноковой за предоставленные образцы.

Литература

1. Миронов В.Л.: Основы сканирующей зондовой микроскопии, с. 144. М.: Техносфера 2004.
2. Бухарев А.А., Овчинников Д.В., Бухарева А.А.: Заводская лаборатория № 5, 10–27 (1997)

3. Zoval J.V., Lee J., Gorer S., Penner R.M.: *J. Phys. Chem. B* **102**, 1166–1175 (1998)
4. Berquand A., Mazeran P.-E., Laval J.-M.: *Surface Sci.* **523**, 125–130 (2003)
5. Paige M.F.: *Polymer* **44**, no. 20, 6345–6352 (2003)
6. Chen X., Roberts C.J., Zhang J., Davies M.C., Tendler S.J.B.: *Surface Sci.* **519**, L593–L598 (2002)
7. Nagao E., Kaneko O., Dvorak J.A.: *J. Struct. Biol.* **130**, 34 (2000)
8. Яминский И.В. (ред.): Сканирующая зондовая микроскопия биополимеров, с. 88. М.: Научный мир 1997.
9. Будников Г.К., Майстренко В.Н., Муринов Ю.И.: Вольтамперометрия с модифицированными и ультрамикроэлектродами, с. 239. М.: Наука 1994.
10. Баготский В.С.: Основы электрохимии, с. 400. М.: Химия 1998.
11. Петрий О.А., Цирлина Г.А.: *Успехи химии* **70**, № 4, 330–344 (2001)
12. Сергеев Г.Б.: *Рос. хим. журн.* **46**, № 5, 22–29 (2002)
13. Баготский В.С. (ред.): Проблемы электрокатализа, с. 272. М.: Наука 1980.
14. Бухтияров В.И., Слинько М.Г.: *Успехи химии* **70**, № 2, 167–181 (2001)
15. Тарасевич М.Р., Орлов С.Б., Школьников Е.И. и др.: *Электрохимия полимеров*, с. 238. М.: Наука 1990.
16. Подловченко Б.И., Андреев В.Н.: *Успехи химии* **71**, 950–966 (2002)
17. Chuklanov A.P., Bukharaev A.A., Ziganshina S.A.: *Surf. Interface Anal.* **38**, 679–681 (2006)
18. Shaidarova L.G., Chelnokova I.A., Gedmina A.V., Budnikov H.C., Ziganshina S.A., Chuklanov A.P., Bukharaev A.A.: *Mendelev Comm.* (2007) (in press)

Особенности нелинейного поглощения наночастиц серебра в видимом диапазоне

А. Л. Степанов, И. А. Файзрахманов, И. Б. Хайбуллин

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной физики

Методом Z-сканирования с использованием второй гармоники ($\lambda = 532$ нм) пикосекундного Nd:YAG лазера с длительностью импульсов 55 пс исследован процесс нелинейного оптического поглощения силикатных стёкол с наночастицами серебра, синтезированными методом ионной имплантации. Определены значения коэффициента нелинейного поглощения и нелинейной восприимчивости третьего порядка исследуемых фотонных материалов для различных значений интенсивности лазерного излучения.

Введение

Перспективы развития и совершенствования современной электроники связываются с поиском новых фотонных материалов и созданием на их основе комбинированных оптоэлектронных наноустройств, функционирующих на частотах ультрабыстрых импульсных лазеров. Для этих целей перспективными являются фотонные композиционные среды на основе оптически-прозрачных диэлектриков и широкозонных полупроводников, содержащих металлические наночастицы (МН). Фотонные среды с МН могут быть использованы в качестве ключевых элементов для управления оптическим сигналом в диэлектрических и полупроводниковых волноводах, выполняя роль ультрабыстрых нелинейно-оптических переключателей, модуляторов светового сигнала и оптических ограничителей [1].

Коллективное возбуждение электронов проводимости в МН под действием электромагнитной волны света, так называемый поверхностный плазмонный резонанс (ППР), и связанное с этим существенное усиление локального электромагнитного поля стимулируют в МН различные оптические резонансные явления в широком спектральном диапазоне, например, приводят к появлению селективного линейного ППР поглощения, а также вызывают разнообразные нелинейно-оптические эффекты. На практике используются различные типы фотонных материалов, пригодных для нелинейно-оптических переключающих элементов, при этом они характеризуются двумя определяющими параметрами: пороговой энергией переключения и скоростью переключения. Как видно из рис. 1, на котором представлены современные фотонные нелинейно-оптические материалы [1, 2], МН могут быть использованы в уникальных специфических условиях, а именно для ультракоротких времён переключения при высоких прикладываемых энергиях. При этом фотонные среды с МН обладают более высокой термической стабильностью, по сравнению, например, с органическим кристаллом полидицилена (PTS), который также обладает способностью к переключениям под действием ультракоротких импульсов света.

Фотонные среды с МН представляют дополнительный интерес для применения во внутрирезонаторных элементах для синхронизации мод лазера, поскольку они обладают способностью к нелинейному насыщенному поглощению [3, 4]. В ряде ранних работ было показано, что стёкла, содержащие наночастицы серебра, при их лазерном облучении фемтосекундными импульсами способны проявлять нелинейное поглощение. Так, в работе [4] анализировалась спектральная дисперсия мнимой части нелинейной восприимчивости третьего порядка ($\text{Im}\chi^{(3)}$) стёкол с МН вблизи максимума ППР поглощения (420 нм) и было установлено, что величина $\text{Im}\chi^{(3)}$ отрицательна в диапазоне длин волн 385–436 нм. В настоящей работе поставлена задача по изучению нели-

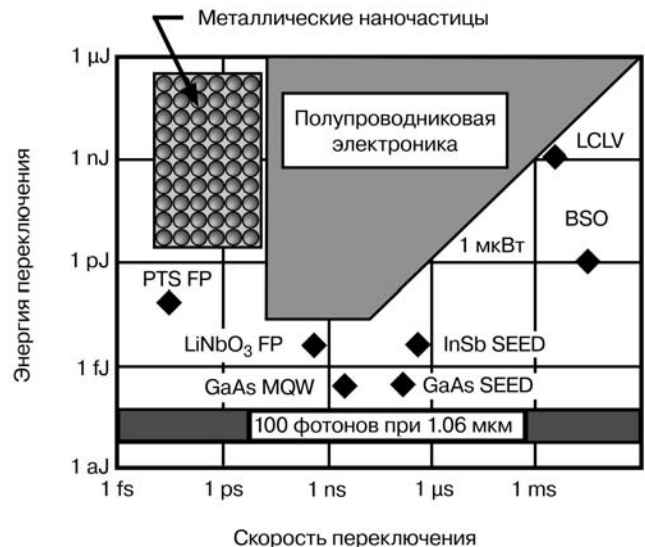


Рис. 1. Перечень нелинейно-оптических материалов, используемых в оптических переключающих устройствах, для различных скоростей нелинейного отклика в зависимости от прикладываемых энергий лазерного излучения. MQW – мультиквантовая яма, LCLV – световой клапан на основе жидкого кристалла (жидкокристаллический световой клапан), SEED – поликристаллический кристалл, BSO – кристалл $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_2\text{O}$, FP – резонатор Фабри-Перо. ◆ – точка на графике. Обзор составлен по материалам работ [1, 2].

нейного поглощения (β) наночастиц серебра, находящихся в матрице стекла, в видимом диапазоне на длине волны 532 нм в зависимости от интенсивности лазерного излучения пикосекундных импульсов.

Методики эксперимента

В качестве подложки для получения композиционного материала использовались силикатное стекло SiO_2 (СС) и натриево-кальциевое силикатное стекло (НКСС), которые не проявляют сколько-нибудь заметных нелинейно-оптических свойств в видимом диапазоне спектра. Имплантация проводилась ионами Ag^+ с энергией 60 кэВ и дозой $4.0 \cdot 10^{16}$ ион/см², плотностью тока в ионном пучке 10 мкА/см² в вакууме 10^{-5} Торр на импланторе Whickham (Англия). Детали ионного синтеза МН в диэлектриках приведены в работе [5]. Глубина залегания металлических наночастиц в стёклах для данной энергии имплантации, составившая величину порядка 60 нм, была оценена путём теоретических расчётов по программе DYNA, а также измерена экспериментально методом обратного резерфордского рассеяния [6]. Как следует из электронно-микроскопических наблюдений, размер синтезированных МН лежит в диапазоне от 2 до 18 нм [7]. Измерение оптического пропускания образцов проводилось на двухлучевом спектрофотометре Perkin Elmer Lambda 19 в области длин волн 300–1100 нм.

Для определения нелинейно-оптического поглощения МН была использована установка Z-сканирования, работающая по методике с открытой диафрагмой, физические принципы измерения на которой подробно описаны в работе [8]. В данной работе были использованы импульсы второй гармоники ($\lambda = 532$ нм) с длительностью 55 пс Nd:YAG лазера. Для исключения влияния тепловых эффектов на результаты измерений, частота следования импульсов не превышала 2 Гц. Интенсивности излучения лазера, при которых проводились измерения, лежали в интервале $5 \cdot 10^8$ – $2 \cdot 10^{10}$ Вт/см². Заметим, что превышение верхнего предела приводило к оптическому пробое композиционных материалов. Каждая точка на экспериментальных зависимостях соответствует усреднённому значению по 20 лазерным импульсам. Во время эксперимента лазерное излучение длиннофокусной линзой фокусируется на образец, который плавно перемещается через её фокус вдоль оптической оси z . Изменение интенсивности лазерного излучения, прошедшего через образец, возникающее вследствие нелинейного поглощения в образце, оказывается тем сильнее, чем ближе положение образца к фокусу линзы, где интенсивность лазерного луча максимальна. Экспериментальные зависимости нормализованного пропускания $T(z)$ построены как функции положения образца z по отношению к фокусу линзы, а также для фиксированного положения образца в фокусе линзы, но для различных значений интенсивности лазера.

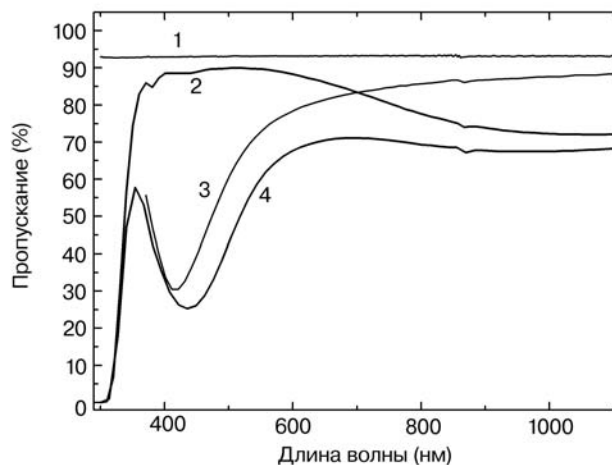


Рис. 2. Спектры оптического пропускания СС (1), НКСС (2), Ag:СС (3) и Ag:НКСС (4).

Экспериментальные результаты и обсуждение

Формирование наночастиц серебра в имплантированных стёклах было доказано появлением в линейных оптических спектрах пропускания селективных полос с минимумами в области 400–440 нм, обусловленных ППР поглощением в МН (рис. 2). Вследствие более высокого значения показателя преломления НКСС ($n_0 = 1.54$) максимум ППР частиц серебра располагается в более длинноволновой области спектра по сравнению с МН в СС ($n_0 = 1.5$).

На рис. 3 представлена экспериментальная зависимость $T(z)$, измеренная для стёкол с наночастицами серебра при интенсивности падающего лазерного излучения $I_0 = 2.5 \cdot 10^9$ Вт/см². Схема с открытой диафрагмой

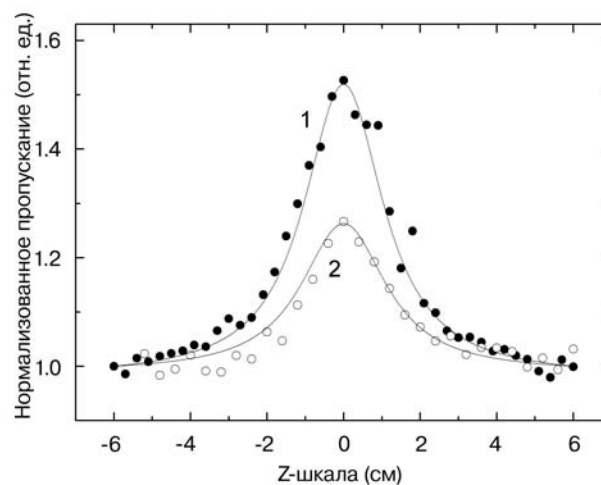


Рис. 3. Зависимость нормализованного пропускания от положения образцов Ag:НКСС (1) и Ag:СС (2) в схеме с открытой диафрагмой для лазерного излучения с интенсивностью $2.5 \cdot 10^9$ Вт/см². Сплошная кривая – расчёт, точки – эксперимент.

позволяет исследовать мнимую часть комплексной нелинейной восприимчивости третьего порядка, отвечающую за нелинейные процессы, связанные с нелинейным поглощением. Из формы кривой $T(z)$ в виде колокола, обращённого вершиной вверх, можно заключить об увеличении пропускательной способности образцов при приближении последних к фокусу линзы по z -шкале. Такое поведение $T(z)$ свидетельствует о проявлении образцами нелинейного насыщенного поглощения ($\alpha_{\text{нп}}$), и этот эффект более выражен для Ag:НКСС.

Для определения величины $\alpha_{\text{нп}}$ композиционных материалов воспользуемся выражением для $T(z)$, которое в общем случае при измерении по схеме с открытой диафрагмой может быть представлено в виде [8, 9]

$$T(z) = q(z)^{-1} \ln(1 + q(z)), \quad (1)$$

где $q(z) = \beta I(z) L_{\text{eff}}$ – параметр лазерного пучка; β – нелинейный коэффициент поглощения в общем случае; $I(z)$ – интенсивность света, прошедшего через образец в зависимости от его положения по координате z ; $L_{\text{eff}} = [1 - \exp(-\alpha_0 L)] / \alpha_0$ – эффективная толщина образца; α_0 – линейный коэффициент поглощения; L – реальная толщина рабочего слоя стекла с МН (60 нм). Параметр $q(z)$ описывает фокусирование лазерного луча с гауссовым распределением интенсивности по его сечению в фокусе линзы [8]

$$1/q = 1/P - 2\lambda\Delta/\phi\pi w^2 - i\lambda/\pi w^2, \quad (2)$$

где $P(z) = z(1 + z_0^2/z^2)$ – радиус кривизны волнового фронта на координате z ; $z_0 = k w^2/2$ – дифракционная длина пучка; k – волновой вектор; $\Delta\phi = \Delta\Phi_0/(1 + z^2/z_0^2)$; $\Delta\Phi_0$ – фазовый сдвиг электромагнитной волны, прошедшей через образец; $w(z) = w_0(1 + z^2/z_0^2)$ – радиус пучка в точке z ; w_0 – радиус пучка в фокусе на уровне спада интенсивности в $1/e^2$ раз.

На практике определение нелинейного поглощения проще проводить по параметрам выражения (1), измеренным в точке фокуса линзы, т.е. когда $z = 0$. Для этого случая выражение для нормализованного пропускания имеет вид:

$$T_0 = q_0^{-1} \ln(1 + q_0) = (\beta I_0(0) L_{\text{eff}})^{-1} \ln(1 + \beta I_0(0) L_{\text{eff}}), \quad (3)$$

которое используется для определения $\beta = \alpha_{\text{нп}}$. Полученные таким образом значения $\alpha_{\text{нп}}$ для интенсивности лазерного излучения $2.5 \cdot 10^9$ Вт/см² для Ag:НКСС и Ag:СС составили соответственно $6.7 \cdot 10^{-5}$ см/Вт и $3.6 \cdot 10^{-5}$ см/Вт. Принимая во внимание, что $\text{Im}\chi^{(3)} = n_0 \epsilon_0 \chi \lambda \alpha_{\text{нп}} / 2\pi$, где n_0 – линейный показатель преломления среды, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, c – скорость света, также были рассчитаны мнимые части значения нелинейной восприимчивости для исследуемых композиционных материалов, составивших $2.4 \cdot 10^{-8}$ и $1.3 \cdot 10^{-8}$ ед. СГСЭ, соответственно.

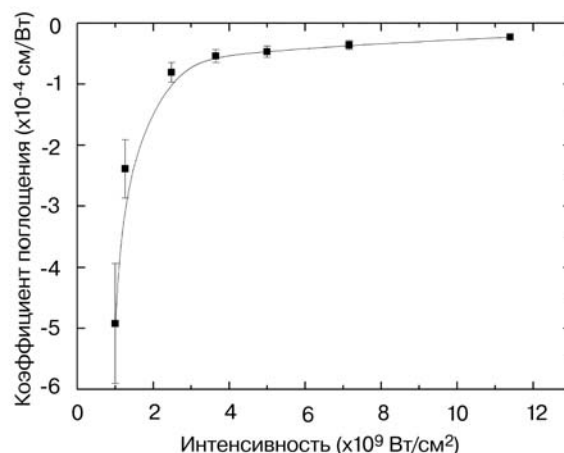


Рис. 4. Зависимость нелинейного коэффициента поглощения в Ag:НКСС от интенсивности лазерного излучения.

Для эффективного использования композиционных материалов в качестве активных оптических элементов требуется определить области интенсивностей лазерного излучения, в которых данные элементы способны проявлять нелинейно-оптические свойства. При этом нижняя граница интенсивности излучения определяется пороговым значением развития нелинейного процесса в материале, а верхняя граница определяется интенсивностью, при которой возникает оптический пробой. Результаты измерения $\alpha_{\text{нп}}$ в зависимости от интенсивности лазерного излучения приведены на рис. 4 и 5. В наших экспериментах интенсивность лазерного излучения варьировалась от 10^9 и до $2 \cdot 10^{10}$ Вт/см². В обоих типах композиционных материалов наблюдается существенное уменьшение $\alpha_{\text{нп}}$ с ростом интенсивности. В частности, это уменьшение составляет примерно 21 и 12 раз при $I_0 = 1.15 \cdot 10^{10}$ Вт/см² для Ag:НКСС и Ag:СС, соответственно, по сравнению с $\alpha_{\text{нп}}$, измеренного при $I_0 = 1 \cdot 10^9$ Вт/см².

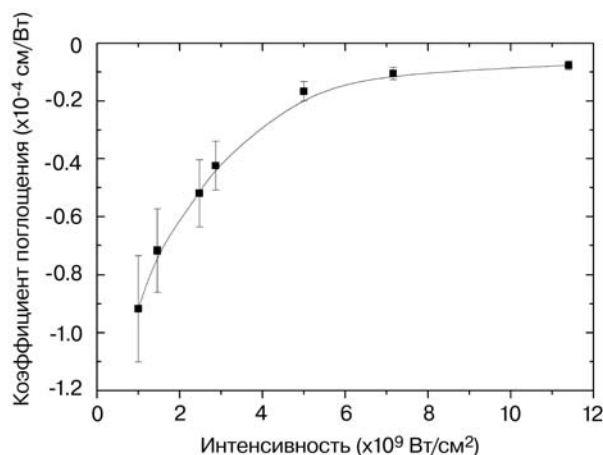


Рис. 5. Зависимость нелинейного коэффициента поглощения в Ag:СС от интенсивности лазерного излучения.

Проведённые ранее исследования зависимости нелинейно-оптических параметров наночастиц серебра в коллоидных растворах от интенсивности наносекундного излучения на длине волны 532 нм [10, 11] показало изменение знака $\text{Im}\chi^{(3)}$ с положительного при малых интенсивностях облучения на отрицательный (насыщенное поглощение) при повышении интенсивности. Данный эффект был связан с фотофрагментацией коллоидных МН и их агрегацией в растворе. Однако этих механизмов недостаточно для объяснения изменения знака нелинейного показателя поглощения в случае композиционных материалов, в которых МН диспергированы в твёрдой матрице. Необходимо также учитывать электронные эффекты, которые реализуются непосредственно в МН.

Ранее, при анализе нелинейно-оптических свойств системы МН в диэлектрике методом вырожденного четырёхволнового смешивания частот [12], было высказано предположение о том, что, если частота лазерного излучения близка к частоте ППР МН в условиях однофотонного резонанса, нелинейное поглощение оказывается отрицательным, поскольку действует механизм насыщенного поглощения. Данное предположение хорошо согласуется с наблюдаемым нелинейным поглощением (рис. 3), а также зависимостями на рис. 4 и 5 для случая низких интенсивностей лазерного излучения. Однако из наблюдаемого уменьшения $\alpha_{\text{нл}}$ с ростом интенсивности (рис. 4 и 5) нельзя сделать однозначного заключения о проявлении только одного механизма нелинейного поглощения, а именно механизма насыщенного поглощения. Логично предположить, что доминирующим механизмом нелинейного поглощения в МК при более высоких интенсивностях лазерного излучения оказывается двухфотонное поглощение, которое чаще всего действует в системах с МН. Ранее было предсказано [13], что доминирующий вклад в нелинейную восприимчивость третьего порядка для НЧ меди при интенсивных возбуждениях на частотах, близких к ППР, обусловлен горячими электронами. Возможно, что наблюдаемые в настоящей работе особенности проявления нелинейного поглощения в МН, связаны также с вкладом в поглощение горячих электронов. Однако, к настоящему времени в научной литературе нет еще устоявшейся точки зрения на вариации нелинейных механизмов, проявляющихся в МН.

Таким образом, впервые обнаружено и исследовано проявление насыщенного нелинейного поглощения при лазерном облучении в диапазоне интенсивностей от 10^9

и до $2 \cdot 10^{10}$ Вт/см² на длине волны 532 нм в стекле с наночастицами серебра. Показано, что для исследованных образцов с повышением интенсивности лазерного излучения ($I \geq 2.5 \cdot 10^{10}$ Вт/см²) проявляется нелинейное насыщенное поглощение, приводящее к просветлению образца. Однако, дальнейшее повышение интенсивности излучения приводит к снижению насыщенного поглощения и доминирующим становится двухфотонное поглощение. Такое поведение нелинейных свойств МН позволяет использовать подобные фотонные среды в качестве материалов, обеспечивающих синхронизацию мод в пикосекундных генераторах.

Работа была поддержана проектами РФФИ (№ 04-02-97505-р и № 06-02-08147-офи) и Программой ОФН “Новые материалы и структуры”. Хотелось бы также поблагодарить Немецкий научный фонд им. Александра Гумбольдта и Австрийский научный фонд по программе им. Лизы Майтнер. Выражаем признательность за помощь в проведении ряда экспериментов Р. А. Ганееву (НПО Академприбор, Ташкент) и А. И. Ряснянскому (Самаркандский государственный университет, Самарканд).

Литература

1. Haglund Jr.R.F.: Optics of small particles, interfaces and surfaces (Hummel R.E., Wissmann P., eds.), vol. II, pp. 192–231. London: CRC Press 1997.
2. von Neumann J.: Fundamentals of photonics (Saleh B.E.A., Teich M.C., eds.). New York: Wiley 2001. 856 p.
3. Ganeev R.A., Rysanyanskii A.I., Stepanov A.L., Usmanov T.: Phys. Stat. Sol. B **241**, R1–R2 (2004)
4. Hamanaka Y., Hayashi N., Nakamura A., Omi S.: J. Luminescence **87–89**, 859–861 (2000)
5. Stepanov A.L.: Functional properties of nanostructured materials (Kassing R., Petkov P., eds.), pp. 139–160. NATO ASI. Dordrecht, the Netherlands: Springer 2006.
6. Степанов А.Л., Жихарев В.А., Хайбуллин И.Б.: ФТТ **43**, 733–738 (2001)
7. Nistor L.C., van Landuit J., Barton J.D., Hole D.E., Skelland N.D., Townsend P.D.: J. Non-Cryst. Solids **162**, 217–226 (1993)
8. Sheik-Bahae M., Said A.A., Wei T., Hagan D.J., Van Stryland E.W.: IEEE J. Quantum Electron. **26**, 760–769 (1990)
9. Stepanov A.L., Ganeev R.A., Rysanyanskii A.I., Usmanov T.: Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **206**, 624–628 (2003)
10. Danilova Yu.E., Lepeshkin N.N., Rautian S.G., Safonov V.P.: Physica A **241**, 231–235 (1997)
11. Link S., Mohamed M.B., Nikoobakht B., El-Sayed M.A.: J. Phys. Chem. **103**, 1165–1171 (1999)
12. Uchida K., Kaneko S., Omi S., Hata C., Tanji H., Asahara Y., Ikushima A.J., Tokizaki T., Nakamura A.: J. Opt. Soc. Am. B **11**, 1236–1243 (1994)
13. Eesley G.L.: Phys. Rev. B **33**, 2144–2152 (1986)

Динамика фотоионизации и нагрева при лазерном отжиге имплантированного кремния

Р. М. Баязитов, Р. И. Баталов, И. Б. Хайбуллин

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория интенсивных радиационных воздействий и лаборатория радиационной физики

В данной работе впервые с использованием метода полного внутреннего отражения зондирующего излучения изучена кинетика изменения оптических свойств полупроводниковых структур (имплантированных слоёв кремния) при импульсном лазерном воздействии. Определены зависимости моментов фазовых переходов и плотности электронно-дырочных пар от уровня лазерного возбуждения, а также температурная зависимость коэффициента поглощения кремния вблизи точки плавления.

Введение

Процессы импульсной модификации материалов в значительной мере определяются пространственным распределением поглощённой в них энергией излучения. Распределение плотности поглощённой энергии по глубине определяет направление и скорости фазовых переходов, что, в свою очередь, определяет структуру и свойства импульсно модифицированных материалов. Особенно это касается полупроводниковых кристаллов, в которых поглощательная способность лазерного излучения резко (на несколько порядков величины) зависит от уровня плотности мощности излучения, достигаемой температуры нагрева, степени дефектности обрабатываемых слоёв, плотности генерированной электронно-дырочной плазмы. В целях установления указанных зависимостей необходимо проведение исследования динамики поглощения зондирующих излучений непосредственно во время воздействия мощными пучками лазерного излучения на полупроводниковые структуры. Обычно эти процессы исследуются с использованием времяразрешённой регистрации отражательной способности зондирующего излучения, направленного на облучаемую область [1]. Однако при этом получаемая информация свидетельствует, в основном, о времени прохождения точек фазовых переходов на поверхности материала. В то же время вопрос о роли плотной электронно-дырочной плазмы в процессах лазерного отжига до настоящего времени остаётся дискуссионным [2]. В частности, определение плотности фотогенерированной электронно-дырочной плазмы и времени её жизни требует дополнительных измерений.

Для получения более полной информации необходимо изучение динамики изменения поглощательной способности зондирующего излучения, направленного со стороны подложки. Причём, для исключения неопределённости отражения от облучаемого слоя, предпочтительно исследовать отражательную способность зондирующего излучения в условиях его полного внутреннего отражения. Такие исследования позволят определить не только моменты фазовых переходов, но и зависимость

плотности генерированной электронно-дырочной плазмы от уровня возбуждения, а также зависимости поглощательной способности материала от температуры, развиваемой в процессе импульсной обработки.

В данной работе указанные исследования проведены на кристаллах кремния, имплантированных легирующими примесями в типовых условиях имплантации. Для интерпретации полученных экспериментальных данных и определения оптических параметров кристалла и электронно-дырочной плазмы проводилось компьютерное моделирование процессов импульсного нагрева облучаемых структур с одновременным прохождением зондирующего луча. Полученные результаты необходимы для развития новых методов лазерных обработок тонкоплёночных полупроводниковых структур.

Методика эксперимента и компьютерного моделирования

Для проведения экспериментов по оптическому зондированию использовались образцы кремния, имплантированные в типовых условиях имплантации. Пластины кремния с ориентацией (111), легированные бором ($\rho = 10 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, толщина пластин 0.35 мм), были имплантированы ионами сурьмы (Sb^+) с энергией $E = 30 \text{ кэВ}$ и дозой $\Phi = 6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Импульсный лазерный отжиг имплантированных пластин Si был проведён при комнатной температуре одиночными импульсами излучения рубинового лазера ($\lambda = 0.69 \text{ мкм}$, $\tau = 80 \text{ нс}$, $W = 0.1 \div 3 \text{ Дж/см}^2$) в экспериментальных условиях [3, 4]. Неоднородность распределения энергии в лазерном пятне диаметром 4.5 мм была не выше $\pm 5\%$.

Чтобы реализовать условия полного внутреннего отражения (ПВО) зондирующего излучения от имплантированной стороны пластины Si, использовалась отражательная призма, на гипотенузную грань которой обратной стороной устанавливалась пластина Si (рис. 1). Для образования оптического контакта между кристаллом Si и стеклом применялся тонкий слой глицерина. В область лазерного отжига с обратной стороны пластины

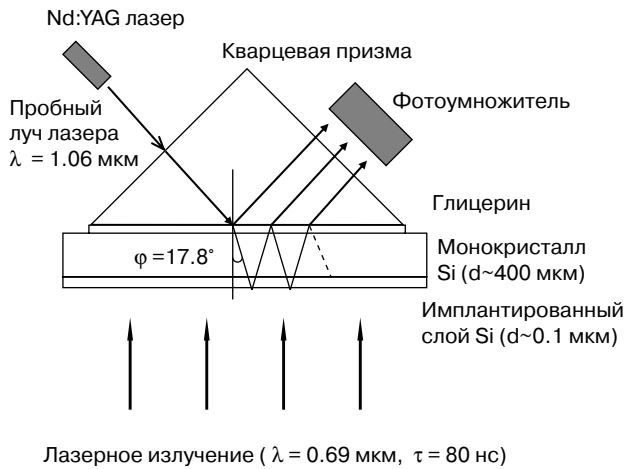


Рис. 1. Схема эксперимента по оптическому зондированию имплантированного и лазерно-отожжённого слоя Si в условиях полного внутреннего отражения зондирующего лазерного пучка.

через катетную грань призмы, под углом 45° , направлялся пучок зондирующего излучения (ЗИ) р-поляризации ($\lambda = 1.06$ мкм, $\tau = 0.5$ мс), сфокусированный линзой с $f = 25$ см в пятно размером ~ 1 мм; исходный диаметр пучка 1.5 см. Отражённая часть потока ЗИ, выходящего через вторую катетную грань призмы, детектировалась фотоумножителем, соединённым с входом запоминающего осциллографа. Согласно расчётам, угол ПВО в монокристалле Si составляет 16.5° . Угол преломления пучка ЗИ при переходе из стекла в Si, составляет 17.8° , т.е. условие ПВО для ЗИ в Si выполняется. Исследование динамики лазерного отжига проводилось на экспериментальной базе Института электроники НАН Беларуси совместно с Г. Д. Ивлевым.

Компьютерное моделирование фото- и термовозбуждения кремния при лазерном воздействии проводилось путём численного решения одномерной задачи теплопроводности с учётом фазовых переходов, температурных зависимостей оптических и теплофизических параметров имплантированного (аморфного) слоя и кристалла, формы лазерного импульса и дополнительного поглощения ЗИ на термо- и фотогенерируемых носителях. Временная форма импульса аппроксимировалась гауссовой функцией вида:

$$I(t) = \frac{W}{0.6\tau\sqrt{\pi}} \exp\left[-\left(\frac{t}{0.6\tau} - 2\right)^2\right], \quad (1)$$

где W – плотность энергии импульса, τ – длительность импульса на полувысоте. Генерация свободных носителей обусловлена межзонным поглощением излучения рубинового лазера в имплантированном слое толщиной ~ 0.1 мкм и в монокристалле Si. Поскольку достигаемая концентрация свободных носителей превышает 10^{19} см $^{-3}$, время их рекомбинации, определяемое Оже-процессами, значительно меньше длительности импульса. Таким об-

разом, концентрация фотогенерированных носителей n зависит лишь от интенсивности I и коэффициента межзонного поглощения (α_i) возбуждающего излучения в кремнии:

$$n(x, t) = \left(\frac{I(x, t)\alpha_i}{\gamma eh\nu}\right)^{1/3}, \quad (2)$$

где $\gamma = 4 \cdot 10^{-31}$ см ^{6} /с – коэффициент Оже-рекомбинации [5], $\alpha_i = 10^4$ см $^{-1}$ для $\lambda = 0.69$ мкм.

Одновременно рассчитывалась отражательная способность образца R для ЗИ, которая определялась прохождением излучения через нагретую и фотовозбуждённую область в прямом (со стороны подложки) и обратном (со стороны имплантированного слоя) направлениях. Коэффициент поглощения $\alpha(T, n)$ определяется суммой коэффициента собственного (i) поглощения ЗИ и коэффициента поглощения на свободных носителях (f_c) с известным сечением поглощения для излучения с длиной волны $I = 1.06$ мкм [5]

$$\alpha(T, n) = \alpha_i(T) + \alpha_{fc}(T, n). \quad (3)$$

В расчётах использовались хорошо известные на данный момент теплофизические и оптические параметры кремния, их температурные зависимости, а также сечения взаимодействия с генерированной электронно-дырочной плазмой. Поэтому подгоночные параметры расчётов не использовались.

Результаты исследований

До начала лазерного воздействия исходный коэффициент отражения ЗИ от образца R приближается к 40%. Его величина обусловлена отражением ЗИ при переходе из стекла в пластину Si ($\sim 7\%$) и ПВО от имплантированной стороны, уменьшенным за счёт многократного прохождения через образец ($\sim 30\%$). При прохождении через образец основной вклад (более 90%) даёт двукратное прохождение ЗИ. Ослабление ЗИ обусловлено, в основном, собственным поглощением Si при комнатной температуре (~ 10 см $^{-1}$). При лазерном воздействии на образец возникает дополнительное поглощение ЗИ в возбуждённом слое ($\sim 2-3$ мкм). Оно связано с фотогенерацией свободных носителей и с температурным сужением запрещённой зоны Si. При образовании жидкой фазы ПВО (100%) меняется на отражение ЗИ от границы раздела расплав-кристалл (35%). На представленных осциллограммах (рис. 2), в ситуации, когда образуется расплавленный слой ($T_{пл} = 1410$ °C), например, при плотности энергии облучения $W = 1.8$ Дж/см ^{2} , интенсивность отражённого ЗИ в течение фазовых переходов (~ 230 нс) плавление – эпитаксиальная кристаллизация почти не меняется. При образовании расплавленного слоя коэф-

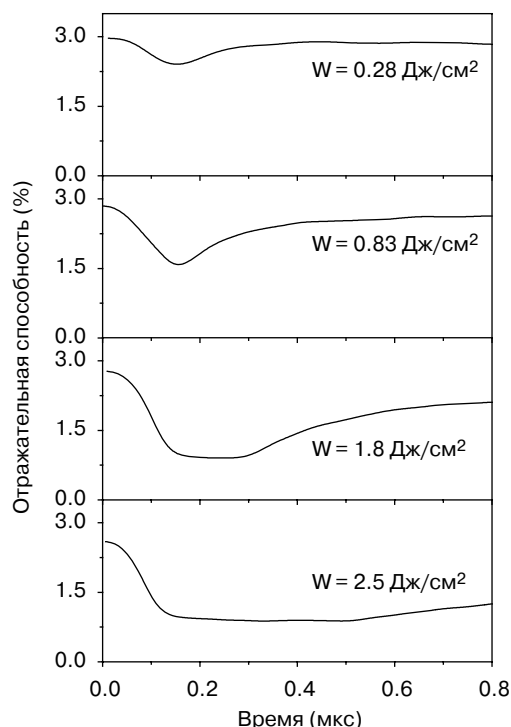


Рис. 2. Осциллограммы, характеризующие динамику отражательной способности имплантированного Si при лазерном воздействии с различной плотностью энергии.

коэффициент отражения ЗИ уменьшается примерно в 3 раза относительно исходного. Если плавление Si не достигается ($W = 0.28$ Дж/см²), нагрев незначителен ($T < 370$ °C) и коэффициент отражения определяется, в основном, поглощением на свободных носителях.

Расчётная динамика отражательной способности (рис. 3) показывает, что при низкой плотности энергии в импульсе 0.13 Дж/см², что почти на порядок ниже порога

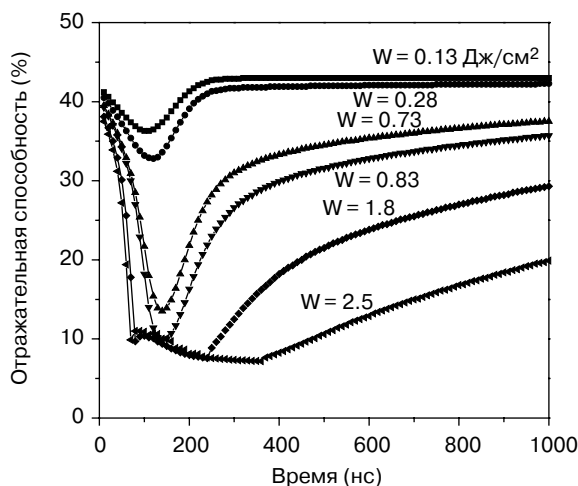


Рис. 3. Расчётные временные зависимости, описывающие динамику внутреннего отражения и поглощения зондирующего излучения при различных значениях плотности энергии воздействующего импульса рубинового лазера.

плавления кремния (достигаемая температура не превышает 170 °C), поглощение ЗИ определяется фотогенерированными свободными носителями с концентрацией до $3 \cdot 10^{19}$ см⁻³. Временная зависимость концентрации и отражательной способности практически повторяет форму возбуждающего импульса, что свидетельствует о действии быстрых каналов рекомбинации ($< 10^{-8}$ с). При высоких уровнях возбуждения, приводящего к плавлению приповерхностного слоя, поглощение, в основном, обусловлено температурным сужением запрещённой зоны Si, а его временной спад связан с диффузией тепла вглубь кристалла. Сравнение с экспериментальными данными (рис. 2) даёт хорошее соответствие в отношении длительности существования расплава, величины отражательной способности во время плавления, и характера её роста после завершения плавления.

Некоторое различие в абсолютной величине экспериментальных и расчётных данных для отражения от расплава ($\sim 15\%$ и 10%) связано с недостатком данных температурной зависимости $\alpha(T)$ для излучения с $\lambda = 1.06$ мкм. В расчётах везде использовалась зависимость

$$\alpha(T) = 10.7 \left(\frac{T}{300} \right)^{4.5}, \quad (4)$$

которая справедлива лишь для $T < 500$ К [5], что приводит к заниженным значениям отражательной способности при высоких плотностях энергии. Более точное согласие с экспериментом даёт подгонка зависимостью

$$\alpha(T) = 20 \left(\frac{T}{300} \right)^3, \quad (5)$$

при $T > 500$ К.

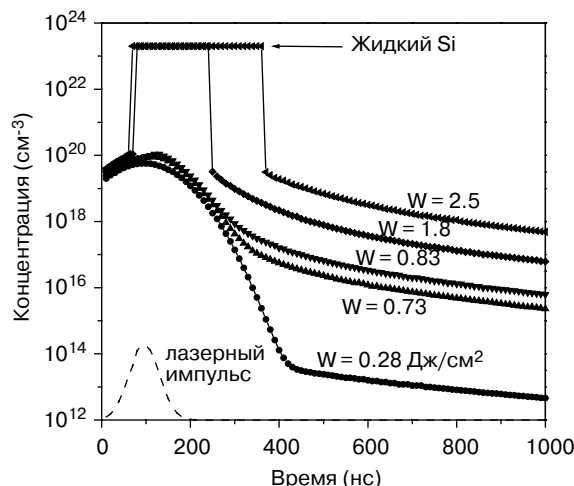


Рис. 4. Расчётные временные зависимости концентрации свободных носителей генерированных лазерным излучением при различных значениях плотности энергии воздействующего импульса рубинового лазера.

На рис. 4 наглядно представлена временная зависимость концентрации фото- и термогенерированных свободных носителей. Во время действия лазерного импульса концентрация носителей быстро достигает значений $\sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и повторяет форму импульса. При малых плотностях энергии ($W < 0.5 \text{ Дж/см}^2$) основной вклад в поглощение ЗИ дают фотогенерированные носители, а при больших плотностях энергии – собственное поглощение нагреваемого (свыше 500°C) кристаллического Si и расплава. По окончании импульса концентрация фотогенерированных носителей быстро падает и поглощение обусловлено, в основном, собственным поглощением нагретого кремния.

Выводы

Впервые методом зондирования в условиях полного внутреннего отражения света изучена динамика лазерного отжига имплантированного кремния. Полученные данные согласуются с результатами компьютерного моделирования, основанного на тепловой модели лазерного отжига.

Проведена оценка концентрации фото- и термогенерированных свободных носителей при лазерном отжиге имплантированного кремния. Установлено, что при типовых условиях наносекундного лазерного отжига концентрация носителей в кристалле не превышает значений $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. При этом время рекомбинации электронно-дырочных пар не превышает длительности лазерного импульса ($< 10^{-8} \text{ с}$).

Проведена оценка температурной зависимости собственного поглощения света ($\lambda = 1.06 \text{ мкм}$) в кремнии при повышенной (свыше 500 K) температуре.

Литература

1. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И.: ФТП **37**(5), 622–628 (2003)
2. Авсаркисов С.А., Джибути З.В., Долидзе Н.Д., Цеквава Б.Е.: ПЖТФ **32**(6), 55–60 (2006)
3. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Чапланов А.М.: Квантовая электроника **22**(8), 805–809 (1995)
4. Bayazitov R.M., Batalov R.I., Khaibullin I.B., Ivlev G.D., Dezsi I., Kotai E.: J. Phys. D: Appl. Phys. **36**, 468–471 (2003)
5. Meyer J.R., Krueger M.R., Bartoli F.J.: J. Appl. Phys. **51**, 5513–5522 (1980)

Магнитные свойства кремния, имплантированного ионами железа в магнитном поле

Г. Г. Гумаров, В. Ю. Петухов, В. А. Жихарев, Е. П. Жеглов, И. Б. Хайбуллин

Отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной химии и радиобиологии
и лаборатория радиационной физики

Методом ионно-лучевого синтеза в магнитном поле получены тонкие плёнки силицидов железа. Синтезированные плёнки исследовались методами ферромагнитного резонанса, рентгеновской дифракции, мёссбауэровской спектроскопии и автодиным способом измерения магнитной восприимчивости. Обнаружено влияние постоянного магнитного поля, приложенного к образцу в процессе ионно-лучевого синтеза, на магнитные характеристики полученных тонких плёнок силицидов железа. Полученные плёнки обладают магнитной анизотропией, которая может быть объяснена наличием наведённой магнитной анизотропии и магнитокристаллической анизотропии соединения Fe_3Si .

Введение

Исследования низкоразмерных магнитных структур имеют большое фундаментальное и прикладное значение, в особенности в связи с развитием наноструктурной магнитной записи и сенсорных устройств [1, 2]. Особенно интенсивно исследуются магнитные многослойные структуры и сплавы, содержащие 3d-переходные металлы. Так как магнитные свойства материалов в значительной мере определяются их микроструктурой, изменения в кристаллической структуре могут быть использованы в качестве средства для управления магнитными свойствами. Одним из высокоэффективных методов модификации магнитных свойств тонких плёнок и многослойных структур является ионная имплантация [3, 4].

В работе [3] было показано, что ферромагнитные частицы силицидов железа могут быть сформированы методом ионно-лучевого синтеза (ИЛС) в кремниевой подложке. При этом было установлено влияние условий и режимов имплантации, таких как энергия ионов, плотность ионного тока, температура подложки в процессе имплантации, на возникновение различных силицидных фаз и степень их кристалличности [5]. С другой стороны, для управления магнитными свойствами как объёмных магнетиков, так и тонких ферромагнитных плёнок, применяется термомагнитная обработка, т.е. термический отжиг в постоянном магнитном поле [6]. Однако при термомагнитной обработке, происходящей обычно при достаточно высоких температурах, формирование метастабильных фаз, которые часто обладают уникальными свойствами, не происходит. Кроме того, такой отжиг не позволяет создавать наноразмерные участки с различными магнитными характеристиками, например, с различным направлением намагниченности, хотя такие наноструктурированные в магнитном отношении частицы являются весьма перспективными объектами для создания сред, пригодных для нанoeлектроники.

В связи с этим задачей данной работы является изучение влияния внешнего магнитного поля на процессы формирования и магнитные свойства и структуру ферромагнитных плёнок, полученных методом ИЛС.

Методика эксперимента

Имплантация пластин кремния Si (111) проводилась ионами Fe^+ с энергией 40 кэВ. Плотность ионного тока составляла 2–5 мкА/см², доза имплантации $3 \cdot 10^{17}$ см⁻². Поскольку имплантация проводилась при небольших плотностях ионного тока и держатель образцов, на котором крепились исходные пластины кремния, охлаждался водой, разогрева пучком образцов не происходило, т.е. температура подложек поддерживалась при комнатной температуре. Это обуславливает мелкодисперсный характер синтезируемых тонких плёнок и слабую степень их кристалличности, что значительно усложняет исследование таких структур дифракционными методами, приводя к слабой интенсивности линий и к их большой ширине.

В процессе имплантации к образцам прикладывалось магнитное поле, ориентированное параллельно либо перпендикулярно поверхности образца. Напряжённость магнитного поля, создаваемого электромагнитом, варьировалась от 0 до 200 Э.

Для исследования фазового состава применялась рентгеновская дифракция при скользящих лучах на дифрактометре ДРОН-3М (Cu K α LiF монохроматор) и селективная по глубине мёссбауэровская спектроскопия конверсионных электронов (МСКЭ). Магнитные свойства полученных образцов определялись методом ферромагнитного резонанса (ФМР) на спектрометре Е-12 фирмы Вариан на частоте 9.5 ГГц, магнитная восприимчивость измерялась методом автодинного генератора.

Результаты

На рентгеновских дифрактограммах образцов кремния, имплантированных ионами железа в магнитном поле, обнаруживаются несколько линий слабой интенсивности [7]. Наблюдаемые линии могут быть отнесены к двум фазам с кубической структурой: ферромагнитному Fe_3Si и парамагнитному моносилициду железа FeSi . При этом наблюдаются некоторые различия в дифрактограммах от тонких плёнок, синтезированных при различных направлениях магнитного поля относительно поверхности кремниевой пластины. А именно, для образца кремния, имплантированного в магнитном поле величиной 35 Э, приложенном вдоль поверхности, наблюдаются также линии, которые могут быть отнесены к фазе Fe_5Si_3 , обладающей дигексагонально-дипирамидальной структурой.

Типичный мёссбауэровский спектр конверсионных электронов образцов, имплантированных в магнитном поле, приведён на рис. 1. Результат обработки спектров с использованием программы Univem приведён в таблице 1.

Из сопоставления полученных результатов с параметрами, приведёнными в литературе [7, 8], следует, что параметры дублета, соответствующие парамагнитной фазе, сопоставимы с данными для FeSi , а параметры зеемановской шестёрки линий близки к мёссбауэровским параметрам для Fe_3Si .

Для образцов кремния, имплантированных ионами железа с дозой $\sim 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ и при плотностях ионного тока $\leq 5 \text{ мкА/см}^2$, как при наложении магнитного поля, так и без него, наблюдается сигнал ФМР. Ранее было установлено [1], что этот сигнал обусловлен формированием ансамбля сферически несимметричных частиц ферромагнитной фазы.

Спектры ФМР снимались при различной ориентации магнитного поля спектрометра H_0 относительно нормали к поверхности исследуемых плёнок: а) $H_0 \perp n$;

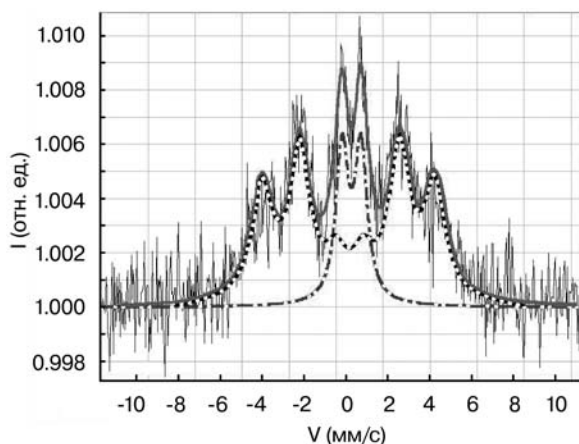


Рис. 1. Экспериментальный и модельные МСКЭ спектры Si, имплантированного ионами Fe^+ при $H_i \parallel n$. Штрих-пунктирная линия – дублет, соответствующий парамагнитной фазе, штриховая линия – зеемановская шестерка линий, соответствующая ферромагнитной фазе.

Таблица 1. Результат разложения (программа Univem) спектров МСКЭ кремния, имплантированного ионами Fe^+ при $H_i \parallel n$.

		I_s (мм/с)	Q (мм/с)	H (кЭ)	S (%)
Малая глубина	Дублет	0.21	0.7		29
	Секстет	0.21	0.00	230	71
Большая глубина	Дублет	0.14	0.7		37
	Секстет	0.03	0.00	235	63
Суммарное	Дублет	0.18	0.7		35
	Секстет	0.11	0.00	233	65

б) $H_0 \parallel n$. Эффективная намагниченность насыщения, рассчитанная по формулам Киттеля [9], составила для данного образца ~ 13200 Гс. При этом намагниченность насыщения зависит от направления магнитного поля H_i , приложенного к образцу в процессе имплантации. В случае, когда поле направлено перпендикулярно нормали к образцу ($H_i \perp n$), она составляет ~ 13300 – 13400 Гс, а в случае, если поле направлено параллельно нормали ($H_i \parallel n$), 11700 – 12500 Гс. Такие величины существенно больше, чем $4\pi M_{\text{эфф}}$ для образцов кремния, имплантированного без приложенного магнитного поля (~ 7000 Гс), и, в случае ($H_i \parallel n$), больше, чем для Fe_3Si (12.4 кГс). Ширина линии ФМР также зависит от направления приложенного поля в процессе имплантации – она составляет 20–40 Э при $H_i \parallel n$ и 75–120 Э при $H_i \perp n$. При этом измеренные значения ширины линии заметно меньше, чем для образцов, имплантированных без приложенного магнитного поля H_i , составившие ~ 100 – 500 Э.

Как известно [10], для измерения магнитной восприимчивости объектов, содержащих малое количество магнитного вещества, в частности тонких плёнок, может быть применён метод автодинного генератора. Используемый в данной работе автодинный способ измерения восприимчивости основан на измерении сдвига резонансной частоты колебательного контура, сердечником которого является исследуемый образец [8]. Частотный сдвиг при условии его малости будет пропорционален дифференциальной восприимчивости образца со знаком минус.

Угловая зависимость (в плоскости плёнки) частоты автодинного генератора, измеренная в поле $H_{\text{авто}} = 10$ Э, для образцов кремния, имплантированных ионами Fe^+ при $H_i \parallel n$, $H_i = 180$ Э, приведена на рис. 2. При этом поле H_i в первом случае (рис. 2а) было направлено вдоль базового среза исходной пластины Si (111); а во втором случае (рис. 2б) – перпендикулярно базовому срезу. Оказалось, что изменение ориентации кремниевой пластины при имплантации (поворот на 90°) оказывает существенное влияние на магнитную анизотропию синтезированных плёнок. А именно, в случае, когда поле параллельно базовому срезу, наблюдаются три оси лёгкого намагничивания (максимум кривой соответствует направлению оси легкого намагничивания (ОЛН)), а во втором – одна ОЛН, совпадающая по направлению с направлением магнитного поля, приложенного при имплантации.

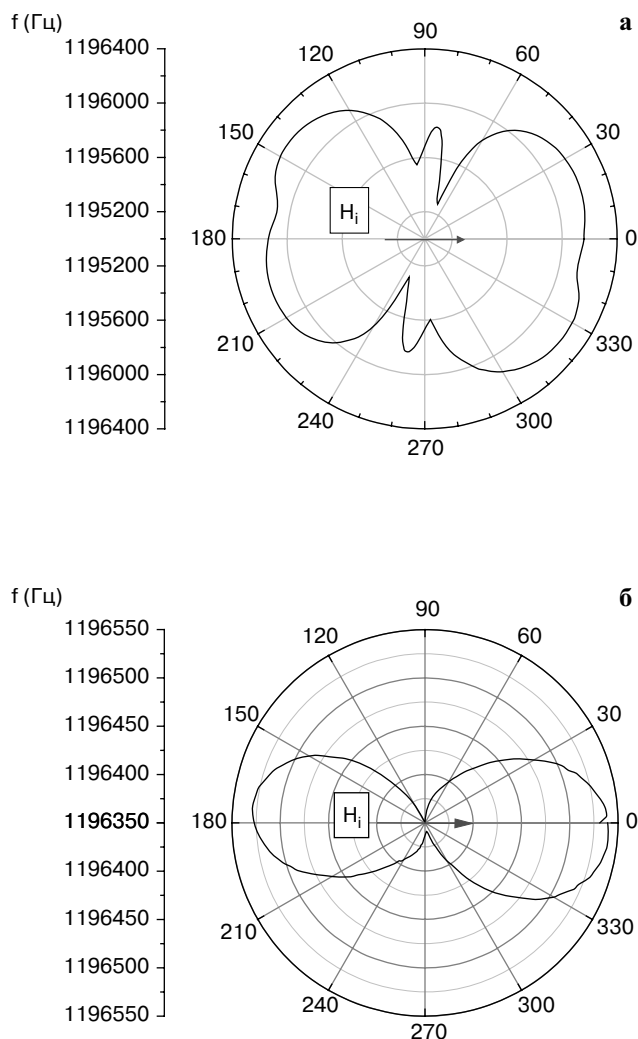


Рис. 2. Угловая зависимость (в плоскости плёнки) изменения частоты автодинного генератора, измеренная в поле 10 Э, для образца кремния, имплантированного ионами Fe^+ при $H_i \perp n$. **а** Поле H_i направлено вдоль базового среза исходной пластины Si; **б** поле H_i перпендикулярно базовому срезу.

Обсуждение результатов

Как видно из полученных угловых зависимостей частоты автодинного генератора, существует корреляция направлений ОЛН с направлением внешнего поля. Естественно полагать, что это связано с появлением наведённой одноосной магнитной анизотропии. Однако появление дополнительных максимумов на автодинных кривых требует отдельного рассмотрения.

Зависимость наблюдаемых кривых (рис. 2) от ориентации исходной кремниевой пластины относительно внешнего магнитного поля указывает на связь с магнитокристаллической анизотропией синтезируемых соединений. Поскольку основной ферромагнитной фазой в образце является Fe_3Si , можно предположить, что это соединение образует текстуру в исходном монокристаллическом кремнии. Такое предположение хорошо согласуется с тем фактом, что интерметаллическое соедине-

ние Fe_3Si имеет кубическую структуру с постоянной решётки $a = 0.565$ нм, очень близкой к постоянной решётки исходного монокристаллического кубического кремния ($a = 0.543$ нм). Поэтому можно предположить, что ионносинтезированные частицы Fe_3Si имеют преимущественную ориентацию, совпадающую с ориентацией исходной пластины монокристаллического Si, вырезанной вдоль плоскости (111).

Для кубических кристаллов плотность энергии магнитокристаллической анизотропии в сферической системе координат имеет вид [9]:

$$U_{\text{МК}} = \frac{1}{4} K_1 (\sin^2 2\Theta + \sin^4 \Theta \sin^2 2\varphi) + \frac{1}{16} K_2 \sin^2 2\Theta \sin^2 \Theta \sin^2 2\varphi = K_1 F_1 + K_2 F_2, \quad (1)$$

где K_1 и K_2 – первая и вторая константы магнитокристаллической анизотропии; Θ – полярный угол, отсчитываемый от направления [001]; φ – азимутальный угол, отсчитываемый от направления [100] в плоскости (001). Упрощённо проекцию плотности энергии U на плоскость (111) можно представить в виде:

$$U_{\text{МК}}^{(111)} = K \sin^2 3\psi, \quad (2)$$

где ψ – угол в плоскости (111), отсчитываемый от направления [111].

С другой стороны, плотность энергии наведённой (одноосной) анизотропии может быть представлена в виде:

$$U_{\text{НАВ}} = K \sin^2 \psi. \quad (3)$$

Общая угловая зависимость будет определяться суммой функций (2) и (3), взятых с различными весами $a_{\text{МК}}$ и $a_{\text{НАВ}}$:

$$U = a_{\text{МК}} U_{\text{МК}}^{(111)} + a_{\text{НАВ}} U_{\text{НАВ}}.$$

Наилучшее согласие с формой полученных кривых удаётся получить при $a_{\text{МК}} = 0.3$ и $a_{\text{НАВ}} = 0.7$ (рис. 3).

Двухосная анизотропия, являющаяся суперпозицией наведённой одноосной и магнитокристаллической анизотропии ОЦК фазы, наблюдалась также в работе Р. Гупты [10]. В этой работе плёнки $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{50}$ толщиной ~ 70 нм, нанесённые электронно-лучевым способом, бомбардировались ионами Xe^+ в магнитном поле величиной 100 Э. Методом эффекта Керра наблюдались две взаимно перпендикулярные оси лёгкого намагничивания, одна из которых совпадает с направлением магнитного поля, приложенного при имплантации.

Появление наведённой анизотропии в образцах, синтезированных при относительно малых величинах маг-

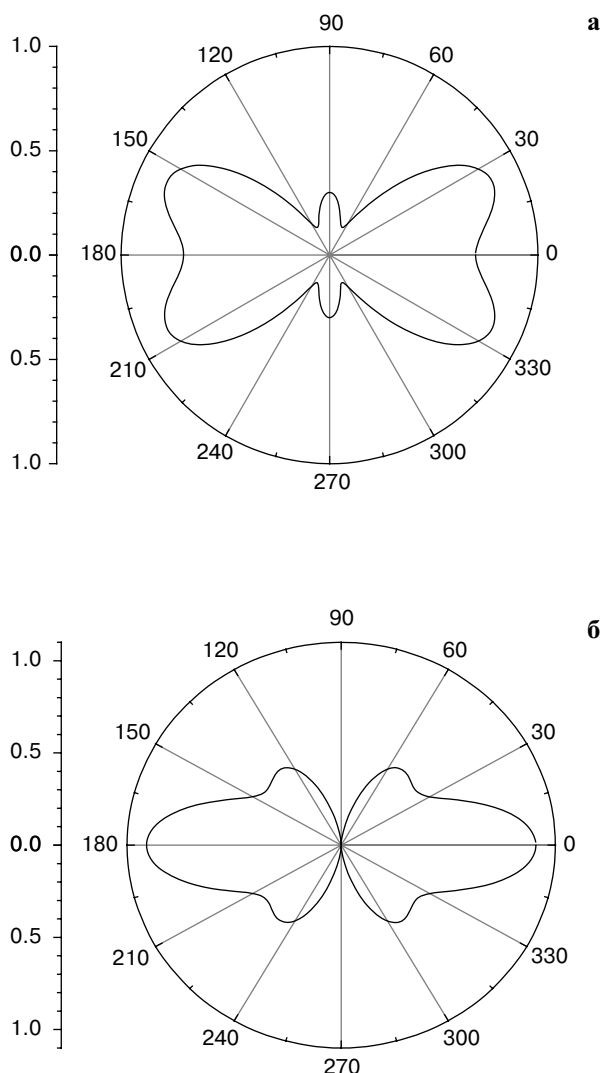


Рис. 3. Модельная угловая зависимость магнитной восприимчивости, рассчитанная как суперпозиция наведённой и магнитокристаллической для Fe_3Si (111) при $H_i \perp n$: (а) H_i направлено в плоскости пластины вдоль оси [110]; (б) H_i перпендикулярно оси [110].

нитного поля (30–100 Э) и невысоких температурах, позволяет сделать предположение, что механизм её возникновения связан с взаимодействием магнитного поля с атомами в каскаде смещений в течение очень короткого времени его существования. Каскад смещений образуется в результате последовательных столкновений первичного высокоэнергетического иона и вторичных выбитых атомов с атомами решётки. Каскад, включающий несколько тысяч выбитых атомов, имеет поперечный размер порядка 10 нм и практически вся энергия иона сосредоточена в нём. Атомы в каскаде столкновений движутся независимо в малом объёме, а затем происходит закалка за очень короткий промежуток времени ($\sim 10^{-11}$ с). Такая сверхбыстрая закалка может заморозить атомы в метастабильном состоянии с изменёнными решёточными расстояниями [11], что приводит к появлению наведённой магнитной анизотропии.

Выводы

Таким образом, проведённые исследования показали влияние постоянного магнитного поля, приложенного к образцу в процессе ИЛС, на магнитные характеристики полученных тонких плёнок силицидов железа. Плёнки, полученные во внешнем магнитном поле, обладают магнитной анизотропией, которая может быть объяснена наличием наведённой магнитной анизотропии и магнитокристаллической анизотропии соединения Fe_3Si . При этом эффективная намагниченность насыщения ТМП повышается на $\sim 14\%$ при направлении внешнего магнитного поля, параллельного поверхности, и $\sim 24\%$ в случае, когда поле приложено перпендикулярно.

Работа проводилась при участии сотрудников кафедры ФТТ КГУ Н. Г. Ивойлова и Е. Н. Дулова и при поддержке гранта Президиума РАН в рамках договора с ФТИАН (№ 4/06 от 3.07.2006) и НИОКР РТ (№ 06-6.4-305/2006).

Литература

1. Prinz G.A.: Science **282**, 1660–1663 (1998)
2. McHenry M.E., Laughlin D.E.: Acta Mater. **48**, 223–238 (2000)
3. Петухов В.Ю., Хайбуллин И.Б., Зарипов М.М., Манапов Р.А.: ФТТ **26**, вып. 5, 1392–1397 (1984)
4. Chappert C., Bernas H., Ferre J., Kottler V., Jamet J.-P., Chen Y., Cambril E., Devolder T., Rousseaux F., Mathet V., Launois H.: Science **280**, 1919 (1998)
5. Gumarov G.G., Petukhov V.Yu., Shustov V.A., Khaibullin I.B.: Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **127/128**, 321–323 (1997)
6. Maissel L.I., Gland R. (eds.): Handbook of thin film technology. New York: McGraw Hill Book Company 1970. 768 p.
7. Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Хайбуллин И.Б., Жеглов Е.П.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2005. Ежегодник, с. 119–122. Казань: ФизтехПресс 2006.
8. Ивойлов Н.Г., Хрипунов Д.М., Чистяков В.А.: ПТЭ, № 4, 146–149 (1997)
9. Гуревич А.Г.: Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках. М.: Наука 1973. 591 с.
10. Gupta R., Lieb K.P., Muller G.A., Schaaf P., Zhang K.: Hyperfine Interactions **160**, 107–121 (2005)
11. Chang G.S., Lee Y.P., Rhee J.Y., Lee J., Jeong K., Whang C.N.: Phys. Rev. Lett. **87**, no. 6, 067208 (2001)

ЭПР и ЯМР спектроскопия механоактивированного глюконата кальция

В. Ю. Петухов, Г. Г. Гумаров, Е. П. Жеглов, А. А. Обычный

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

Изучены физико-механические превращения, происходящие в глюконате кальция при его механохимической активации, с использованием методов магнитной радиоспектроскопии: ЭПР и ЯМР. ЭПР измерения показали, что при механохимической обработке в глюконате кальция образуются парамагнитные центры свободнорадикальной природы. Данные ЯМР спектроскопии на ядрах ^{13}C свидетельствуют о деструкции молекулы глюконата, причём разрыв молекул происходит вблизи атома кальция. Это приводит к увеличению химической активности медицинского препарата.

Введение

В настоящее время болезни, связанные с гипокальциемией, являются одними из самых распространённых на земле. Например, в России детей с недостатком кальция в организме около половины. Важную роль в лечении таких заболеваний играют лекарственные препараты, содержащие кальций. Однако биодоступность имеющихся лекарственных средств мала, и, соответственно, практически не существует эффективных методов консервативного лечения таких заболеваний. Поэтому проблема получения биодоступных лекарственных препаратов кальция в настоящее время является весьма актуальной. Одним из наиболее популярных в России недорогим лекарственным кальцийсодержащим препаратом является глюконат кальция, однако его эффективность весьма невысока.

Несколько лет тому назад сотрудниками Физико-технического института УрО РАН г. Ижевска методом механоактивации впервые в мире была получена модифицированная рентгеноаморфная нанодисперсная лекарственная форма официального препарата глюконата кальция [1–3]. Полученный механоактивированный глюконат кальция был апробирован на клинической базе Ижевской государственной медицинской академии для комплексного консервативного лечения остеопороза и других костных, а также стоматологических заболеваний. Клинические данные показали уникальную эффективность модифицированного препарата [4, 5]. Было предположено, что повышенная терапевтическая эффективность аморфизованного нанодисперсного препарата связана с его высокой химической активностью и значительно увеличенной долей поверхности наночастиц. Однако такие предварительные выводы не раскрывают истинных причин и природы повышенной биодоступности механоактивированного препарата кальция, что не позволяет определять оптимальные режимы его получения и перспектив дальнейшего использования предложенного метода, а также не даёт возможности контроля качества получаемых лекарств.

Поэтому целью настоящей работы явилось изучение физико-механических превращений, происходящих в глюконате кальция при его механохимической активации, с использованием методов магнитной радиоспектроскопии: ЭПР и ЯМР.

Объекты и методы исследования

Исходным материалом являлся фармацевтический официальный препарат глюконат кальция.

Механоактивированные порошки получали методом механического измельчения таблеток глюконата кальция в шаровой планетарной мельнице “Пульверизетте-7” по методике, описанной в [6]. Измельчение проводили в течение 0.25–16 ч в герметичных сосудах, заполненных аргоном с помощью продувки. Сосуды и шары были изготовлены из стали марки ШХ15. Сталь ШХ15 обладает высокой твёрдостью, износостойкостью, является низколегированной и содержит минимальное количество примесей (1.5 вес.% Cr и 1 вес.% C), что практически исключает возможность загрязнения получаемых порошков материалом измельчающих тел (Fe и Cr). К тому же, проведённые ранее исследования показали, что при времени измельчения $t_{\text{др}} = 4\text{--}8$ ч использование стали ШХ15 не приводит к загрязнению даже металлических систем Fe-C и Fe-Si, которые, по сравнению с глюконатом кальция, обладают значительно большими абразивными свойствами. Для первичного контроля проводили гравиметрические измерения сосудов, шаров и образцов до и после измельчения. Привеса после измельчения обнаружено не было.

Измерения спектров ЭПР проводились на спектрометре E-12 фирмы Вариан на частоте ~ 9.5 ГГц в температурном диапазоне 77–300 К. Образцы механоактивированных порошков глюконата кальция заполняли кварцевую ампулу на длине не менее 4 см с целью помещения одинакового количества вещества в одной половине TE_{104} -резонатора спектрометра при каждом измерении.

Для проведения количественных измерений во вторую половину резонатора помещали угольный эталон.

Исследования методом ЯМР проводились на спектрометре Avance 400 фирмы Брукер. Магнитное поле спектрометра составляло 9.395 Тл. Протонный резонанс регистрировался на частоте 400 МГц, а резонанс на ядрах ^{13}C – на частоте 100 МГц. Спектры высокого разрешения протонного резонанса снимались в D_2O . Резонанс на ядрах ^{13}C в твёрдом веществе наблюдался в режиме кросс-поляризации при вращении под магическим углом. При регистрации спектров порошков глюконата кальция использовался ротор диаметром 4 мм, вращающийся со скоростью 5 кГц.

Результаты и обсуждения

Исходный глюконат кальция не обнаружил наличия каких-либо парамагнитных центров, регистрируемых методом ЭПР. После механохимической обработки в спектре ЭПР, записанном при комнатной температуре, появилась линия поглощения с g -фактором $g = 2.0051 \pm 0.0002$ и шириной $\Delta H = 8.7 \pm 0.5$ Э (см. рис. 1). Интенсивность линии поглощения зависела от времени помола: вначале интенсивность сигнала возрастает, а затем медленно уменьшается. При этом время помола, при котором наблюдается максимальное значение интенсивности сигнала, зависит как от исходного материала, так и от типа мельницы. Типичная зависимость интенсивности от времени помола приведена на рис. 2. Ширина линии поглощения при изменении времени помола не изменялась. Следует также отметить, что парамагнитный центр оказался стабильным и долгоживущим: интенсивность линии поглощения не изменялась в течение года с момента механоактивации препарата.

Результаты рентгеноструктурного и элементного анализа показали, что механоактивированный порошок является рентгеноаморфным с размером частиц от 50 до 500 нм, а принципиальных изменений химического состава глюконата кальция в процессе механоактивации не было обнаружено.

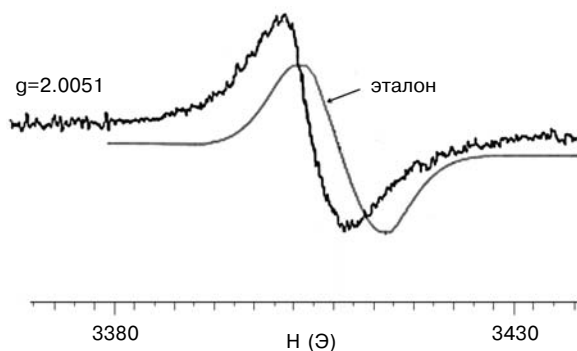


Рис. 1. Спектр ЭПР механоактивированного в течение 30 мин глюконата кальция, $g = 2.0051$, и угольного эталона, $g = 2.0030$; $T = 300$ К.

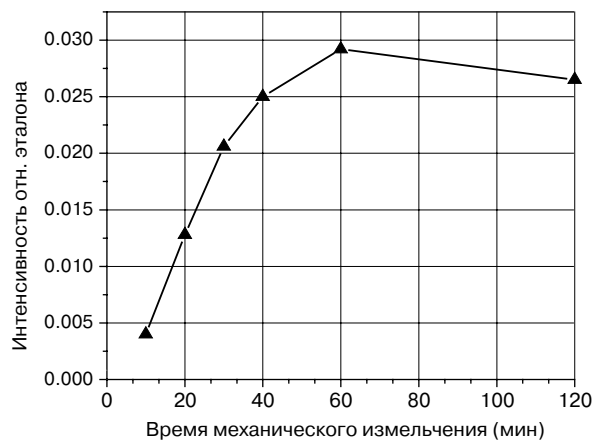


Рис. 2. Зависимость интенсивности сигнала ЭПР от времени измельчения.

Изменения в спектре ЯМР от ядер ^{13}C , произошедшие после механоактивации порошка глюконата кальция, свелись к сильному уширению линий поглощения (см. рис. 3). После растворения порошка в дейтерированном растворе произошло существенное сужение линий (рис. 4). Спектр ЯМР от ядер ^{13}C состоит из 6 линий в соответствии с числом неэквивалентных положений атомов углерода в молекуле глюконата кальция (см. структурную формулу на рис. 5). Положения линий в спектре глюконата кальция находятся в соответствии с литературными данными [7]. Однако, по мере помола, положение линий изменялось. При этом наблюдалась интересная особенность: линии от углерода в положениях 5 и 6 сдвигались в одну сторону, в то время как от атомов в положениях 1, 2, 3 и 4 – в другую (рис. 6). Хорошо известно [8, 9], что механическое воздействие на вещество может служить источником его многочисленных превращений, связанных, во-первых, с разрывом и образованием валентных связей и деформацией валентных углов, а во-вторых, с разрушением и возникновением более слабых межмолекулярных взаимодействий (разупорядочение, аморфизация кристаллической структуры,

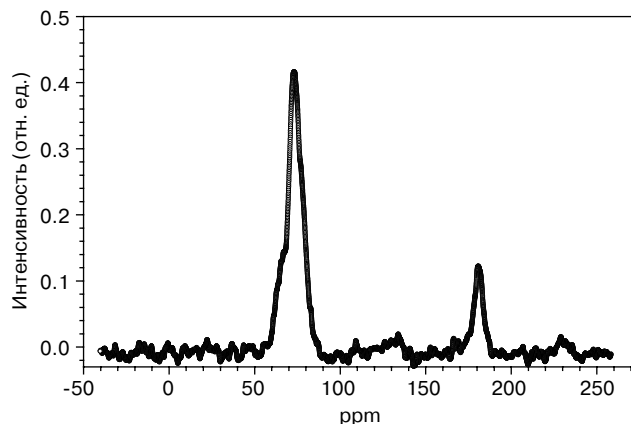


Рис. 3. Спектр ЯМР на ядрах ^{13}C порошкообразного глюконата кальция после 60 мин помола.

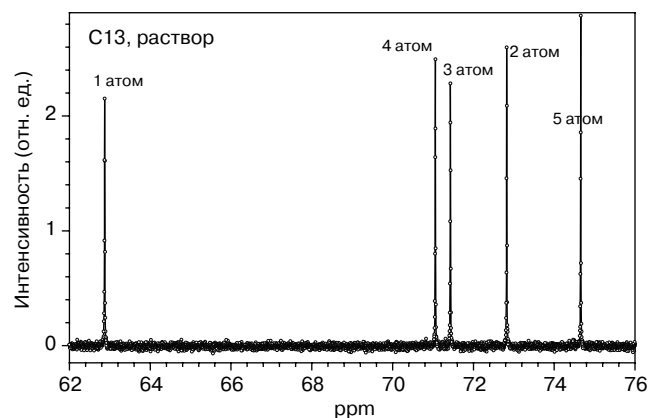


Рис. 4. Спектр ЯМР высокого разрешения на ^{13}C раствора глюконата кальция после 60 мин помола.

конформационные превращения, полиморфные переходы).

В органических соединениях имеются два типа связей: прочные межатомные (ковалентные) связи внутри молекул и относительно слабые (ван-дер-ваальсовы, водородные) межмолекулярные. Естественно, под действием механических напряжений в первую очередь должны рваться более слабые межмолекулярные связи, что приводит к разупорядочению, разрыхлению структуры веществ. Степень разупорядочения зависит от вида механического воздействия, величины подведённой энергии и структуры веществ. Кристаллические вещества под действием механических напряжений претерпевают аморфизацию и полиморфные переходы, наблюдаются конформационные превращения. Следует отметить, что в молекулах механические воздействия вызывают разрывы связей обоих типов, так как межмолекулярные связи образуются по всей длине молекул и суммарная энергия, необходимая для их разрыва, становится соизмеримой с энергией разрыва валентных связей.

Мы полагаем, что сдвиг линий ЯМР связан с межмолекулярным обменом неспаренного электрона между парамагнитными частицами, образующимися при механохимической обработке, и исходным диамагнитным глюконатом кальция. В этом случае происходит межмолекулярный обмен неспаренного электрона, и парамаг-

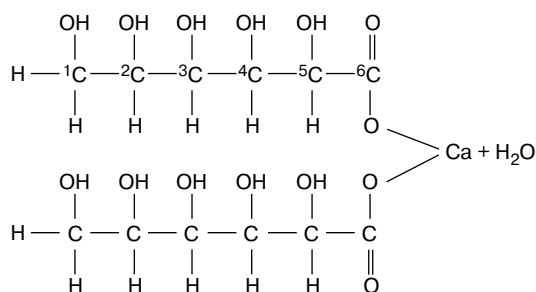


Рис. 5. Структурная формула глюконата кальция и обозначения неэквивалентных атомов углерода.

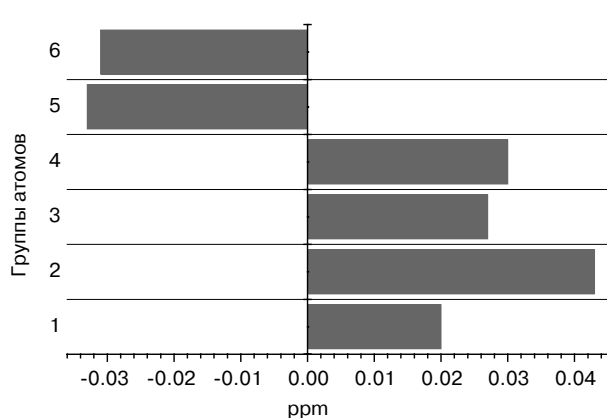


Рис. 6. Относительный сдвиг линий от ^{13}C в спектре ЯМР раствора порошка глюконата кальция после 60 мин помола.

нитная плотность распределяется по многим молекулам. Взаимодействие между электроном и ядром в данном случае приводит к сдвигу сигналов ЯМР в более слабые или более сильные поля относительно тех же сигналов в диамагнитном соединении [10]. Проведённые клинические испытания показали корреляцию между биологической эффективностью препарата и амплитудой сигнала ЭПР.

Выводы

Обнаружено появление сигнала ЭПР с $g = 2.005$ и шириной линии ~ 8.5 Э в лекарственном препарате глюконата кальция, подвергнутом механохимической обработке. Считаем, что появление долгоживущего парамагнитного центра обязано возникновению свободного радикала.

Спектры ЯМР высокого разрешения на ядрах ^{13}C для механоактивированных образцов, растворённых в дегтерированной воде, свидетельствуют о появлении парамагнетизма в молекулах, который, по-видимому, возникает в результате распада молекулы глюконата, причём разрыв связи возникает рядом с атомом кальция. Этим и обусловлена химическая активность полученного вещества.

Есть основания полагать, что существует корреляция между биологической эффективностью (т.е. терапевтическим эффектом) и амплитудой сигнала ЭПР от появляющихся в результате механоактивации парамагнитных центров. В этом случае методы радиоспектроскопии могут служить надёжной экспресс-методикой для определения эффективности лекарственного препарата.

Работа проводилась при участии сотрудника ФТИ УрО РАН Г. Н. Кобыгина и студентов-дипломников физфака КГУ И. В. Самородова и А. Р. Даминова.

Литература

1. Коныгин Г.Н., Гильмутдинов Ф.З., Дорофеев Г.А., Стрелков Н.С., Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Максимов П.Н., Филиппов А.Н.: Материалы конф. “Актуальные вопросы детской хирургии”, с. 56–59. Ижевск: ИГМА 2003.
2. Коныгин Г.Н., Гильмутдинов Ф.З., Быстров С.Г., Карбань О.В., Дорофеев Г.А., Елсуков Е.П., Шаков А.А., Стрелков Н.С., Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Шишкин С.Б., Максимов П.Н., Филиппов А.Н., Корепанова В.В.: Химия в интересах устойчивого развития № 13, 1249–252 (2005)
3. Коныгин Г.Н., Стрелков Н.С., Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Максимов П.Н., Филиппов А.Н., Шишкин С.Б., Гильмутдинов Ф.З., Дорофеев Г.А., Елсуков Е.П.: Способ лечения гипокальциемий, остеопорозов, переломов. Патент РФ № 2268053 (2004)
4. Стрелков Н.С., Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Максимов П.Н., Филиппов А.Н., Коныгин Г.Н., Гильмутдинов Ф.З., Дорофеев Г.А.: Материалы конф. “Актуальные вопросы детской хирургии”, с. 59–60. Ижевск: ИГМА 2003.
5. Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Стрелков Н.С., Корепанова В.В., Максимов П.Н., Елсуков Е.П., Коныгин Г.Н.: Материалы конф. “Актуальные вопросы детской травматологии и ортопедии”, с. 106–107. Воронеж 2004.
6. Коныгин Г.Н., Гильмутдинов Ф.З., Быстров С.Г., Карбань О.В., Дорофеев Г.А., Елсуков Е.П., Шаков А.А., Стрелков Н.С., Тюлькин Е.П., Поздеев В.В., Шишкин С.Б., Максимов П.Н., Филиппов А.Н., Корепанова В.В.: Химия в интересах устойчивого развития № 13, 1249–252 (2005)
7. Хауссер К.Х., Кальбитцер Х.Р.: ЯМР в медицине и биологии: структура молекул, томография, спектроскопия in vivo. Киев: Наукова думка 1993. 259 с.
8. Boldyreva E., Boldyrev V. (eds.): Reactivity of molecular solids. Chichester: John Wiley & Sons 1999. 328 p.
9. Дубинская А.М.: Успехи химии **68**(8), 708–724 (1999)
10. Гюнтер Х.: Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир 1984. 478 с.

ЭПР ионов Cr^{4+} в кристалле LiScGeO_4

Г. С. Шакуров

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом высокочастотной ЭПР спектроскопии исследован кристалл $\text{LiScGeO}_4\text{:Cr}$. Обнаружен и идентифицирован центр Cr^{4+} в тетраэдрической координации. В рамках формализма спин-гамильтониана удалось описать наблюдаемые спектры и их угловые зависимости. Ширина линий ЭПР и параметры тонкой структуры свидетельствуют о значительно большей деформации тетраэдрического окружения при замещении по сравнению с форстеритом.

Введение

Литиево-скандиевый германат (LiScGeO_4), структурный аналог форстерита (Mg_2SiO_4), принадлежит к орторомбической группе симметрии $Pnma$ $a = 1.0673$ нм, $b = 0.59926$ нм, $c = 0.49667$ нм [1]. Интерес к этому соединению обусловлен его применением в качестве активной среды лазеров ближнего ИК диапазона [2]. В кристалле имеются три структурно неэквивалентные катионные позиции, которые могут быть замещены ионами металлов переходных групп. Позиции Li^+ (локальная симметрия C_1) и Sc^{3+} (локальная симметрия C_s) имеют октаэдрическое окружение, тетраэдрическая позиция Ge^{4+} имеет локальную симметрию C_s . Ранее в LiScGeO_4 методом ЭПР были исследованы центры Cr^{3+} и Fe^{3+} [3, 4]. Было обнаружено, что ионы Cr^{3+} замещают ионы Sc^{3+} в позиции искажённого октаэдра с симметрией C_s . В то же время ионы Fe^{3+} локализируются как в октаэдрической, так и тетраэдрической позициях с симметрией C_s . После обнаружения лазерной генерации в форстерите на тетраэдрически координированном ионе Cr^{4+} , четырёхвалентный хром стал предметом повышенного внимания со стороны спектроскопистов. Для литиево-скандиевого германата образование центров Cr^{4+} фиксировалось оптическими методами [2], однако ранние ЭПР исследования не выявили этого иона. Необходимо отметить, что значительную трудность для исследования методом ЭПР представляет то обстоятельство, что в низкосимметричном кристаллическом поле некрамерсовый ион Cr^{4+} ($S = 1$) имеет в нулевом магнитном поле невырожденные уровни энергии. Энергетический интервал между этими тремя спиновыми состояниями может превышать кванты спектрометров X- и Q-диапазонов, что делает невозможным их исследование традиционными методами ЭПР. В работе [3] мы, используя высокочастотную ЭПР технику, обнаружили дополнительную линию в спектре, соответствующую некрамерсовому иону с расщеплением в нулевом поле около 2.6 см^{-1} , однако недостаток экспериментальных данных не позволил провести его идентификацию.

В данной работе изложены более тщательные исследования, которые привели нас к выводу, что наблюдаемый спектр принадлежит иону Cr^{4+} в тетраэдрической координации.

Экспериментальные результаты

Измерения были выполнены на широкополосном ЭПР спектрометре при температуре 4.2 К. Подробное описание спектрометра сделано ранее [5]. На рис. 1 представлены спектры ЭПР, записанные на частоте 83.8 ГГц, для ориентации кристалла, когда магнитное поле находилось в плоскости ab . Линия ЭПР, приписываемая иону Cr^{4+} , имела ширину около 300–400 Гс, при этом отношение сигнал/шум было невелико, что дало погрешность в определении положения центра линии при измерении угловых зависимостей спектров ЭПР. Угловые зависимости спектров при вращении кристалла в трёх кристаллографических плоскостях представлены на рис. 2. Для надёжного определения ориентации магнитного поля

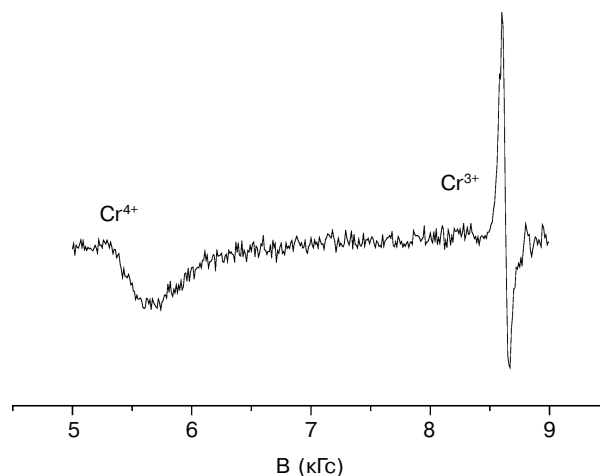


Рис. 1. Спектр ЭПР $\text{LiScGeO}_4\text{:Cr}$. Вектор $\mathbf{B}$ лежит в плоскости ab . Частота 83.8 ГГц. $T = 4.2$ К.

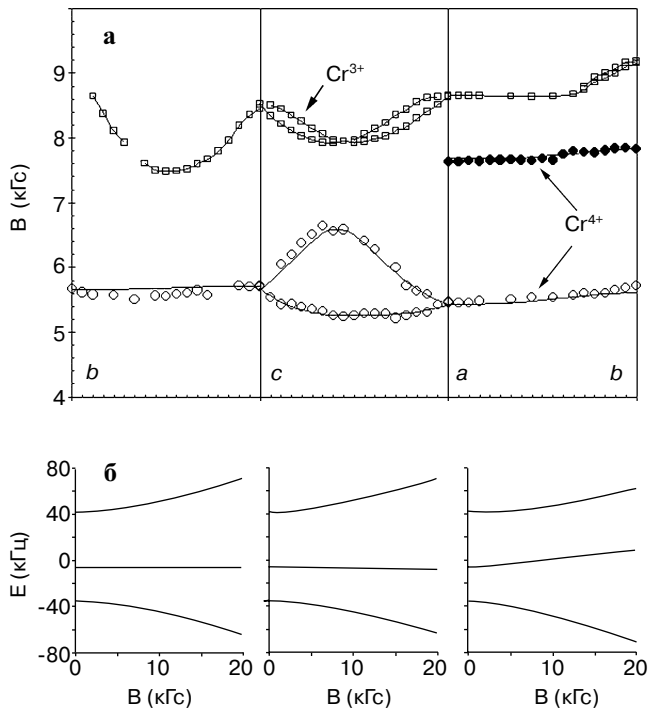


Рис. 2. Угловая зависимость спектров ЭПР $\text{LiScGeO}_4:\text{Cr}$ ($\square$, Cr^{3+} и $\circ$, Cr^{4+} на частоте 83.8 ГГц; $\bullet$, Cr^{4+} на частоте 89.0 ГГц) (а) и зависимости уровней энергии Cr^{4+} от магнитного поля (б). Точки – эксперимент, линии – расчёт.

относительно кристаллических осей использовалась угловая зависимость известного центра Cr^{3+} [3]. Как можно видеть из рис. 2, при вращении в плоскостях ab и bc угловая зависимость исследуемой линии в спектре практически отсутствует. При вращении в плоскости ac , линия расщепляется на две компоненты, что указывает на локальную симметрию центра C_s . Для центра со спином $S = 1$ можно условно обозначить энергетические уровни как $|0\rangle$, $|-1\rangle$ и $|+1\rangle$. Между этими состояниями возможны три типа резонансных переходов. Идентификация наблюдаемого перехода была сделана по исследованию зависимости величин резонансных переходов от магнитного поля. Эта зависимость представлена на рис. 3. Мы предположили, что имеет место переход $|0\rangle \leftrightarrow |+1\rangle$, наблюдение которого в нулевом магнитном поле даёт величину расщепления 78 ГГц (2.6 см^{-1}). Величина расщепления в нулевом поле (РНП) была определена прямым методом по наблюдающейся инверсной линии точно в нулевом поле. Этот эффект ранее был обнаружен для форстерита [6]. Для поиска перехода $|0\rangle \leftrightarrow |-1\rangle$, который оказался за пределами низкочастотной границы нашего спектрометра (65 ГГц), были использованы генераторы Г4-141 и Г4-142, которые перекрывали диапазон 37–78 ГГц. При этом квазиоптический тракт спектрометра оказался неэффективным, поскольку возрастала расходимость пучка микроволнового излучения и мощность излучения на образце не позволяла регистрировать спектры ЭПР. Поэтому внутри гелиевого криостата линзовый лучевод был заменён на трубу из нержавеющей

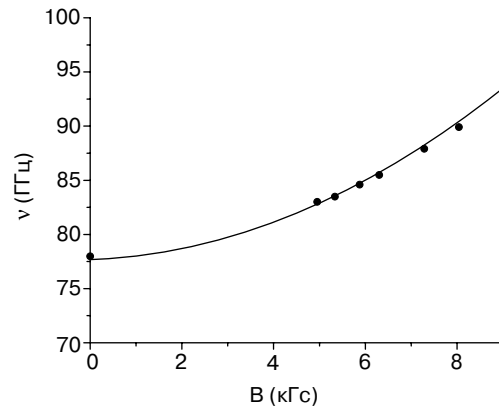


Рис. 3. Экспериментальные ($\bullet$) зависимости величины резонансных переходов от магнитного поля, линия – расчёт. Ориентация $\mathbf{B} \parallel a$.

стали диаметром 20 мм. Падающее на образец излучение не имело линейной поляризации, но уровень микроволновой мощности оказался достаточным для регистрации спектров ЭПР Cr^{3+} . Хотя линий ЭПР Cr^{4+} зарегистрировать не удалось (мы полагаем, по причине низкой чувствительности спектрометра в этом диапазоне), инверсная линия в нулевом поле была обнаружена и величина РНП оказалась равной 50 ГГц. Это расщепление мы связываем с энергетическим интервалом $|0\rangle \leftrightarrow |-1\rangle$ иона Cr^{4+} .

Обсуждение результатов

Для описания спектров ЭПР Cr^{4+} был использован спин-гамильтониан (СГ) для $S = 1$ симметрии C_{2h} ($X \parallel c$, $Y \parallel a$, $Z \parallel b$ пространственной группы кристалла $Pnma$) вида:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mu_B \left(\sum B_i g_{ii} \hat{S}_i + B_x g_{xy} \hat{S}_y \right) + B_{20} T_{20} (\hat{S}) \\ & + B_{22} \bar{T}_{22} + B_{2-2} \bar{T}_{2-2}, \\ B_{20} = & \frac{\sqrt{6}}{2} D_{zz}, \quad B_{22} = \frac{D_{xx} - D_{yy}}{2}, \quad B_{2-2} = -D_{xy}, \end{aligned}$$

где члены $B_{nm} T_{nm}$ описывают тонкую структуру спектров ЭПР. Явный вид операторов T_{nm} приведён в [3]. Нахождение параметров производилось численным методом.

Вначале g -фактор устанавливался $g = 1.97$ и не варьировался по причине большой ширины линии. После определения тензора тонкой структуры D уточнялись компоненты g -тензора. Полученные параметры приведены в таблице 1. В процессе вычислений было использовано $n = 68$ резонансных значений магнитного поля, среднеквадратичная ошибка по частоте составила 143.6 МГц. Для каждого параметра в скобках приведена ошибка вычислений. Используя полученные параметры, были построены расчётные угловые и полевые зависимости

Таблица 1. Параметры СГ Cr^{4+} в кристалле LiScGeO_4 ($x \parallel c, y \parallel a, z \parallel b$, пространственная группа $Pnma$).

g-Тензор		Тензор D (ГГц)	
g_{xx}	1.970 (0.006)	D_{xx}	9.37 (0.85)
g_{yy}	0.017 (0.007)	D_{yy}	-6.81 (0.28)
g_{zz}	1.954 (0.005)	D_{zz}	-15.62 (0.81)
g_{iso}	1.977 (0.007)	D_{zz}	6.25 (0.17)
g_{iso}	1.967 (0.22)		

спектров ЭПР (рис. 2 и 3). В целом получено хорошее согласие теории и эксперимента. Несмотря на отсутствие данных по угловой зависимости переходов $|0\rangle \leftrightarrow |-1\rangle$, успешное использование РНП = 50 ГГц в расчётах позволяет сделать вывод, что сделанное нами предположение верно. Сравнение полученных экспериментально величин РНП с аналогичными расщеплениями у форстерита также согласуется с нашей идентификацией. Действительно, для форстерита имеем РНП 61.5 и 70.5 ГГц, т.е. центр тяжести некрамерсового дублета отстоит от синглета на интервал 66 ГГц. В нашем случае 50 и 78 ГГц дают соответствующую величину 64 ГГц. Значительная величина ромбичности в нашем случае указывает на более сильное искажение тетраэдра, что, скорее всего, связано с большей разницей радиусов взаимозамещаемых ионов в тетраэдрических позициях изучаемого кристалла по сравнению с форстеритом.

На рис. 2а представлены угловая зависимость спектра и расчётная зависимость энергетических уровней от магнитного поля при его направлении вдоль кристаллографических осей. Характер угловой зависимости спектров ЭПР в плоскости ac аналогичен в общих чертах форстериту [7]. В плоскостях ab и bc различие является более существенным благодаря тому, что электронные уровни дублета для германата значительно более удалены друг от друга, по сравнению с форстеритом, и в слабых магнитных полях идут почти параллельно (см. рис. 2б).

Направление главной оси Z тензора D для Cr^{4+} (таблица 2) в изученном германате характеризуется углом поворота $\varphi = 54.38^\circ$ от оси c в плоскости ac в отличие от $\varphi = 27.37^\circ$ для Fe^{3+} в той же тетраэдрической позиции и более сопоставимо с направлением главной оси Z тензора D для Cr^{4+} форстерите $\varphi = 46^\circ$ [7].

Таблица 2. Главные значения и ориентации (φ, θ) главных осей X, Y, Z тензора тонкой структуры D относительно кристаллографической системы координат.

Главные оси, i	Главные значения D_{ii}	Ориентация	
		φ	θ
X	6.25	0	0
Y	35.75	144.38 (35.62)	90
Z	-41.99	54.38 (125.62)	90

Заключение

Обнаружены и идентифицированы центры Cr^{4+} в тетраэдрической координации в кристалле LiScGeO_4 . В рамках теории СГ удалось описать наблюдаемые спектры и угловые зависимости. Ширина линии ЭПР Cr^{4+} и параметры тонкой структуры СГ свидетельствуют о значительной деформации тетраэдрического окружения при замещении по сравнению с форстеритом.

Работа выполнена совместно с А. А. Галеевым, Н. М. Хасановой, Г. Р. Булкой, В. М. Винокуровым, Н. М. Низамутдиновым (Казанский госуниверситет) и Ч. Рудовичем (Щецинский технологический университет, г. Щецин, Польша). Работа поддержана грантом Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.2).

Литература

1. Генкина Е.А., Тимофеева В.А., Быков А.Б.: Журн. структ. химии **27**, 167 (1986)
2. Sharonov M.Yu., Bykov A.B., Rojas P., Petricevic V., Alfano R.R.: Phys. Rev. B **72**, 115111 (2005)
3. Galeev A.A., Khasanova N.M., Rudowicz C., Shakurov G.S., Bykov A.B., Bulka G.R., Nizamutdinov N.M., Vinokurov V.M.: J. Phys.: Cond. Matter **12**, 4465 (2000)
4. Galeev A.A., Hasanova N.M., Rudowicz C., Shakurov G.S., Bulka G.R., Nizamutdinov N.M., Vinokurov V.M.: Appl. Magn. Reson. **26**, 533 (2004)
5. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Appl. Magn. Reson. **2**, 571 (1991)
6. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Proc. SPIE. (Stręk W., Lukowiak E., Nissen-Sobocińska B., eds.), vol. 3176, pp. 25–29. Wrocław: SPIE – The Int. Society for Optical Engineering 1997.
7. Meilman M.L., Livshitz M.G.: OSA Proc. on Advanced Solid-State Lasers (Chase L.L., Pinto A.A., eds.), vol. 13, pp. 39–41. Washington: Optical Society of America 1992.

ЭПР центров трёхвалентного железа в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$

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

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

В данной работе исследованы кристаллы SrF_2 , легированные ионами железа. В этих образцах образуются несколько видов центров, которые изучены методом ЭПР. Было найдено, что спин первого центра равен $S = 5/2$ и имеет ромбическую симметрию. Были найдены параметры спинового гамильтониана, описывающие его угловую зависимость. На основании данных по суперсверхтонкой структуре спектров ЭПР этот центр отнесён к иону железа Fe^{3+} , заместившему родной катион решётки Sr^{2+} и имеющему компенсатор заряда по оси второго порядка, например, ион F^- . Второй центр, который мы наблюдали в кристалле SrF_2 , образуется после облучения данных кристаллов рентгеновскими лучами. Из угловой зависимости спектров ЭПР установлено, что центр имеет ромбическую симметрию и параметры спинового гамильтониана отличаются от параметров для первого центра. Аналогичный центр мы наблюдали в кристалле BaF_2 с примесью железа.

Введение

Исследования методом ЭПР примесных d-ионов в кристаллах структурного ряда флюорита, способны дать новую информацию для физики примесных дефектов в кристаллах. Дело в том, что эти кристаллы имеют кубическую кристаллическую решётку (группа симметрии O_h^5), в которой каждый из катионов находится в центре координационного куба, образованного восемью анионами [1]. В свою очередь, каждый из анионов находится в центре координационного тетраэдра из четырёх катионов. Так как обычно катионные примеси внедряются в кристаллы в позиции базовых катионов их кристаллической решётки, при легировании флюоритоподобных кристаллов образуются кубические примесные комплексы типа $[\text{MeX}]^{n-} (O_h)$. Высокая симметрия действующего на примесный ион кристаллического поля может явиться причиной ян-теллеровского или псевдо-ян-теллеровского искажения кубической ядерной конфигурации примесного комплекса $[\text{MeX}]^{n-} (O_h)$. Поскольку в кристаллах SrF_2 и BaF_2 объём координационного куба для большинства d-ионов будет слишком большим, в примесном комплексе $[\text{MeX}]^{n-} (O_h)$ может реализоваться эффект электрической дипольной неустойчивости [2]. В таком случае возможно сильное смещение примесного иона из центра координационного куба на периферию, в результате чего этот примесный ион окажется в неестественных условиях, связанных с низкой симметрией действующего на него кристаллического поля.

Недавно в работах [3, 4] нами были опубликованы результаты изучения методом ЭПР кристаллов $\text{BaF}_2:\text{Fe}$. В этих статьях сообщается о нескольких видах парамагнитных центров железа в исследованных кристаллах. Исследование примесных ионов железа в кристаллах структурной группы флюорита продолжены в данной работе. Они также выполнены методом ЭПР. В качестве кристалла-матрицы использован кристалл SrF_2 , имеющий

меньшую величину постоянной решётки a_0 . В качестве основного рассматривался вопрос о том, как скажется уменьшение размеров координационного куба на свойства образующихся при легировании примесных центров железа.

Эксперимент и его результаты

Кристаллы $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ были выращены методом Чохральского из графитового тигля в атмосфере гелия, содержащего примесь фтора. Исследования выращенных образцов выполнены методом ЭПР на спектрометре Е-12 фирмы Вариан в Q-диапазоне при температурах 4.2 и 77 К. Было установлено, что в необлучённых кристаллах $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ с концентрацией примесного железа 0.2 ат.% при температуре 4.2 К наблюдаются спектры ЭПР двух типов центров. Угловые зависимости положений центра тяжести линий ЭПР одного типа центров (ПЦ 1) указывают на моноклинную симметрию их молекулярной структуры.

Спектры ЭПР второго типа центров (ПЦ 2) наблюдаются в необлучённых кристаллах $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ как при $T = 4.2$ К, так и при 77 К. Судя по количеству линий в тонкой структуре спектров ЭПР, эти центры обладают эффективным спиновым моментом $S_{\text{эфф}} = 5/2$. Симметрия их молекулярной структуры ромбическая (D_{2h} или C_{2v}).

После рентгеновского облучения кристаллов при $T = 300$ К в кристаллах появляется ещё один вид ромбических центров с $S_{\text{эфф}} = 5/2$ (ПЦ 3). Их спектры также наблюдаются при температурах $T = 4.2$ и 77 К, но параметры тонкой структуры этих последних центров сильно отличаются от параметров ромбических центров, обнаруженных в необлучённых кристаллах.

Угловые зависимости положений линий тонкой структуры спектра ЭПР ромбических центров ПЦ 2 в необлучённом кристалле представлены на рис. 1. На этом

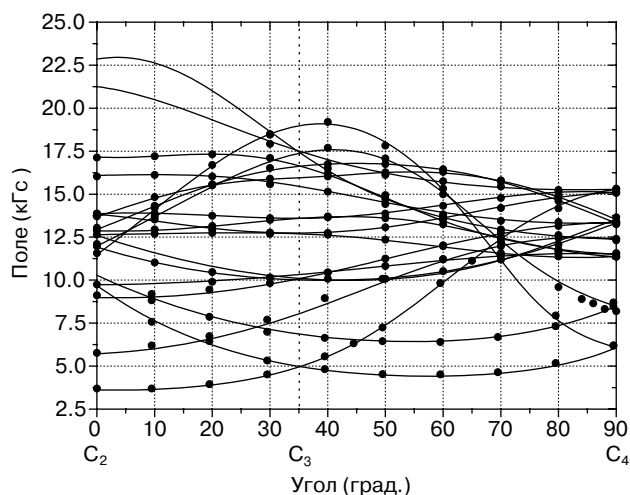


Рис. 1. Угловые зависимости величин резонансных магнитных полей линий тонкой структуры спектров ЭПР шести групп магнитно-неэквивалентных центров трехвалентного железа в необлучённом рентгеновскими лучами кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ ($T = 4.2 \text{ K}$, $\nu_{\text{EPR}} = 36.7 \text{ ГГц}$).

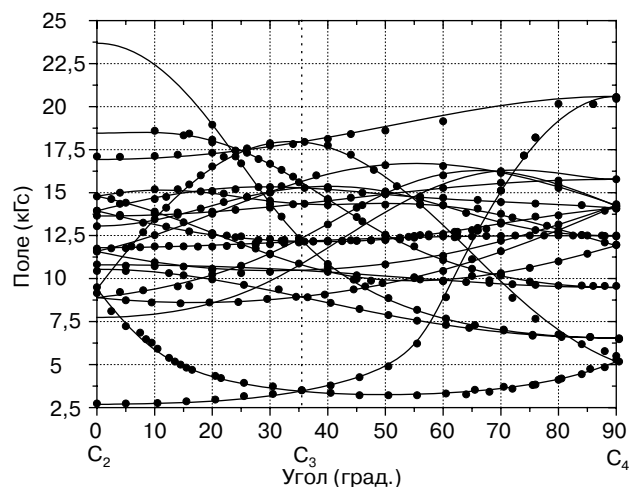


Рис. 2. Угловые зависимости величин резонансных магнитных полей линий тонкой структуры спектров ЭПР шести групп магнитно-неэквивалентных центров трёхвалентного железа в облучённом рентгеновскими лучами кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ ($T = 4.2 \text{ K}$, $\nu_{\text{EPR}} = 36.7 \text{ ГГц}$).

рисунке точками обозначены экспериментальные значения резонансных магнитных полей, а сплошными линиями показаны теоретические значения этих полей, рассчитанные на основе спинового гамильтониана (СГ)

$$\mathcal{H}_S = \beta_e(g_x B_{0x} S_x + g_y B_{0y} S_y + g_z B_{0z} S_z) + B_2^0 O_2^0 + B_2^2 O_2^2 + B_4^0 O_4^0 + B_4^2 O_4^2 + B_4^4 O_4^4, \quad (1)$$

где $S = 5/2$; β_e – магнетон Бора; B_{0i} ($i \rightarrow x, y, z$) – проекции вектора индукции внешнего постоянного магнитного поля на оси системы координат, связанной с рассматриваемым парамагнитным центром (локальной системы координат); g_i ($i \rightarrow x, y, z$) – параметры электронного зеемановского взаимодействия; O_n^m – спиновые операторы Стивенса; B_n^m – параметры, определяющие расщепления основных электронных спиновых уровней энергии исследуемого центра в нулевом магнитном поле. Представленным на рис. 1 графикам соответствуют следующие значения указанных параметров: $g_x = 2.000 \pm 0.002$; $g_y = 2.000 \pm 0.002$; $g_z = 2.005 \pm 0.002$; $B_2^0 = 2205 \pm 50$; $B_2^2 = 1420 \pm 50$; $B_4^0 = 4.9 \pm 0.2$; $B_4^2 = -24.1 \pm 0.5$; $B_4^4 = -24 \pm 0.5$ (параметры B_n^m приведены в МГц). Результаты указывают на то, что исследуемый примесный центр образован ионом Fe^{3+} с ромбической симметрией кристаллического поля в позиции этого иона.

Угловые зависимости положений линий тонкой структуры спектра ЭПР ромбических центров ПЦ 3 представлены на рис. 2. Как и на рис. 1, здесь точками обозначены экспериментальные значения резонансных магнитных полей, а сплошными линиями показаны теоретические значения этих полей, рассчитанные на основе СГ (1). Представленным на рис. 2 графикам, соответствуют следующие значения параметров этого гамильтониана: $g_x = 2.005 \pm 0.002$; $g_y = 2.003 \pm 0.002$; $g_z = 2.003 \pm 0.002$; $B_2^0 = 2488 \pm 50$; $B_2^2 = -909 \pm 50$; $B_4^0 = -0.9 \pm 0.2$; $B_4^2 = 3.6 \pm 0.5$;

$B_4^4 = -1.4 \pm 0.2$ (параметры B_n^m приведены в МГц). Наблюдаемая тонкая структура спектра ЭПР характерна для спинового момента $S = 5/2$. Следовательно, мы можем говорить, что примесный центр, появившийся в исследуемом кристалле после его облучения рентгеновскими лучами, также образован ионом Fe^{3+} . Форма полученных угловых зависимостей на рис. 2 явно свидетельствует о ромбической симметрии кристаллического поля в позиции иона Fe^{3+} .

В спектрах ЭПР ромбических центров ПЦ 1 и ПЦ 2, присутствующих в необлучённых кристаллах, не было обнаружено суперсверхтонкой структуры (ССТС). Но ССТС спектра ЭПР ромбических центров ПЦ 3, образовавшихся в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ в процессе его облучения рентгеновскими лучами, в некоторых ориентациях вектора внешнего магнитного поля B_0 была достаточно хо-

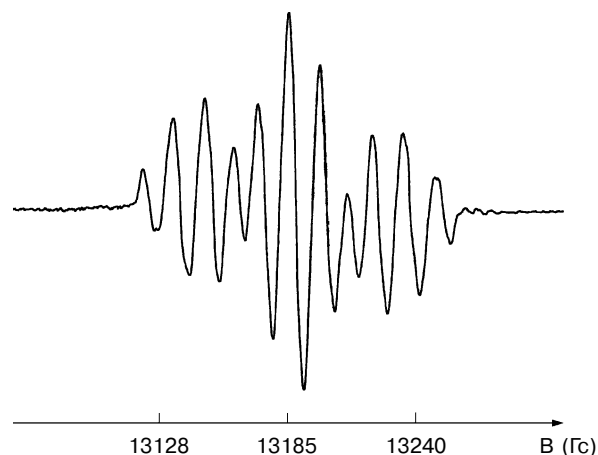


Рис. 3. Фрагмент спектра ЭПР облучённого образца кристалла $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ для $B_0 \parallel Z$, соответствующий резонансным переходам $|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$ ($T = 4.2 \text{ K}$).

рошо разрешена. Для примера на рис. 3 представлена группа резонансных линий ССТС спектра ЭПР, соответствующая резонансным переходам $|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$. Анализируя форму ССТС спектров ЭПР по методике, изложенной в работе [4], мы получили следующие величины параметров гамильтониана ССТС: $A_{||}^I = 75 \pm 5$, $A_{||}^{II} = 54 \pm 5$, $A_{\perp}^I = 51 \pm 5$ и $A_{\perp}^{II} = 42 \pm 5$ (в МГц).

Обсуждение экспериментальных результатов и выводы

Сопоставляя экспериментальные факты, полученные в данной и в нашей предыдущей работах [4], можно увидеть, что параметры тонкой и ССТ структуры спектров ЭПР этих центров подобны соответствующим параметрам ромбических радиационных центров в кристаллах $\text{BaF}_2:\text{Fe}$ [4]. Становится очевидным, что подобными должны быть также и их молекулярные структуры и механизмы образования.

Экспериментальная информация о структуре ромбических центров Fe^{3+} в облучённом кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$ менее подробная. Однако мы имеем два факта, которые существенно сужают предположения. Во-первых, по данным изучения угловых зависимостей в спектре ЭПР, симметрия данного центра ромбическая. Во-вторых, величины параметров тонкой структуры спектров ЭПР этих центров имеют тот же порядок величины, что и параметры радиационного центра, хотя знак параметра у них имеет противоположное значение. При рассмотрении возможных видов молекулярной структуры было принято во внимание, что в данном центре должен быть компенсатор заряда, поскольку ион железа замещает ион стронция не изовалентно. Поскольку центр наблюдается в еще необлучённом кристалле, его состояние и его молекулярная структура являются стабильными. Так как кристалл выращивался в атмосфере, содержащей фтор,

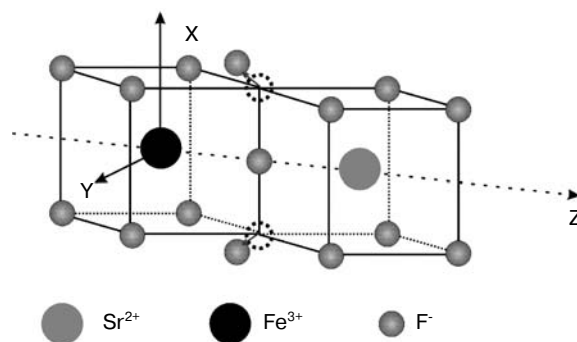


Рис. 4. Фрагмент решётки кристалла $\text{SrF}_2:\text{Fe}^{3+}$, включающий координационные многогранники примесного иона Fe^{3+} и иона Sr^{2+} .

то наиболее возможным компенсатором является междузельный фтор в ромбической позиции по отношению к примесному иону. Таким образом, в качестве наиболее вероятной структуры центра мы рассматриваем структуру, представленную на рис. 4.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-02-16616).

Литература

1. Hayes W. (ed.): Crystals with the fluorite structure: electronic, vibrational and defect properties. Oxford: Clarendon Press 1974. 448 p.
2. Берсукер И.Б.: Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. М.: Наука 1987. 344 с.
3. Житейцев Е.Р., Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П.: ФТТ **47**, № 7, 1212–1216 (2005)
4. Житейцев Е.Р., Уланов В.А., Зарипов М.М.: ФТТ **48**, № 10, 1779–1783 (2006)

Аномалии в магнитных свойствах кристаллов $\text{BaF}_2\text{:Cu}$

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

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

В кристаллах $\text{BaF}_2\text{:Cu}$ синтезированы парамагнитные тримеры ионов меди с необычными зависимостями параметров электронного зеемановского взаимодействия от температуры и величины внешнего магнитного поля. На основе анализа экспериментальных фактов, полученных методом ЭПР в X- и Q-диапазонах при температурах 1.8–77 К, высказано предположение о том, что исследуемые тримеры образованы из трёх ян-теллеровских комплексов $[\text{CuF}_8]^{6-} (\text{O}_h)$, связанных упругим взаимодействием через поле ян-теллеровских деформаций и несимметричным антиферромагнитным обменным взаимодействием. Показано, что исследуемые тримеры распределены по кристаллу крайне неравномерно. В образцах присутствуют микроскопические области с высоким содержанием тримеров, в которых при температуре $T \approx 4.5$ К происходит ферромагнитный фазовый переход. Центры одиночных ионов меди и их димеры в основном локализуются за пределами областей с повышенной концентрацией тримеров.

Введение

Ян-теллеровские комплексы одиночных примесных ионов Cu^{2+} в кристаллах BaF_2 впервые были обнаружены и исследованы методом ЭПР в работе [1]. Авторами этой работы было показано, что благодаря сильному вибронному взаимодействию с чётными и нечётными тетрагональными модами колебаний решётки симметрия равновесной ядерной конфигурации комплекса существенно понижается (от $[\text{CuF}_8]^{6-} (\text{O}_h)$ до $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{C}_{4v})$). При этом примесный ион Cu^{2+} смещается из позиции замещённого им катиона Ba^{2+} в направлении центра одной из шести граней своего исходного координационного куба примерно на 1 Å. Одновременно с этим смещаются также в новые равновесные позиции восемь ионов фтора, располагавшиеся ранее на вершинах исходного координационного куба. Таким образом, в кристалле появляется шесть ансамблей структурно одинаковых комплексов $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{C}_{4v})$, ориентированных в кристалле-матрице шестью различными способами.

В работе [1] были обнаружены и охарактеризованы также димеры меди, представляющие собой стабильные образования из двух комплексов $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{C}_{4v})$, связанных между собой полем ян-теллеровских деформаций и антиферромагнитным обменом. Авторами [1] отмечается необычно высокая относительная концентрация полученных димеров в кристалле-матрице, что было интерпретировано ими как результат взаимодействия между фрагментами димера через поле ян-теллеровских деформаций. Из данного экспериментального факта следовал вывод, что, если взаимодействие через поле ян-теллеровских деформаций есть и оно достаточно эффективно, появляется возможность синтеза в объёмах кристаллов примесных кластеров ян-теллеровских ионов. Авторы настоящей работы поставили перед собой цель – получить образцы кристалла $\text{BaF}_2\text{:Cu}$, содержащие в своём объёме сложные примесные образования с регулярной

структурой. В процессе выполнения работы были найдены благоприятные условия роста, при которых в выращенных образцах $\text{BaF}_2\text{:Cu}$ методом ЭПР были обнаружены уже известные центры одиночных ионов меди, $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-} (\text{C}_{4v})$, их димеры, $([\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-}-[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-}) (\text{C}_{4v})$, а также большое количество парамагнитных центров с эффективным спином $S_{\text{эф}} = 1/2$ и необычными магнитными свойствами. В работе [2] было показано, что новые центры представляют собой тримеры меди. Была определена их структура и рассмотрены основные причины необычных температурных и магнитных зависимостей в их спектрах ЭПР, которые наблюдались в диапазоне температур 4.2–77 К. В настоящей работе проведено исследование магнитных свойств тримеров в более широком температурном диапазоне 1.7–300 К.

Экспериментальные факты

Исследуемые кристаллы были выращены нами методом Бриджмена в графитовом тигле и в атмосфере газовой смеси гелия и фтора. Спектры ЭПР выращенных образцов регистрировались на спектрометре Вариан Е-12 в X-

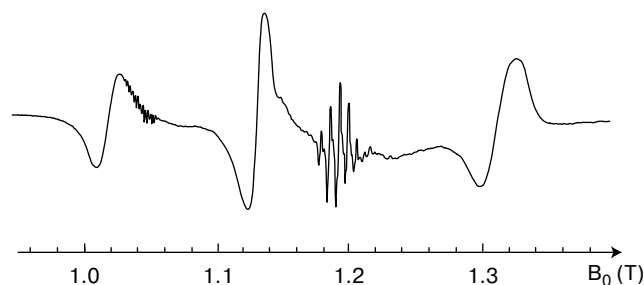


Рис. 1. Спектр ЭПР кристалла $\text{BaF}_2\text{:0.01Cu}$ на частоте 37.1 ГГц, при температуре $T = 4.2$ К в ориентации $B_0 \parallel (001)$.

и Q-диапазонах при температурах 1.7–300 К. На рис. 1 показан спектр одного из выращенных образцов, зарегистрированный в ориентации $B_0 \parallel \langle 001 \rangle$ при температуре 4.2 К, на частоте 37 ГГц (Q-диапазон). Две группы узких линий на этом рисунке соответствуют спектрам комплексов $[\text{CuF}_4\text{F}_4]^{6-}$ (C_{4v}). Они имеют разрешённые сверхтонкую и суперсверхтонкую структуры. Линии спектров ЭПР димеров меди здесь проявляются очень слабо из-за низкой температуры (в димерах реализовалось обменное взаимодействие антиферромагнитного характера, интервал между основным спиновым синглетом и возбуждённым триплетом примерно равен 30 см^{-1}). Три широкие бесструктурные линии на рис. 1 представляют новые центры, ориентированные относительно вектора B_0 шестью различными способами. Резонансные магнитные поля этих линий определяют три главных значения эффективного тензора g синтезированных парамагнитных центров.

В каждом из двух диапазонов, X (9.3 ГГц) и Q (37 ГГц), угловые зависимости в спектрах ЭПР синтезированных тримеров описываются эффективным спиновым гамильтонианом

$$\mathcal{H}_S = \mu_B B_0 g S, \quad (1)$$

где $S = 1/2$. В системе координат, оси которой совпадают с главными кристаллографическими направлениями в образце, [100], [010] и [001], эффективный тензор g имеет диагональную форму с тремя главными значениями g_x , g_y и g_z . Необычным в свойствах исследуемых центров оказалось то, что соответствующие главные значения тензора g оказались различными на двух указанных частотах ЭПР. Изучение температурной зависимости величин g_x , g_y и g_z выявило ещё одну особенность – их сильную зависимость от температуры. Эти зависимости (частотная и температурная) представлены на рис. 2. На этом рисунке

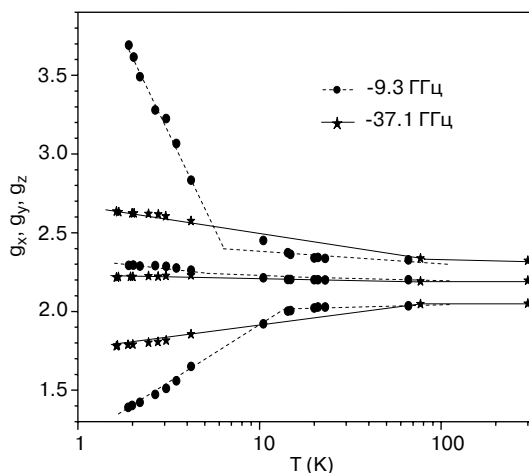


Рис. 2. Температурные зависимости компонент g -тензора тримеров меди в кристалле $\text{BaF}_2\text{:Cu}$: данные ЭПР, полученные в X (9.3 ГГц) и Q (37.1 ГГц) диапазонах, обозначения компонент соответствуют неравенствам $g_x > g_y > g_z$.

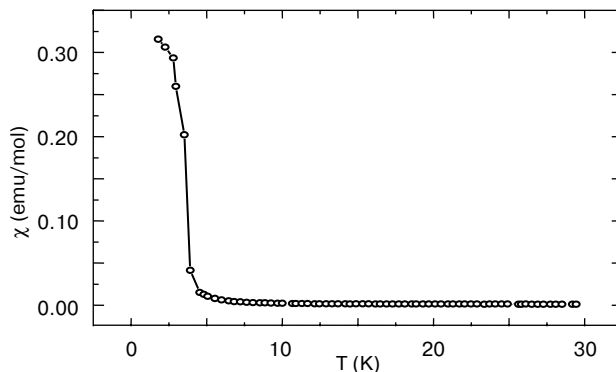


Рис. 3. Температурная зависимость магнитной восприимчивости образца кристалла $\text{BaF}_2\text{:0.01Cu}$.

видно, что в температурном диапазоне 8–300 К величины g_x , g_y и g_z плавно меняются в относительно небольших пределах. Эти величины также оказались слабо зависящими от величины внешнего магнитного поля: экспериментальные величины g_x , g_y и g_z оказались разными в X- и Q-диапазонах. В отличие от высокотемпературного диапазона, ниже 8 К зарегистрированы необычно сильные зависимости величин g_x и g_z от температуры и магнитного поля. Установлено, что форма исследуемого образца и величина концентрации меди в нём на вид температурных и магнитных зависимостей g_x , g_y и g_z не влияют.

В данной работе была также изучена температурная зависимость магнитной восприимчивости образцов кристаллов $\text{BaF}_2\text{:Cu}$, содержащих тримеры меди. График такой зависимости показан на рис. 3. Из этого графика видно, что восприимчивость образца резко возрастает с понижением температуры ниже уровня 4.5 К. Вид полученной зависимости $\chi(T)$ явно указывает на то, что при $T \approx 4.5 \text{ К}$ в исследуемых образцах наблюдается ферромагнитный фазовый переход. По-видимому, этот переход связан с ферромагнитным обменным взаимодействием тримеров друг с другом.

Обсуждение экспериментальных фактов

Ранее (в работе [1]) было установлено, что фрагментами димера меди в исследуемом кристалле являются одиночные центры меди, незначительно деформированные взаимодействием через поле ян-теллеровских деформаций. Выбор модели для исследуемых тримеров производился с учётом этого экспериментального факта. Было предположено, что тримеры также представляют собой некую комбинацию из одиночных центров меди. Полуполное значение эффективного спинового момента исследуемых центров указывало на нечётное число таких фрагментов. Было очевидным, что наиболее вероятной является модель центра, состоящая из связанных между собой трёх одиночных центров меди. Оставалось выяснить, как в

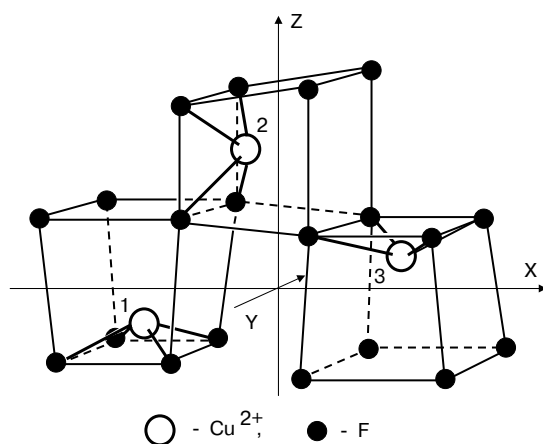


Рис. 4. Равновесная молекулярная структура тримера меди в кристалле $\text{BaF}_2:0.01\text{Cu}$.

составе тримера эти центры ориентированы друг относительно друга. Ответ на этот вопрос был получен в работе [2] на основе приближённых расчётов параметров эффективного спинового гамильтониана (1) и энергии образования тримера. Было показано, что молекулярная структура исследуемого тримера имеет вид, показанный на рис. 4. Очевидно, что она соответствует статическому состоянию тримера с минимальной энергией. Статические смещения ядер ионов, образующих этот тример, должны приводить к повышению его потенциальной энергии (адиабатического потенциала). Следовательно, можно говорить о том, что представленная на рис. 4 молекулярная структура соответствует дну наиболее глубокой ямы на поверхности этого потенциала. Из рисунка видно, что для рассматриваемого тримера существует другая равновесная ядерная конфигурация с той же потенциальной энергией. Она может быть получена из первоначальной (представленной на рис. 4) путём отражения в плоскости YOZ . В эту эквивалентную конфигурацию тример может перейти при соответствующих смещениях его ионных остовов. Расчёты энергии тримера, выполненные по ионной модели примесного кристалла с потенциалами Борна-Майера, показали, что, кроме двух основных стабильных ядерных конфигураций, у него должно быть несколько метастабильных конфигураций. Теоретический анализ экспериментальных фактов показал, что тример может переходить от одной конфигурации к другой как путём прямого туннелирования сквозь потенциальный барьер между двумя основными ямами адиабатического потенциала (АП), так и путём комбинированных переходов. Последние представляют собой последовательность нескольких процессов: надбарьерные переходы из первой основной ямы АП в возбуждённые ядерные конфигурации, туннелирование

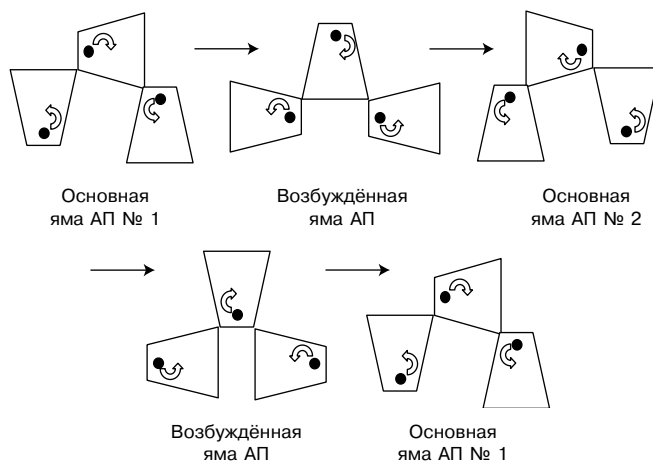


Рис. 5. Стимулированные температурой переходы тримера между ямами АП с участием возбуждённых конфигураций.

сквозь барьер между эквивалентными возбуждёнными ямами АП и релаксация в основное состояние, соответствующее основному колебательному уровню второй основной ямы АП. Один из возможных путей перехода такого рода показан схематично на рис. 5.

Экспериментальные температурные зависимости компонент g -тензора, полученные для температурного диапазона 8–77 К, указывают на то, что магнитные свойства тримера зависят от процессов, связанных с его переходами между двумя основными ямами АП. Магнитные зависимости этих параметров возникают из-за антисимметричного вклада в обменное взаимодействие между ионами меди, образующими рассматриваемый тример. При температурах $T < 8$ К положения линий ЭПР, по видимому, зависят от того, что в некоторых областях кристалла с более высоким содержанием тримеров начинает происходить магнитный фазовый переход в ферромагнитное состояние. Отметим, что в экспериментах не было обнаружено зависимости функций $g_x = f(T, B_0)$, $g_y = \phi(T, B_0)$ и $g_z = \varphi(T, B_0)$ от формы образца и от концентрации примесной меди в этом образце. Эти факты можно объяснить, если предположить, что: 1) тримеры распределены по кристаллу резко неоднородно; 2) ферромагнитный переход происходит лишь в тех областях кристалла (доменах), где концентрация тримеров оказывается достаточно высокой; 3) размеры таких доменов и концентрации тримеров в них примерно одинаковы.

Литература

1. Зарипов М.М., Уланов В.А.: ФТТ **31**, № 10, 254 (1989)
2. Уланов В.А., Зарипов М.М., Фазлижанов И.И.: ФТТ **47**, № 9, 1596 (2005)

Высокочастотная ЭПР спектроскопия $\text{Mg}_2\text{SiO}_4:\text{Tb}^{3+}$

А. А. Коновалов, В. Ф. Тарасов

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом высокочастотной перестраиваемой в диапазоне 80–300 ГГц ЭПР спектроскопии изучались монокристаллы синтетического форстерита (Mg_2SiO_4), легированного ионами тербия. Исследовались два монокристалла, выращенные методом Чохральского с концентрациями Tb_2O_3 в расплаве 5 и 10 вес. %. Обнаружено несколько структурно-неэквивалентных центров, принадлежащих одиночным ионам и парным центрам.

Введение

В настоящее время форстерит, легированный ионами хрома, хорошо известен как активная лазерная среда ближнего инфракрасного диапазона. Впервые в 1988 году лазерная генерация в диапазоне 1.17–1.37 мкм [1] была получена на ионах Cr^{4+} , замещающих кремний Si^{4+} в тетраэдрической позиции. Недавно на ионах Cr^{3+} в форстерите, содопированном хромом и литием, была получена импульсная и непрерывная лазерная генерация в диапазоне 1.03–1.18 мкм [2].

Методом высокочастотной перестраиваемой ЭПР спектроскопии впервые форстерит был исследован в работах [3, 4]. Оказалось, что этот метод позволяет надежно идентифицировать парамагнитные некрамерсовы центры, имеющие большое начальное расщепление уровней энергии, превышающее рабочую частоту обычных ЭПР спектрометров. Помимо этого обнаружилось, что в синтетическом форстерите могут образовываться пары примесных ионов с высокими концентрациями, сравнимыми с концентрацией одиночных ионов или превосходящими её [5]. Механизм, благоприятствующий ассоциации примесных ионов в димеры, связан в данном случае с условием сохранения электронейтральности кристалла при гетеровалентном замещении катионов матрицы примесными ионами. Трёхвалентные редкоземельные (РЗ) ионы замещают двухвалентные катионы Mg^{2+} с образованием ассоциатов $[\text{Re}^{3+}-\text{V}_{\text{Mg}}^{2+}-\text{Re}^{3+}]$ (V_{Mg} – магниева вакансия в подрешётке форстерита), совокупный электрический заряд которых равен заряду трёх замещаемых ионов Mg^{2+} , и таким образом электронейтральность кристалла сохраняется. Эти данные побудили нас заняться изучением синтетического форстерита, легированного РЗ ионами, поскольку трёхвалентные РЗ ионы (Ho^{3+} , Tm^{3+} , Er^{3+} и др.) в диэлектрических кристаллах могут обладать ап-конверсионной люминесценцией и представлять интерес как эффективные квантовые преобразователи инфракрасного излучения полупроводниковых лазеров в видимую область спектра. Другим возможным применением форстерита, легированного РЗ ионами, может быть область квантовых вычислений, поскольку в этой области рассматривается вопрос о возможности

применения подобных ионов, а в частности, и пар РЗ ионов в качестве элементов квантового компьютера.

В структуре форстерита имеется два кристаллографических различных типа кислородных октаэдров, внутри которых находятся ионы магния. Обычно эти позиции ионов Mg^{2+} обозначаются М1 и М2 [6]. В произвольной ориентации магнитного поля для М1 имеется четыре магнитно-неэквивалентных позиции, а в случае, когда магнитное поле ориентировано в плоскостях, перпендикулярных кристаллографическим осям, ионы, занимающие эту позицию, попарно магнитно-эквивалентны. В свою очередь, для произвольной ориентации магнитного поля относительно кристаллографических осей имеются два магнитно-неэквивалентных М2 центра, а в случае, когда магнитное поле лежит в плоскости *ac* или *bc*, оба центра становятся магнитно-эквивалентными.

Наши исследования по высокочастотной ЭПР спектроскопии РЗ ионов Ho^{3+} в синтетическом форстерите, обнаружили высокую степень самоорганизации ионов гольмия в пары [7, 8] в процессе роста кристаллов. Однако в противоположность этим результатам, исследование форстерита, легированного ионами тулия, не показало такого преимущественного механизма образования димеров. Вместо этого мы наблюдали, помимо основного центра одиночного иона, большое количество меньших по интенсивности спектров, принадлежащих парамагнитным центрам одиночного иона тулия, число которых увеличивается с ростом концентрации примеси [9, 10]. Образование этих центров, по-видимому, связано с проявлением различных типов нелокальной компенсации заряда примесного иона.

Эксперимент

В данной работе мы исследовали два монокристаллических образца синтетического форстерита, легированных ионами тербия и выращенных методом Чохральского с концентрациями Tb_2O_3 в расплаве 5 и 10 вес. % (образец 1 и образец 2, соответственно). Образцы имели неправильную форму с приблизительными размерами $1 \times 0.5 \times 0.5$ см и были оптически прозрачными.

Изучение структуры парамагнитных центров, образованных примесными ионами Tb^{3+} в синтетическом форстерите, проводилось методом высокочастотной ЭПР спектроскопии на квазиоптическом спектрометре [11] в диапазоне частот 80–300 ГГц. Эксперименты проводились при температуре образца 4.2 К в геометрии Фогта, соответствующей ортогональной ориентации волнового вектора микроволнового излучения относительно направления внешнего магнитного поля B , создаваемого резистивным электромагнитом в диапазоне 0–0.9 Тл. Вектор микроволнового магнитного поля B_1 во всех случаях был направлен параллельно B .

Нами было обнаружено несколько парамагнитных центров, принадлежащих ионам Tb^{3+} , различающихся величиной расщепления между электронными уровнями в нулевом магнитном поле. Особенности сверхтонкой структуры спектров позволяют идентифицировать эти центры как одиночный ион Tb^{3+} и, предположительно, димеры типа $Tb^{3+}-Tb^{3+}$. Причём, интенсивность линий “димерных” центров существенно превышала интенсивность линий одиночных ионов.

Первый центр (центр 1) состоял из 4 сравнительно узких линий шириной около 20 Гс, находящихся на равном расстоянии друг от друга. Угловая зависимость для этого центра не выявила магнитно-неэквивалентных центров, поэтому, исходя так же из свойств симметрии кристалла, мы приписываем этот центр одиночному иону тербия в позиции M2. Магнитный момент этого центра был направлен вдоль кристаллографической оси c и сигнал от него мы наблюдали только на образце 2. На рис. 1 представлен вид спектра и зависимость резонансных частот сверхтонких компонент спектра от магнитного поля для одиночного иона Tb^{3+} центра 1 в образце 2.

Спектр, принадлежащий, предположительно, димерному центру, имел более сложную структуру, которую нельзя представить в виде суперпозиции 4 линий (назовём его центр 2). Пример такого спектра приведён на рис. 2. Очевидно, что данный спектр имеет более слож-

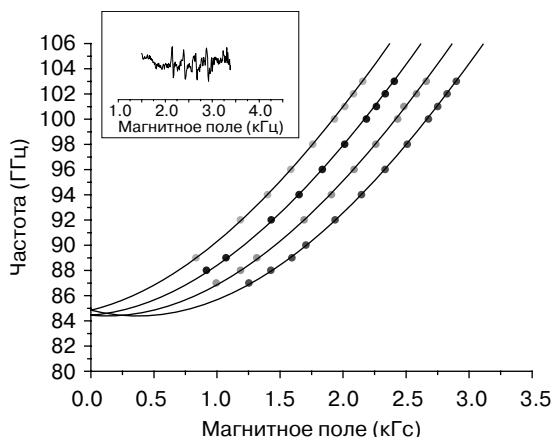


Рис. 1. Зависимость резонансной частоты сверхтонких компонент спектра от магнитного поля для одиночного иона Tb^{3+} центра 1 в образце 2. Кружки – эксперимент, линии – расчёт. На вставке представлен вид спектра одиночного иона. Частота 100 ГГц. $B_0 \parallel B_1 \parallel c$.

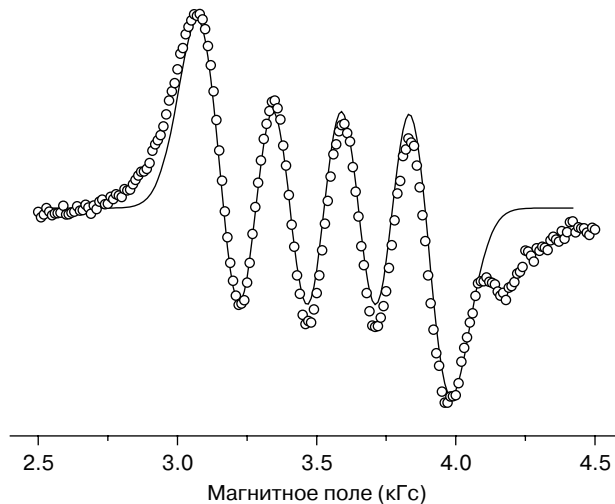


Рис. 2. Спектр ЭПР предположительно димерного центра $Tb^{3+}-Tb^{3+}$: кружки – эксперимент, линия – симуляция спектра для одиночного иона. Частота 210 ГГц, $T = 4.2$ К, $B_0 \parallel B_1 \parallel c$.

ную структуру, чем спектр одиночного иона. Поэтому мы полагаем, что данный спектр может принадлежать димерному центру. Ещё одним косвенным подтверждением того, что наблюдаемый нами парамагнитный центр принадлежит димеру, служит наблюдаемая нами картина частотно-полевой зависимости вблизи нулевого поля. На спектрах появляются узкие линии, обязанные, по-видимому, пересечению сверхтонких компонент ионов тербия (рис. 3). Измерение ориентационных зависимостей резонансных переходов этого центра показало, что направление оси z совпадает с кристаллографической осью c . Это хорошо видно на рис. 4, где представлены ориентационные зависимости, аппроксимированные зависимостью вида $B_{\text{extr}}/\cos(\vartheta)$. Отметим, что для этого центра и для центра 1 ориентационные зависимости совпадают.

Следующий центр также принадлежит, по нашему мнению, димеру ионов тербия. Он наблюдался в обоих образцах, но в образце 1 имел более разрешённую струк-

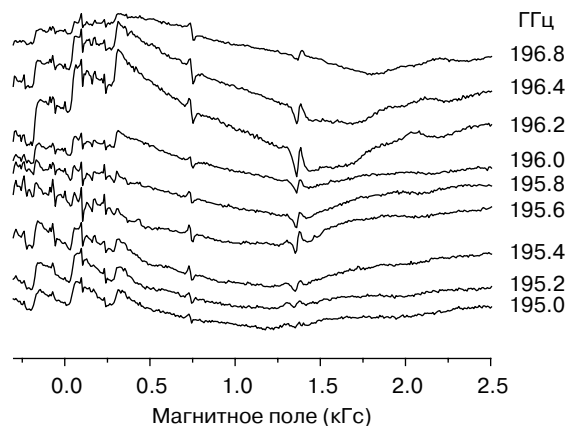


Рис. 3. Спектр ЭПР предположительно димерного центра $Tb^{3+}-Tb^{3+}$ вблизи нулевого значения магнитного поля, $B_0 \parallel B_1$, $B_0 \parallel c$.

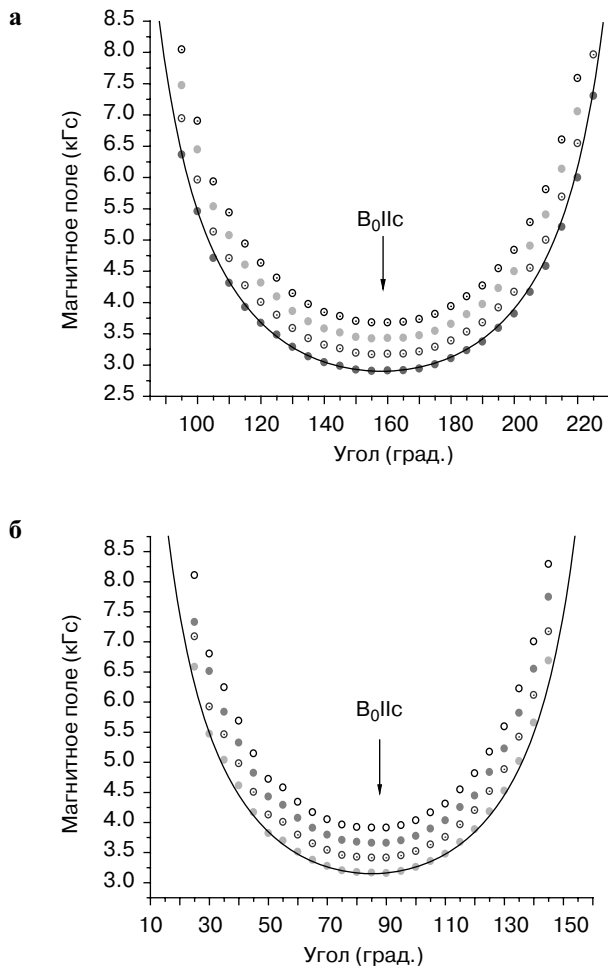


Рис. 4. Ориентационные зависимости для сверхтонких компонент спектра предположительно димерного центра тербия в образце 2, аппроксимированные зависимостью вида $B_{\text{ext}}/\cos(\theta)$. **а** Частота 208 ГГц, плоскость bc . **б** Частота 210 ГГц, плоскость ac , соответственно $B_0 \parallel B_1$. Точки – эксперимент, линии – зависимость вида $B_{\text{ext}}/\cos(\theta)$.

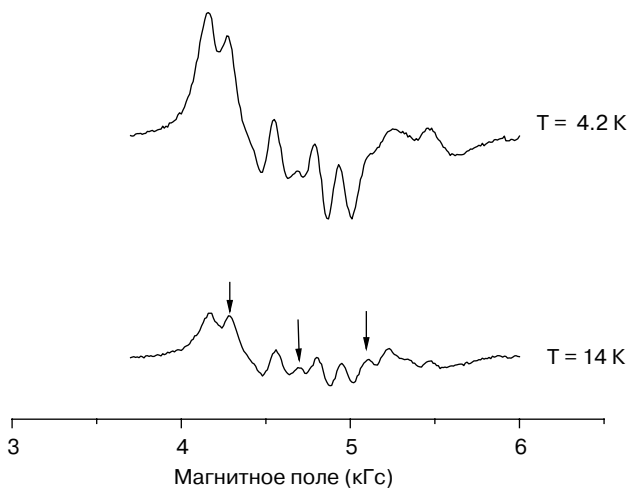


Рис. 5. Спектр центра 3 для образца 1. Частота 280 ГГц, $B_0 \parallel B_1 \parallel c$, стрелками показаны компоненты спектра, относительная амплитуда которых претерпевает изменения с увеличением температуры.

туру, что может свидетельствовать о влиянии концентрации примеси на ширину линии. Этот центр (назовём его центр 3) имел сложную форму спектра, но для него, в отличие от центра 2, мы наблюдали изменение вида спектра с повышением температуры, обязанное, по нашему мнению, наблюдению переходов с возбуждённых уровней. На рис. 5 стрелками показаны компоненты спектра, относительная амплитуда которых претерпевает изменения с увеличением температуры. Для этого центра наблюдалась, отличная от предыдущих двух центров, ориентационная зависимость. В плоскостях ac и bc проекция магнитного момента отклонена на 12 и 17 градусов от кристаллографической оси c , соответственно.

Обсуждение

Тербий имеет один стабильный изотоп ^{159}Tb с ядерным спином $I = 3/2$. Поэтому сверхтонкая структура спектра ЭПР одиночного иона Tb^{3+} должна состоять из 4 разрешённых переходов между ядерными подуровнями с одинаковыми проекциями ядерного момента на ось квантования ($\Delta m_I = 0$). Из литературных источников известно, что для Tb^{3+} в поле низкой симметрии основное состояние расщепляется до синглетов и зачастую внизу оказываются два близлежащих синглета, между которыми можно наблюдать парамагнитные резонансные переходы [12–14].

Для описания энергии уровней отдельного иона Tb^{3+} в магнитном поле использовался эффективный спиновый гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \Delta S_x + g_z \mu_B B_z S_z + A S_z I_z. \quad (1)$$

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.

Для описания димерных центров использовался эффективный спиновый гамильтониан:

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

Здесь $\mathcal{H}_i$ – спиновый гамильтониан одиночного иона вида (1), третий член соответствует энергии диполь-дипольного взаимодействия между ионами.

При расчёте теоретических частотно-полевых зависимостей использовались параметры спиновых гамильтонианов (1) и (2), приведённые в таблице 1.

Угловая зависимость для первого центра не выявила магнитно-неэквивалентных центров, поэтому, исходя так же из свойств симметрии кристалла, мы приписываем этот центр одиночному иону тербия в позиции M2. Центр 2 имеет схожую угловую зависимость, поэтому мы можем предположить, что данный димер образован двумя

Таблица 1. Параметры эффективного спинового гамильтониана для одиночного иона и димеров тербия в форстерите.

Параметр	Δ (ГГц)	g_z	A (ГГц)	J (ГГц)
Отд. ион	84.2 ± 1	16.6 ± 0.2	5.7 ± 0.2	
Димер 1	195.0 ± 1	16.0 ± 0.2	5.4 ± 0.2	-5.5 ± 0.5
Димер 2	262.5 ± 1	14.3 ± 0.2	5.5 ± 0.2	

ионами Tb^{3+} в позициях M2. Интенсивность этого центра более чем на 2 порядка превышает интенсивность спектра одиночного иона, что свидетельствует о значительном превышении концентрации димеров над одиночными ионами. Для более точного описания структуры второго и третьего центра необходимы дополнительные измерения.

Заключение

Таким образом, мы впервые исследовали методом высокочастотной ЭПР спектроскопии синтетический форстерит, легированный ионами тербия. Нами было обнаружено и изучено несколько структурно-неэквивалентных парамагнитных центров, принадлежащих как одиночным ионам, так и димерам. Были найдены параметры спинового гамильтониана и сделаны выводы о местоположении в решётке форстерита одиночного иона. Структура остальных центров в настоящее время нуждается в уточнении. Кроме этого, по предварительным данным в синтетическом форстерите, легированном ионами тербия, как и для ионов Ho^{3+} , наблюдается самоорганизация ионов Tb^{3+} в димеры с высокой концентрацией.

Авторы выражают благодарность за предоставление образцов Е. В. Жарикову и К. А. Субботину. Отдельное спасибо В. А. Шустову за рентгенографию образцов и М. М. Зарипову за интерес к работе и полезные замечания.

Работа была поддержана грантами РФФИ (№ 03-02-16374), НИОКР РТ (№ 06-6.1-75) и грантом Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.2).

Литература

1. Petričević V., Gayen S.K., Alfano R.R., et al.: Appl. Phys. Lett. **52**, no. 13, 1040–1042 (1988)
2. Гайстер А.В., Жариков Е.В., Лебедев В.Ф., Подставкин А.С., Теняков С.Ю., Шестаков А.В., Щербаков И.А.: Квантовая электроника **34**, вып. 8, 693 (2004)
3. Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С., Гавриленко А.Н.: ФТТ **37**, № 2, 499–504 (1995)
4. Тарасов В.Ф., Шакуров Г.С.: Оптика и спектроскопия **81**, № 6, 962–965 (1996)
5. Gaister A.V., Konovalov A. A., Shakurov G.S., Subbotin K.A., Tarasov V.F., Zharikov E.V.: Proc. SPIE (Ustugov V.V., ed.), vol. 5478, pp. 46–54. Bellinghane, Washington: SPIE – The Int. Society for Optical Engineering 2004.
6. Birle J.D., Gibbs G.V., Moore G.V., Smith J.V.: Am. Mineral. **53**, 807 (1968)
7. Гайстер А.В., Жариков Е.В., Коновалов А.А., Субботин К.А., Тарасов В.Ф.: Письма в ЖЭТФ **77**, вып. 11, 753–758 (2003)
8. Konovalov A.A., Lis D.A., Malkin B.Z., Nikitin S.I., Subbotin K.A., Tarasov V.F., Vorobieva E.N., Zharikov E.V., Zverev D.G.: Appl. Magn. Reson. **28**, 267 (2005)
9. Konovalov A.A., Lis D.A., Subbotin K.A., Tarasov V.F., Zharikov E.V.: Appl. Magn. Reson. **30**, 673–682 (2006)
10. Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2004. Ежегодник, с. 117–119. Казань: ФизтехПресс 2005.
11. Tarasov V.F., Shakurov G.S.: Appl. Magn. Reson. **2**, 571 (1991)
12. Куркин И.Н.: Парамагнитный резонанс, вып. 5, с. 31–73. Казань: Изд-во Казан. ун-та 1969.
13. Антипин А.А.: Парамагнитный резонанс, вып. 5, с. 74–100. Казань: Изд-во Казан. ун-та 1969.
14. Шакуров Г.С.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2003. Ежегодник, с. 111–114. Казань: ФизтехПресс 2004.

Анизотропные обменные взаимодействия в CuTe_2O_5

Р. М. Ерёмина, Т. П. Гаврилова

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

Методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) изучены обменные взаимодействия в монокристалле CuTe_2O_5 , в котором соседние спины меди объединяются в пары – димеры. Из анализа угловой зависимости g -факторов и ширины линии ЭПР, зарегистрированной на частоте 160 ГГц, определена величина симметричного обменного взаимодействия между димерами, равная около 0.5 К. Установлены направления локальных осей g -тензоров.

Введение

Наблюдение спин-пайерлсовского перехода в CuGeO_3 [1] стимулировало интенсивные исследования низкоразмерных веществ. Так, в CuTe_2O_5 при понижении температуры наблюдалось, также как и в CuGeO_3 , уменьшение магнитной восприимчивости вдоль трёх кристаллографических направлений [2]. Это говорит о том, что основное состояние меди немагнитное со спином $S = 0$. Анализ структурных данных позволяет предположить, что в CuTe_2O_5 происходит димеризация спинов меди, то есть образуется димер со спином $S = 0$ в основном и $S = 1$ в возбуждённом состояниях. Кристаллическая структура CuTe_2O_5 принадлежит к пространственной группе $P2_1/c$. Элементарная ячейка включает четыре формульные единицы, ее размеры $a = 6.871 \text{ \AA}$, $b = 9.322 \text{ \AA}$, $c = 7.602 \text{ \AA}$, $\beta = 109.08^\circ$ [3]. Ионы меди окружены шестью атомами кислорода, которые формируют сильно искажённый октаэдр. Два октаэдра, соединённых общим ребром, определяют магнитные свойства вещества. Расстояние между соседними ионами меди в паре составляет $3.18 \text{ \AA}$, расстояние между соседними парами $5.28 \text{ \AA}$. Ион меди расположен на расстоянии $1.95 \text{ \AA}$ от иона кислорода O5, на $1.961 \text{ \AA}$ от O4, на $1.953 \text{ \AA}$ от O1, на $1.969 \text{ \AA}$ от O3; кислород O5' расположен на расстоянии $2.303 \text{ \AA}$ от иона меди и является кислородом O5 для соседнего октаэдра (рис. 1). Два соседних октаэдра, соединённых общим ребром, магнитно эквивалентны. Ок-

таэдры соседних пар развёрнуты друг относительно друга. Катионы Te^{4+} изолируют пары ионов меди друг от друга. Магнитная восприимчивость CuTe_2O_5 имеет максимум при температуре 56.6 К . Аппроксимация хода температурной зависимости восприимчивости при высоких температурах определяет температуру Кюри $\theta = 41 \text{ К}$.

В работе [4] для выяснения природы обменных взаимодействий в CuTe_2O_5 и описания температурной зависимости магнитной восприимчивости использовали несколько моделей. Наилучшим образом экспериментальные результаты описывались в двух приближениях. Первое – модель квазиодномерной антиферромагнитной цепочки спинов с альтернированным обменным взаимодействием J_1 и J_2 . Из аппроксимации экспериментальных данных получено, что $J_1 = 93.3 \text{ К}$, $J_2 = 40.7 \text{ К}$. Во втором случае – это модификация уравнения Блيني-Бауэrsa [4] в приближении среднего поля, аппроксимация температурной зависимости магнитной восприимчивости в этом случае даёт $J = 88.9 \text{ К}$ – обменное взаимодействие спинов ионов меди внутри димера, $J' = 91.4 \text{ К}$ – между спинами ионов меди соседних димеров. Из анализа температурной зависимости магнитной восприимчивости в [4] однозначно определить параметры симметричного обменного взаимодействия не удалось. Ясно только, что максимальная величина обменного симметричного взаимодействия около 91 К , но между какими ионами меди осуществляется это взаимодействие – непонятно. Авторами [4] из анализа позиций ионов меди и ближайшего окружения рассчитаны параметры симметричного обменного взаимодействия. Установлено, что хотя ближайшее расстояние между ионами меди $3.18 \text{ \AA}$ (рис. 2а), рассчитанная величина симметричного обменного взаимодействия внутри этой пары составляет только 59% от максимального значения, что составляет примерно $J_{1a} = 54 \text{ К}$. Структура пар ионов меди, расположенных на кратчайшем расстоянии, приведена на рис. 2а. Самая большая рассчитанная величина косвенного обменного взаимодействия получается для спинов ионов меди, взаимодействующих через ионы кислорода и теллура (см. рис. 2б) $J_{1b} = 91.4 \text{ К}$. Метод магнитной восприимчивости является интегральным, ос-

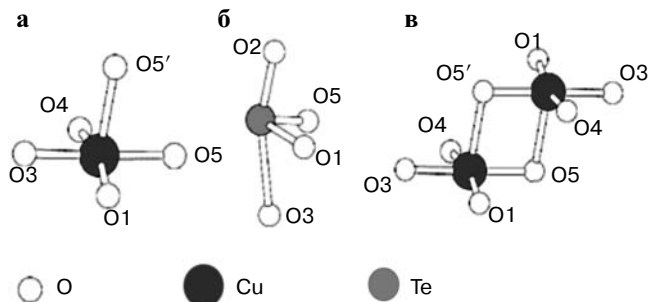


Рис. 1. Элементарные единицы, формирующие структуру CuTe_2O_5 : а CuO_6 , б TeO_4 , в Cu_2O_8 .

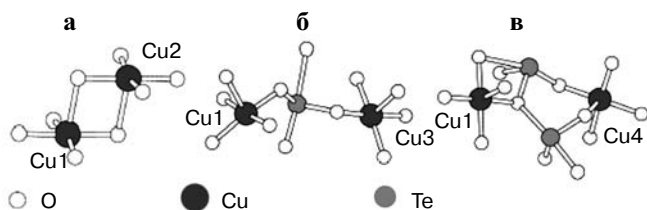


Рис. 2. Пары ионов меди: расположенные наиболее близко на расстоянии 3.18 Å (а), взаимодействие между которыми максимально (б), взаимодействие между которыми минимально (в).

новой вклад в температурную зависимость магнитной восприимчивости дают наиболее сильные обменные взаимодействия, тогда как метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) позволяет изучить природу анизотропных обменных взаимодействий на основе анализа угловой зависимости ширины линии ЭПР в трёх взаимно-перпендикулярных кристаллографических плоскостях. Для изучения природы обменных взаимодействий в монокристалле CuTe_2O_5 были проведены измерения частотной и угловой зависимостей спектров ЭПР ионов меди в данном соединении. Также метод ЭПР позволяет определить величину симметричного обменного взаимодействия между магнитно-неэквивалентными ионами меди, поскольку наличие магнитной неэквивалентности ионов меди вызывает возникновение анизотропного эффекта Зеемана, который приводит к уширению линии ЭПР.

Эксперимент

Исследуемый образец CuTe_2O_5 представлял собой монокристалл $0.2 \times 1 \times 1$ мм, прозрачный, цвета морской волны. Данный образец был предоставлен П. Лемменсом (Университет г. Брауншвейга, Германия). Экспериментальное исследование спектров ЭПР проводилось на спектрометре Брукер EleXsys E500 CW в нескольких частотных диапазонах в температурной области от 5 до 300 К. Измерения спектров ЭПР на высокой частоте проводились квазиоптическими методами. При температурах от 25 до 300 К спектр ЭПР ионов меди в CuTe_2O_5 состоит из одной линии, имеющей лоренцеву форму. Температурный ход интегральной интенсивности линии ЭПР соответствует температурному поведению магнитной восприимчивости. С понижением температуры интегральная интенсивность линии уменьшается. В районе 25 К линия расщепляется на несколько компонент. Мы связываем появление этих сигналов в спектре ЭПР с наличием дефектов в кристалле CuTe_2O_5 , в результате чего часть пар ионов меди не димеризуется. Природа парамагнитных центров, проявляющихся в спектре ЭПР при низких температурах, будет темой последующих исследований. В данной статье нами рассматривается лоренцева обменно-суженная линия ЭПР ионов меди в CuTe_2O_5 при температуре 200 К. Исследование угловой зависи-

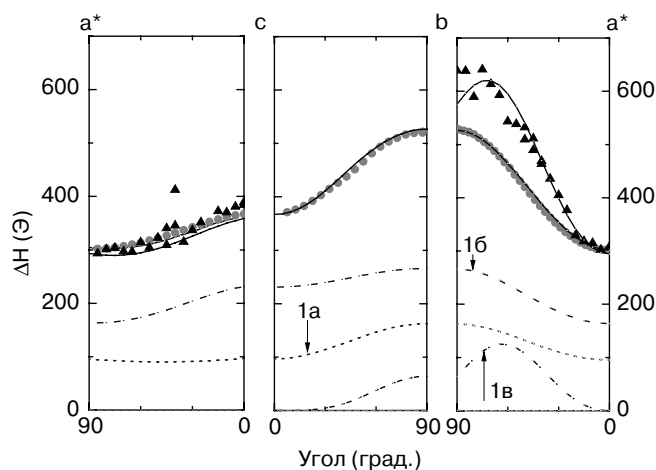


Рис. 3. Угловые зависимости ширины линии ЭПР в CuTe_2O_5 в двух диапазонах частот: 9.4 ГГц (●) и 160 ГГц (▲) в трёх кристаллографических плоскостях при $T = 200$ К. Пунктиром показан вклад в ширину линии ЭПР спин-спиновых взаимодействий между ионами меди внутри димера – кривая 1а. Штриховой линией показан вклад спин-спиновых взаимодействий между ионами меди из соседних димеров – кривая 1б. Штрихпунктирной линией обозначен вклад анизотропного эффекта Зеемана на частоте 160 ГГц – кривая 1в. Сплошная линия – сумма всех вкладов.

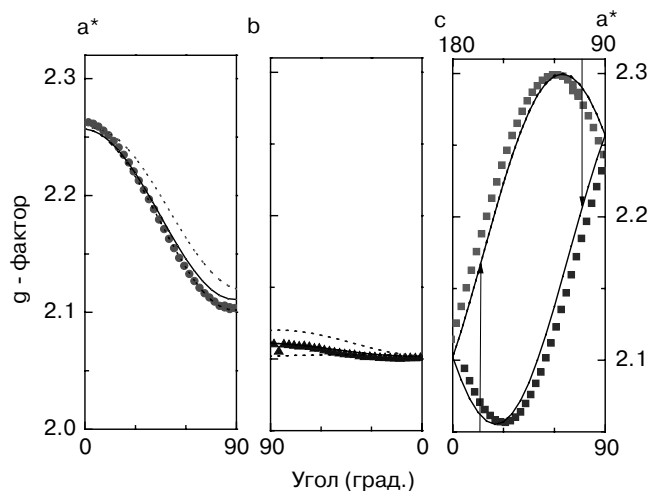


Рис. 4. Угловые зависимости положения линии ЭПР в CuTe_2O_5 в X-диапазоне в трёх кристаллографических плоскостях: ● – (a^*b), ▲ – (bc), ■ – (a^*c) при температуре 300 К. Пунктиром показаны угловые зависимости положения линии ЭПР для каждого из двух магнитно-неэквивалентных ионов по отдельности. Сплошная линия – теоретический расчёт.

мости ширины данной линии при температуре 200 К проводилось в двух диапазонах частот: 9.4 и 160 ГГц (см. рис. 3). При понижении температуры ширина линии ЭПР вдоль оси b растёт значительно, а вдоль осей a и c практически не меняется. В спектре ЭПР, зарегистрированном на высокой частоте, наблюдается резкое увеличение ширины линии ЭПР только вдоль оси b кристалла. Угловая зависимость g -фактора линии ЭПР в CuTe_2O_5 при температуре 300 К приведена на рис. 4. Анизотропия положения линии практически не зависит от температуры и частоты, при которой проводился эксперимент.

Обсуждение

Спиновый гамильтониан включает обменные взаимодействия внутри димера меди (индексы 1, 2), J_{1a} – параметр обменного взаимодействия для пары ионов меди на рис. 2а, между соседними димерами (индексы 1, 3), J_{1b} – параметр обменного взаимодействия для пары ионов меди на рис. 2б, J_{1c} – величина симметричного обменного взаимодействия между магнитно-неэквивалентными ионами меди на рис. 2в и взаимодействие Зеемана:

$$\mathcal{H} = J_{1a}(S_1 S_2) + \sum_{\alpha, \beta=x, y, z} J_{1a}^{\alpha\beta} S_1^\alpha S_2^\beta + J_{1b}(S_1 S_3) + \sum_{\alpha, \beta=x, y, z} J_{1b}^{\alpha\beta} S_1^\alpha S_3^\beta + \sum_{\substack{\alpha, \beta=x, y, z \\ \gamma=1, 3}} g_\gamma^{\alpha\beta} \mu_B H_\gamma^\alpha S_\gamma^\beta + J_{1c}(S_1 S_4). \quad (1)$$

Ранее было проведено исследование угловой зависимости ширины линии ЭПР при $T = 200$ К в X-диапазоне, результаты данных исследований опубликованы в [5]. В данной статье анализируется вклад в ширину линии ЭПР, который сильно зависит от частоты внешнего магнитного поля. Из анализа структурных данных следует, что в элементарной ячейке существуют два магнитно-неэквивалентных октаэдра ионов кислорода, окружающих парамагнитные ионы меди, от которых наблюдается сигнал ЭПР. Так как в спектре ЭПР наблюдается одна линия, то её эффективный g -фактор есть среднее значение g -факторов двух центров меди, расположенных в неэквивалентных позициях. С другой стороны, квадрат разницы между двумя g -факторами входит в выражение для ширины линии ЭПР, что приводит к значительному уширению линии на высоких частотах, это есть проявление анизотропного эффекта Зеемана. Вклад в ширину линии ЭПР из-за анизотропного эффекта Зеемана рассчитывается по формуле:

$$\Delta H_{AZ} = \left(\frac{\Delta g}{g} \right)^2 \frac{g \mu_B H_{\text{res}}^2}{J_{1c}}$$

[6], где Δg – разность эффективных g -факторов ионов 1 и 3, J_{1c} – величина симметричного обменного взаимодействия между магнитно-неэквивалентными ионами меди.

Как следует из угловой зависимости ширины линии ЭПР, зарегистрированной при частоте внешнего СВЧ поля 160 ГГц, разность между двумя g -факторами двух неэквивалентных октаэдров максимальна вдоль оси b кристалла и минимальна вдоль других направлений. Поскольку геометрические размеры двух магнитно-неэквивалентных октаэдров одинаковы, то в локальной системе координат октаэдров значения g -факторов также должны быть равны. Локальные системы координат g -тензоров симметрично развёрнуты относительно кристаллографической системы координат. Нами совместно проанализированы угловые зависимости g -факторов и

ширины линии ЭПР ионов меди в CuTe_2O_5 , оба эксперимента проводились при температуре 200 К и частоте внешнего СВЧ поля 160 ГГц. Используя результаты аппроксимации ширины линии ЭПР в X-диапазоне при $T = 200$ К, проанализированы новые экспериментальные данные. Установлено, что экспериментальные угловые зависимости g -фактора и ширины линии ЭПР при частоте эксперимента 160 ГГц достаточно хорошо описываются двумя g -тензорами, g -тензоры имеют диагональный вид $g(1) = \{2.055; 2.10; 2.30\}$ и $g(2) = \{2.056; 2.12; 2.30\}$ в локальной системе координат. Нами получены направления осей в локальной системе координат с точностью порядка одного градуса:

$$\begin{pmatrix} -0.4289 & 0.0093 & -0.9033 \\ 0.0554 & 0.9983 & -0.0161 \\ 0.9017 & -0.0569 & -0.4287 \end{pmatrix} \text{ и}$$

$$\begin{pmatrix} -0.4278 & -0.0252 & 0.9035 \\ -0.0523 & -0.9972 & -0.0526 \\ 0.9024 & -0.0698 & 0.4253 \end{pmatrix}.$$

Ось, вдоль которой значение g максимально, практически совпадает с направлением $\text{Cu-O}5'$, другие две главные оси g -тензора практически лежат в базальной плоскости октаэдра CuO_6 , одна из них совпадает с направлением, перпендикулярным связи $\text{O}_1\text{-O}_3$, вторая – с направлением, перпендикулярным связи $\text{O}_1\text{-O}_5$.

Величина симметричного обменного взаимодействия между спинами ионов меди из соседних магнитно-неэквивалентных октаэдров составила величину $J_{1c} \sim 0.5$ К. На рис. 2в представлена пара ионов меди, для которой рассчитанная величина изотропного симметричного обменного взаимодействия через ближайшие лиганды кислорода и теллура составляет 1% от максимального значения. Так как для двух моделей, описывающих температурную зависимость магнитной восприимчивости, максимальная величина изотропного симметричного обмена практически совпадает [4] $J_1 = 93.3$ К, а $J' = 91.4$ К, то для оценки величин анизотропного обмена использовали величину $J = (J_1 + J')/2 = 92.4$ К. Теоретически рассчитанная величина симметричного обменного взаимодействия для пары, приведённой на рис. 2в, составляет порядка 0.9 К и практически совпадает с $J_{1c} \sim 0.5$ К – значением, полученным из экспериментальных данных.

В [7] приведены выражения (7.110) для главных значений g -тензора ионов конфигурации d^9 в октаэдрическом окружении в случае тригональных искажений из-за эффекта Яна-Теллера:

$$g_1 = 2 - \frac{2\lambda}{\Delta} \left(\cos \frac{1}{2} \phi - \sqrt{3} \sin \frac{1}{2} \phi \right)^2,$$

$$g_2 = 2 - \frac{2\lambda}{\Delta} \left(\cos \frac{1}{2} \phi + \sqrt{3} \sin \frac{1}{2} \phi \right)^2,$$

$$g_3 = 2 - \frac{8\lambda}{\Delta} \cos^2 \frac{1}{2} \phi, \quad (2)$$

где λ/Δ – отношение величины спин-орбитального взаимодействия к расстоянию между основным и возбуждённым состояниями. Собственная функция основного состояния имеет вид:

$$\cos \frac{1}{2} \phi |x^2 - y^2\rangle + \sin \frac{1}{2} \phi |3z^2 - r^2\rangle. \quad (3)$$

Из анализа полученных главных значений g -тензора следует, что $-\lambda/\Delta = 0/038$, $\cos 1/2\phi \approx 0.99$. В этом случае собственная функция основного состояния имеет вид $|x^2 - y^2\rangle$ в базальной плоскости октаэдра O1-O3-O5-O4.

Экспериментальные угловые зависимости g -фактора прекрасно описываются теоретическими кривыми, представленными на рис. 4.

Заключение

Проведено изучение магнитных взаимодействий в монокристалле CuTe_2O_5 методом ЭПР. Из анализа угловых зависимостей g -факторов и ширин линий ЭПР на часто-

тах 9.4 и 160 ГГц определена величина симметричного обменного взаимодействия между спинами меди соседних димеров, которая составила около 0.5 К. Определены направления локальных осей g -тензора двух магнитно-неэквивалентных октаэдров.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 06-02-17401).

Работа выполнена совместно с Х.-А. Круг фон Нидда, А. Пименовым, И. Дайзенхофером и А. Лойдлом из Университета г. Аугсбурга (Германия).

Литература

1. Hase M., Terasaki I., Uchinokura K.: Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993)
2. Lemmens P., Guntherodt G., Gros C.: Phys. Reports **375** (2003)
3. Hanke K., Kupcik V., Lindqvist O.: Acta Cryst. B **29**, 963 (1973)
4. Deisenhofer J., Eremina R.M., Pimenov A., Gavrilova T., Berger H., Johnsson M., Lemmens P., Krug von Nidda H.-A., Loidl A., Lee K.-S., Whangbo M.-H.: Phys. Rev. B **74**, 174421 (2006)
5. Ерёмин Р.М.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2004. Ежегодник, с. 127. Казань: ФизтехПресс 2005.
6. 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.: Phys. Rev. B **67**, 224418 (2003)
7. Абрагам А., Блинн Б.: Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т. 1. М.: Мир 1972. 672 с.

Магнитооптическая спектроскопия парамагнитных центров кубической симметрии Yb^{3+} в кристаллах структурного ряда флюорита

К. И. Герасимов, М. Л. Фалин

Лаборатория радиоспектроскопии диэлектриков

В кристаллах типа флюорита MeF_2 ($\text{Me} = \text{Cd}, \text{Ca}, \text{Pb}$) проведено исследование парамагнитных центров кубической симметрии, образуемых примесным ионом Yb^{3+} , методами магнитного циркулярного дихроизма и циркулярной поляризации люминесценции, зеемановских расщеплений оптических линий поглощения и люминесценции. Определены g -факторы нижнего состояния в возбуждённом мультиплете $^2F_{5/2}$ и свойства симметрии всех энергетических уровней Yb^{3+} в MeF_2 . Вычислены параметры кристаллического поля в исследуемых кристаллах.

Введение

Кристаллы структурного ряда флюорита (CdF_2 , CaF_2 , SrF_2 , PbF_2 , BaF_2) имеют кубическую кристаллическую решётку и легко активируются редкоземельными ионами (РЗИ). При этом трёхвалентный примесный ион замещает двухвалентный катион Me^{2+} решётки флюорита, а компенсация избыточного положительного заряда чаще всего осуществляется ионами F^- , внедряющихся в центры пустых кубов анионной подрешётки. Если это междоузлие, ближайшее к РЗИ, то образуются парамагнитные центры (ПЦ) тетрагональной ($T_{\text{тетр}}$) или тригональной ($T_{\text{триг}}$) симметрий. В случае нелокальной компенсации заряда трёхвалентный примесный ион образует ПЦ кубической симметрии – T_k . В настоящее время ПЦ Yb^{3+} достаточно хорошо изучены методами ЭПР, ДЭЯР и оптической спектроскопии [1–6]. Тем не менее, до настоящего момента для T_k отсутствовало достаточное количество экспериментальных данных для определения надёжных параметров кристаллического поля. А именно, в PbF_2 и CaF_2 верхний шарковский уровень основного мультиплета $^2F_{7/2}$ оставался неопределённым экспериментально и отсутствовала однозначность в определении свойств симметрии двух уровней в нижнем мультиплете ($^1\Gamma_8$ и Γ_6), в CdF_2 экспериментально не определены два энергетических уровня в нижнем мультиплете. Для решения данной проблемы были проведены исследования T_k в кристаллах CdF_2 , CaF_2 и PbF_2 методами магнитооптической спектроскопии.

Экспериментальные результаты и обсуждение

Кристаллы $\text{MeF}_2:\text{Yb}^{3+}$ ($\text{Me} = \text{Cd}, \text{Ca}, \text{Pb}$) были выращены методом Бриджмена-Стокбаргера в графитовых тиглях в атмосфере фтора. Оптические спектры и спектры магнитного циркулярного дихроизма (МЦД) и магнитной циркулярной поляризации люминесценции (МЦПЛ),

зеемановского расщепления линий поглощения и люминесценции регистрировались на самодельном многофункциональном спектрометре [7] при $T = 2, 77$ и 300 К.

На рис. 1 представлены спектры люминесценции и возбуждения $\text{MeF}_2:\text{Yb}^{3+}$. Спектры люминесценции регистрировались при селективном возбуждении на частотах $10392, 10381$ и 10346 см^{-1} для CdF_2 , CaF_2 и PbF_2 , соответственно. Угловые зависимости величин расщепления линий поглощения и люминесценции с данными частотами в магнитном поле, аналогично работе [8], имеют изотропный характер, что доказывает принадлежность данных линий T_k и переходу $^1\Gamma_7 \leftrightarrow ^2\Gamma_7$.

Величины расщеплений и интенсивности линий, поляризованных параллельно и перпендикулярно направлению магнитного поля (π и σ -компоненты, соответственно), в зеемановских спектрах (рис. 2) позволили определить g -факторы нижнего состояния в возбуждённом мультиплете и установить, что данные линии соответствуют магнитным дипольным переходам. Две наиболее интенсивные линии люминесценции в области частот $9600\text{--}9800 \text{ см}^{-1}$ можно соотнести с переходами $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_8$ и $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$. Наиболее интенсивную из данных линий в CaF_2 авторы работы [9] сопоставили с переходом $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_8$, однако переход $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$ остался неопределённым. Для однозначного сопоставления линий люминесценции переходам на уровни $^1\Gamma_8$ и Γ_6 были исследованы угловые зависимости зеемановского расщепления данных линий. Для CaF_2 фрагменты спектров люминесценции для трёх основных ориентаций кристалла относительно постоянного магнитного поля H представлены на рис. 3 и 4, в нижней части рис. 3 схематически показаны правила отбора по поляризации для переходов в магнитном поле. Величины расщеплений и интенсивности зеемановских компонент линии на частоте 9737 см^{-1} (рис. 3) имеют явную угловую зависимость, что полностью подтверждает предположение о том, что данная линия соответствует переходу $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_8$, поскольку расщепление квантета $^1\Gamma_8$ в магнитном поле не изотропно [10]. Для линии

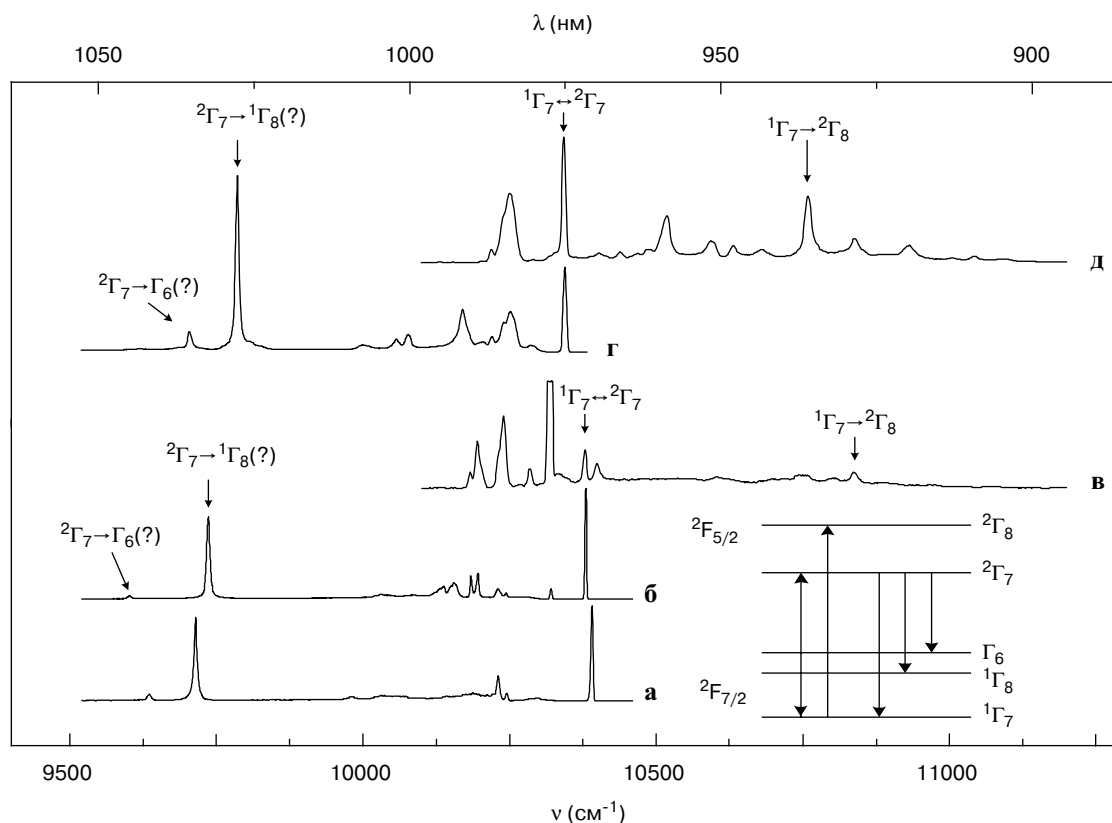


Рис. 1. Спектры люминесценции (а, б, г) и возбуждения (в, д) Yb^{3+} в CdF_2 (а), CaF_2 (б, в), PbF_2 (г, д) при $T = 2$ К. На вставке рисунка показана схема энергетических уровней T_k .

на частоте 9603 см^{-1} такой зависимости не наблюдается, что свидетельствует в пользу того, что она не является электронно-колебательным спутником линии на частоте 9737 см^{-1} и, следовательно, соответствует переходу $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$. Однако линия люминесценции на частоте 9603 см^{-1} имеет большую ширину и изменения зеемановских спектров

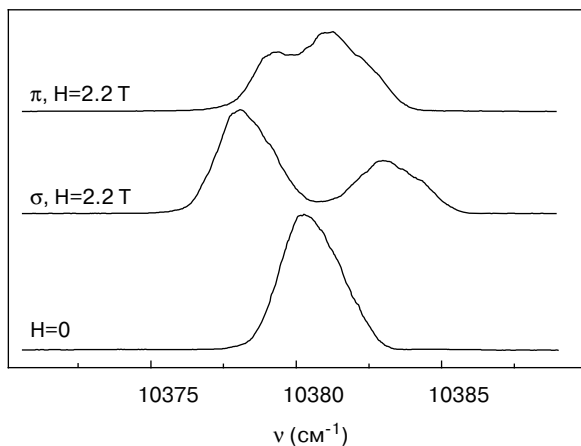


Рис. 2. Спектр зеемановского расщепления линии люминесценции на $\nu = 10381\text{ см}^{-1}$ ($^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_7$) Yb^{3+} в CaF_2 при $T = 2$ К.

при вращении кристалла относительно направления магнитного поля могут быть скрыты в этой ширине линии.

Спектры аналогичного характера наблюдались также и для CdF_2 и PbF_2 . Для подтверждения предположения о том, что линия с меньшей интенсивностью в области частот $9600\text{--}9800\text{ см}^{-1}$ соответствует переходу $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$, а не является электронно-колебательным спутником перехода $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_8$, были проведены измерения спектров МЦПЛ. Теоретические значения g -факторов уровней $^1\Gamma_7$, Γ_6 , $^2\Gamma_7$ +3.43, -2.67 и -1.4, соответственно. Таким образом, переходы $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_7$ и $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$ происходят с одного и того же уровня на уровни с разными знаками g -факторов. В спектрах МЦПЛ, представляющих собой разность интенсивностей лево- и правополяризованной люминесценции ($I_{\sigma-} - I_{\sigma+}$), для магнитных дипольных переходов это будет проявляться в том, что для перехода $^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_7$ положительная составляющая МЦПЛ будет ниже по частоте, чем отрицательная, а для перехода $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$, наоборот. Такое поведение линий МЦПЛ подтверждается экспериментально (рис. 5), что доказывает предположение о том, что линии люминесценции с частотами 9637 , 9603 , 9704 см^{-1} в CdF_2 , CaF_2 и PbF_2 , соответственно, принадлежат электронному переходу $^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$.

Таким образом, в результате проведённых исследований определены g -факторы нижнего состояния в воз-

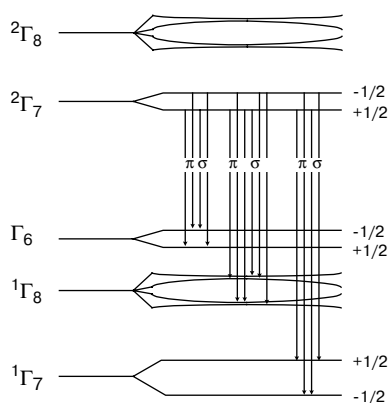
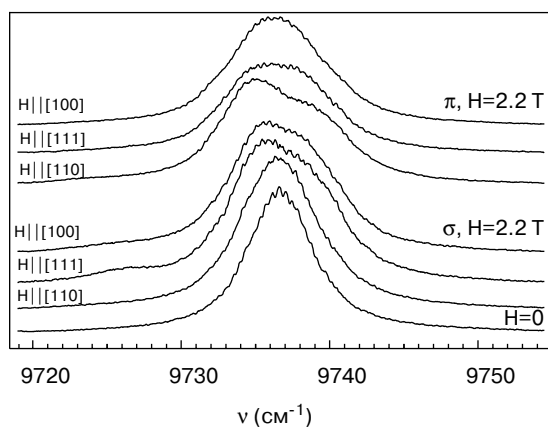


Рис. 3. Спектры зеемановского расщепления линии люминесценции на $\nu = 9737 \text{ см}^{-1}$ ($^2\Gamma_7 \rightarrow ^1\Gamma_8$) Yb^{3+} в CaF_2 для трёх основных ориентаций кристалла относительно направления H при $T = 2 \text{ K}$. На вставке показана схема энергетических уровней T_k и правила отбора по поляризации для магнитных дипольных переходов при регистрации люминесценции в направлении перпендикулярном H .

буждённом мультиплете T_k и свойства симметрии всех энергетических уровней данного ПЦ в MeF_2 . Полученные данные, в дополнение к ранее опубликованным [1–5], позволили определить более надёжные и точные параметры кристаллического поля (КП). В таблицах 1 и 2

Таблица 1. Уровни энергии (в см^{-1}) и g -факторы для $T_k \text{ Yb}^{3+}$ в MeF_2 .

		CdF_2		CaF_2		PbF_2	
		Эксперимент	Расчёт	Эксперимент	Расчёт	Эксперимент	Расчёт
$^2F_{5/2}$	$^2\Gamma_8$	10867	10871	10840	10848	10761	10764
	$^2\Gamma_7$	10392	10374	10381	10343	10346	10333
	$g(^2\Gamma_7)$	1.42	–1.396	1.42	–1.401	1.43	–1.403
$^2F_{7/2}$	Γ_6	755	741	778	749	642	632
	$^1\Gamma_8$	676	669	644	629	561	556
	$^1\Gamma_7$	0	0	0	0	0	0
	$g(^1\Gamma_7)$	3.436	3.484	3.438	3.48	3.434	3.476

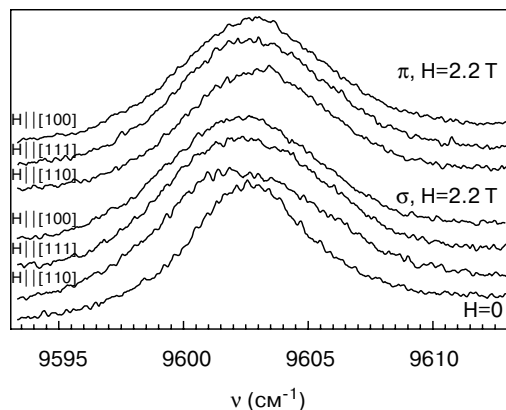


Рис. 4. Спектры зеемановского расщепления линии люминесценции на $\nu = 9603 \text{ см}^{-1}$ ($^2\Gamma_7 \rightarrow \Gamma_6$) Yb^{3+} в CaF_2 для трёх основных ориентаций кристалла относительно направления H при $T = 2 \text{ K}$.

Таблица 2. Параметры (в см^{-1}) КП B_4 , B_6 и спин-орбитального взаимодействия ξ для $T_k \text{ Yb}^{3+}$ в MeF_2 . a_0 – постоянная кристаллической решётки.

Кристалл	$a_0 (\text{\AA})$	ξ	B_4	B_6
CdF_2	5.362	2906	–229	32
CaF_2	5.446	2904	–230	25
PbF_2	5.904	2907	–196	24.8

представлены экспериментальные результаты, которые сопоставлены с расчётными, вычисленными на основе полученных параметров КП.

Благодарности

Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (№ 06-02-17481), фондом CRDF (REC-007) и грантом Президента РФ (МК-3475.2006.2).

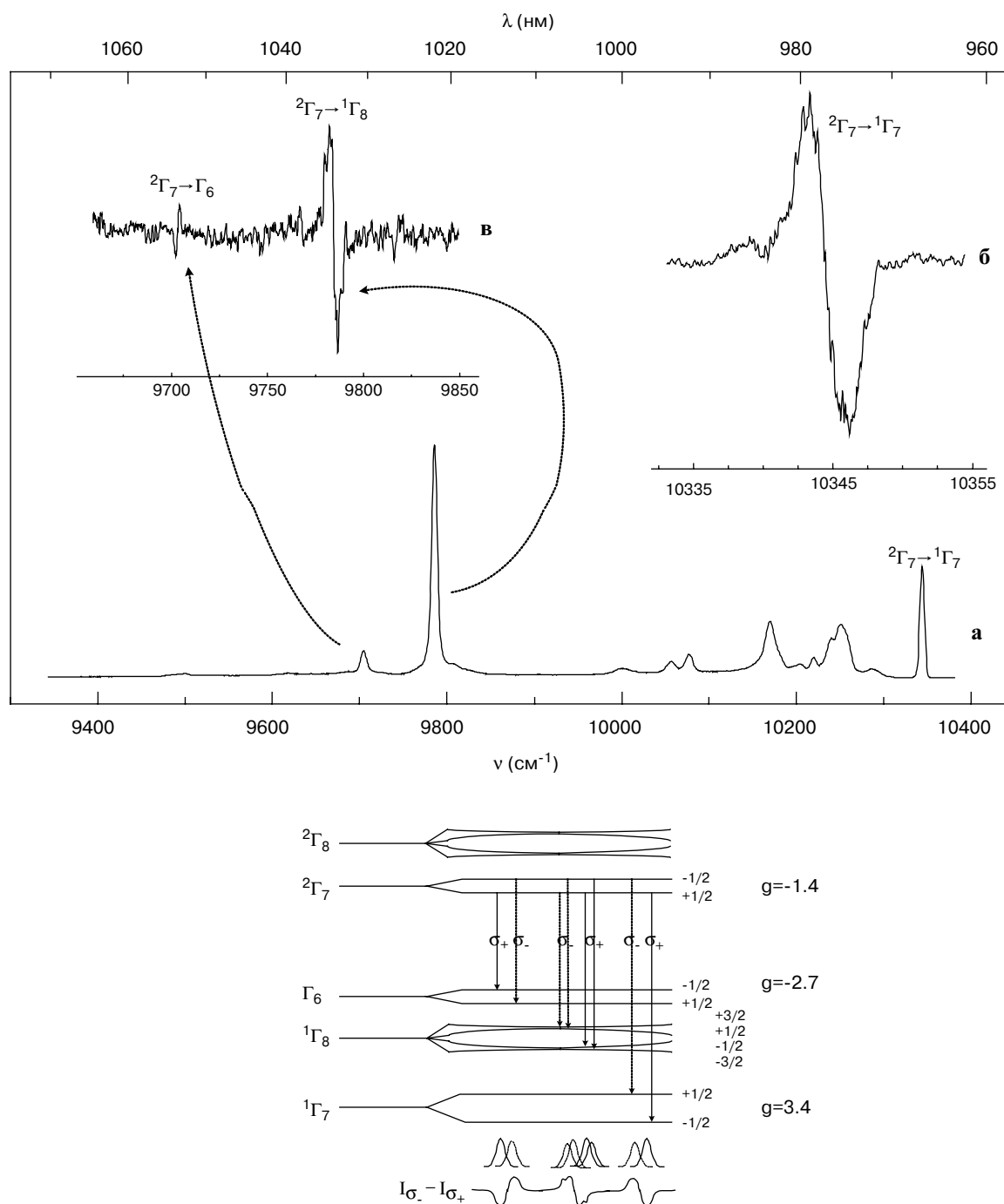


Рис. 5. Спектр люминесценции (**а**) и фрагменты спектров МЦПЛ (**б**, **в**) Yb^{3+} в PbF_2 при $T = 77 \text{ K}$, $H = 0.8 \text{ T}$. На вставке показана схема энергетических уровней T_k , правила отбора по поляризации для магнитных дипольных переходов при регистрации люминесценции в направлении параллельном H и ожидаемый вид спектра МЦПЛ.

Литература

1. Baker J.M.: Crystal with fluorine structure (Hayes W., ed.). Clarendon: Oxford 1974. 341 p.
2. Герасимов К.И., Леушин А.М., Фалин М.Л.: ФТТ **43**, № 9, 1609–1612 (2001)
3. Falin M.L., Gerasimov K.I., Leushin A.M., Bill H., Lovy D., Sanadze T.I.: J. Alloys Compd. **323–324**, 692–695 (2001)
4. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M., Bill H., Lovy D.: J. Luminescence **102–103**, 239–242 (2003)
5. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M.: J. Phys.: Condens. Matter. **15**, no. 17, 2833–2847 (2003)
6. Falin M.L., Gerasimov K.I., Latypov V.A., Leushin A.M.: Appl. Magn. Reson. **26**, no. 4, 617–632 (2004)
7. Falin M.L., Gerasimov K.I., Kazakov B.N., Yakshin M.A.: Appl. Magn. Reson. **17**, no. 1, 103–112 (1999)
8. Kirton J., White A. M.: Phys. Rev. **178**, no. 2, 543–547 (1969)
9. Kiro D., Low W.: Magnetic resonance (Coogan C.K., Ham N.S., Stuart S.N., Pilbrow J.R., Wilson G.V.H., eds.). New York: Plenum 1970. 247 p.
10. Bleaney B.: Proc. Roy. Soc. **73**, 939–942 (1959)

Магнитные свойства поли(пропилен имин) дендромезогенных комплексов меди: ЭПР исследование

Н. Е. Домрачева

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

Методом ЭПР изучены новые наноструктурные материалы – жидкокристаллические комплексы меди(II) с поли(пропилен имин) дендримерным лигандом (L) первой (комплекс **1**) и второй (комплекс **2**) степени генерации, обладающие колончатой мезофазой и имеющие различное содержание меди ($x = \text{Cu/L}$). Исследовано влияние молекул воды и нитрат противоионов на магнитные свойства комплекса **2** ($x = 7.3$). Показано, что молекулы воды способны экстрагировать часть ионов меди из дендримерных комплексов и образовывать со свободными ионами гекса-аква-комплексы меди. Для полностью гидратированного образца **2** удалось наблюдать (при $T < 10$ K) спектр димера, идентифицировать его структуру, определить расстояние между ионами меди и показать, что нитрат противоион выполняет роль мостика между гекса-аква и Cu(II)-дендримерным комплексом. Впервые в дендримерных комплексах **1** (голубого цвета), имеющих димерную структуру, обнаружен активированный температурой эффект валентной таутомеризации, сопровождающийся электронным транспортом, оценена энергия активации процесса электронного транспорта, равная 0.35 мэВ. Определена координация узла иона меди (NO_4) и структурная организация комплексов **1** (зелёного цвета) в колончатой мезофазе. Показано, что комплексы данного типа образуют линейные цепочки, в которых нитрат противоионы выполняют роль мостиков между центрами меди. Обнаружена способность комплексов **1** (зелёного цвета), растворённых в изотропных инертных растворителях, ориентироваться в магнитном поле ($B < 8000$ Гс). Найдено, что их степень ориентирования ($S = 0.76$) достаточно высока и близка для систем с полным упорядочением ($S = 1$) в магнитном поле.

Введение

Металлокомплексы дендримеров в последние несколько лет привлекают к себе интерес исследователей. Это объясняется тем, что они содержат большое число потенциальных координационных мест и могут быть использованы как катализаторы, а также как компоненты молекулярных электронных и фотохимических устройств [1]. Пространственные внутримолекулярные полости, образующиеся за счёт разветвлённой структуры дендримерной молекулы, можно использовать как вакантные места для прямого комплексообразования. В связи с этим становится интересным получение и исследование металлосодержащих дендримеров.

Интерес к металлодендримерам вызван не только их практическим применением. Они могут служить модельными объектами биологических систем [2] и способны проявлять ряд важнейших биофункций, таких как электронный транспорт, возможность присоединять молекулы кислорода [3]. Кроме того, дендримерная матрица модифицирует оптические, каталитические или окислительно-восстановительные свойства иона металла инкапсулированного в эту матрицу, а кинетика электронного транспорта в такой системе существенно замедляется (особенность, также присущая протеинам).

В настоящей работе изучаются металлокомплексы меди, в которых в качестве дендримерного лиганда используются жидкокристаллические поли(пропилен имины) первой и второй степени генерации. В соответствии

со степенью генерации дендримерного лиганда (L) будем обозначать исследуемые соединения как комплекс **1** и **2**, а содержание иона меди в них характеризовать параметром $x = \text{Cu/L}$. Поляризационная оптическая микроскопия, дифференциальная сканирующая калориметрия и рентгенодифракционные измерения показали, что все комплексы меди обладают гексагональной колончатой мезофазой.

В предшествующей работе [4] мы идентифицировали локальную структуру и геометрию различных мест комплексации ионов Cu(II) в поли(пропилен имин) дендримерном лиганде. К сожалению, наша попытка определить координационный узел Cu(II) в комплексе **1** ($x = 1.9$) (зелёного цвета) оказалась безуспешной – суперсверхтонкую структуру от атомов дендримерного лиганда наблюдать не удалось. В настоящей работе мы рассмотрим новые аспекты и дадим ответы на следующие вопросы: могут ли молекулы воды и нитрат противоионы, входящие в состав комплексов (согласно данным элементного анализа), влиять на обменные взаимодействия между ионами меди; возможно ли наблюдение электронного транспорта для данного типа дендримеров. Кроме того, мы установим локальную структуру иона Cu(II) в комплексе **1** ($x = 1.9$) (зелёного цвета), а также структурную организацию этих комплексов в колончатой мезофазе. Для этого зелёный комплекс **1** получим другим способом, а для идентификации его структуры используем ориентирующий эффект магнитного поля.

Результаты и обсуждение

Влияние молекул воды и нитрат противоионов на формирование мостиковых структур в комплексе **2** ($x = 7.3$)

Для выяснения природы межмолекулярных взаимодействий и вида мостиковых структур в Cu(II)-дендримерных комплексах были приготовлены и изучены образцы соединения **2** ($x = 7.3$) с различным содержанием воды. Спектры ЭПР для сухого и насыщенного водой (в течение 2, 4 и 6 дней) образцов приведены на рис. 1а. Как видно, при насыщении комплекса **2** водой происходит сдвиг положения резонансной линии ЭПР в область низких полей и значение g -фактора увеличивается с 2.17 (сухой образец) до 2.19 для полностью гидратированного (выдержанного в атмосфере воды в течение 6 дней) образца. Наблюдаемая тенденция изменения g -фактора (согласно [5]) связана с заменой в хелатном узле меди атомов азота на атомы кислорода. Чтобы понять, как происходит данная модификация узла, были исследованы температурные зависимости спектров ЭПР для сухого и полностью гидратированного образцов. Температурная вариация спектров последнего приведена на рис. 1б. Анализ показывает, что спектр, наблюдаемый при $T \leq 208$ К, является суперпозицией двух типов: симметричной линии и анизотропного спектра. Положение и форма

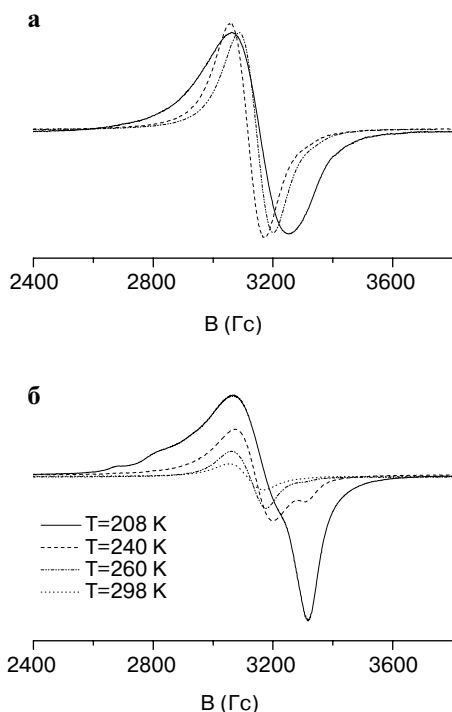


Рис. 1. а Спектры ЭПР комплекса **2** для различных степеней гидратации образца при комнатной температуре. Сплошная линия соответствует сухому комплексу; штрих-пунктирная – образцу, насыщенному водой в течение 2 дней; штриховая линия соответствует комплексу **2**, выдержанному в атмосфере воды в течение 4 и 6 дней; б температурная зависимость спектра ЭПР для полностью гидратированного образца (насыщенного водой в течение 6 дней).

симметричной линии совпадают с линией, характеризующей сухой комплекс **2**. Магнитные параметры анизотропного спектра имеют следующие значения: $g_x = g_y = 2.085$, $g_z = 2.40$, $A_z = 0.014$ см⁻¹ и полностью соответствуют магнито-резонансным параметрам гекса-аква (Cu(H₂O)₆)²⁺ комплекса меди(II) [6]. Таким образом, молекулы воды демонстрируют свою способность экстрагировать часть ионов меди из Cu(II)-дендримерных комплексов и образовывать гекса-аква-комплексы меди со свободными, вакантными ионами.

Каковы магнитные свойства этих соединений и различаются ли они? Для ответа на поставленный вопрос мы измерили температурную зависимость интегральной интенсивности линий ЭПР (которая пропорциональна статической магнитной восприимчивости) для сухого и полностью гидратированного комплексов. Оказалось, что эта зависимость описывается законом Кюри-Вейсса $I = C/(T - \theta)$ для обоих соединений, однако значения констант θ существенно различны: в первом случае, для сухого дендримерного комплекса $\theta = -0.59$ К, в то время как для второго, полностью гидратированного образца $\theta = -20.2$ К. Почему при насыщении образца водой значение θ столь резко возрастает? Известно, что магнитные взаимодействия между гекса-аква Cu(H₂O)₆²⁺ комплексами меди малы и порядка 0.045 см⁻¹ [7]. Малое значение параметра θ для сухого образца **2** также свидетельствует о небольшой величине обмена в нём. Разумно предположить, что к заметному росту константы θ могут привести лишь взаимодействия между неидентичными комплексами меди(II). Это предположение подтверждается результатами низкотемпературных измерений, выполненных для полностью гидратированного образца **2**.

Для него ниже 10 К наблюдается новый тип спектра, представленный на рис. 2б. Этот новый спектр описывается спин-гамильтонианом вида:

$$\mathcal{H} = \beta \mathbf{B} \{g\} \mathbf{S} + \mathbf{S} \{D_e\} \mathbf{S}, \quad (1)$$

где D_e – тензор тонкой структуры, а сам спектр типичен для димеров ($S = 1$). Сигнал, соответствующий запрещённым переходам ($\Delta M_s = \pm 2$), также регистрируется (рис. 2а), что дополнительно подтверждает наличие димеров в образце. Расчёты показывают, что наилучшее согласие с экспериментом реализуется для следующих параметров: расстояние r между двумя неидентичными ионами меди(II) в димере равно 4.5 Å; парамагнитные центры Cu₁ и Cu₂ имеют g -факторы: $g_1 = 2.17$ и $g_{2x} = g_{2y} = 2.085$, $g_{2z} = 2.40$, а между тензорами g и D_e существует угол несовпадения порядка 40°. Найденное значение r достаточно велико и свидетельствует о протяжённом мостике между Cu-Cu ионами. В димерных соединениях меди с аналогичным [8] расстоянием r этот протяжённый мостик образуется через атомы кислорода, один из которых принадлежит молекуле воды, а второй – нитрат аниону (Cu-NO₃⁻-H₂O-Cu). В соответствии с имеющимися литературными данными [8] мы полагаем, что

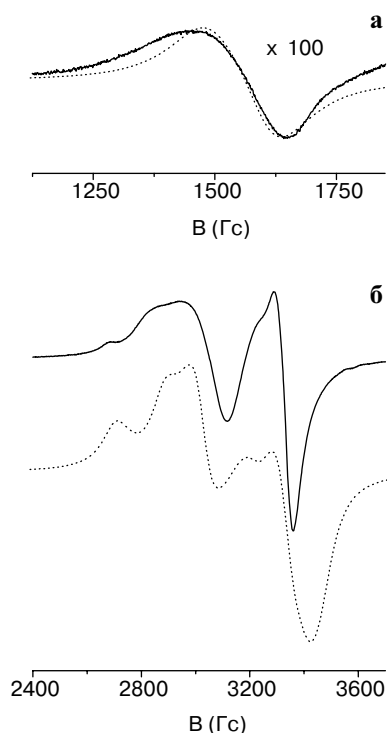


Рис. 2. Низкополевая (а) и высокополевая (б) части спектра ЭПР полностью гидратированного комплекса **2** ($x = 7.3$) при $T \leq 10$ К. Экспериментальные значения – сплошная линия; симулированные – пунктирная.

в наблюдаемом нами димере ион меди в Cu(II)-дендримерном комплексе дополнительно (к N_2O_2 окружению) координируется одним из атомов кислорода нитрат аниона, в то время как другой атом кислорода этого аниона через водородную связь взаимодействует с атомом кислорода молекулы воды, входящей в состав гекса-аква комплекса меди (см. схему 1). Таким образом, нитрат противоион выступает в роли соединительного мостика между гекса-аква комплексом меди и Cu(II)-дендримерным комплексом.

Магнитные свойства и механизм электронного транспорта в комплексе **1** ($x = 1.9$) голубого цвета

Выяснив роль нитрат противоиона в межмолекулярных обменных взаимодействиях, исследуем магнитные свойства индивидуальных медь(II)-содержащих дендримеров. Для этой цели рассмотрим поведение комплекса **1** голубого цвета. Спектр ЭПР данного порошкообразного образца представлен на рис. 3а для различных температур. Ранее было показано [4], что наблюдаемый спектр ($T > 30$ К) описывается спин-гамильтонианом вида:

$$\mathcal{H} = \beta \mathbf{B} \{g\} \mathbf{S} + \mathbf{I}_{Cu} \{A_{Cu}\} \mathbf{S} + \sum_{i=1}^2 \mathbf{I}_N^i \{A_N^i\} \mathbf{S} \quad (2)$$

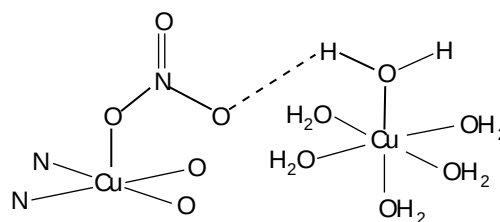


Схема 1. Димерный фрагмент ближайшего локального окружения ионов меди для полностью гидратированного образца **2**: мостик $Cu-NO_3^- \cdot H_2O-Cu$ связывает два неидентичных иона меди(II).

с $S = 1/2$, $I_{Cu} = 3/2$ и $I_N = 1$; он типичен для изолированных комплексов меди и характеризуется следующими магнитными параметрами: $g_z = 2.336$, $g_x = 2.06$, $g_y = 2.065$, $A_z = 168 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_x = 38.4 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_y = 19.3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Анализ суперсверхтонкой структуры свидетельствует о том, что ион меди в голубом комплексе **1** имеет координационный узел $Cu(N_2O_2)$, образованный двумя амидными азотами ($a_{Nz} = 36 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$) и двумя кислородами периферийных карбонильных групп.

Ниже 30 К для исследуемого образца наблюдается необычная трансформация спектра, происходящая преимущественно в области перпендикулярной компоненты (рис. 4). Эта компонента расщепляется на две линии,

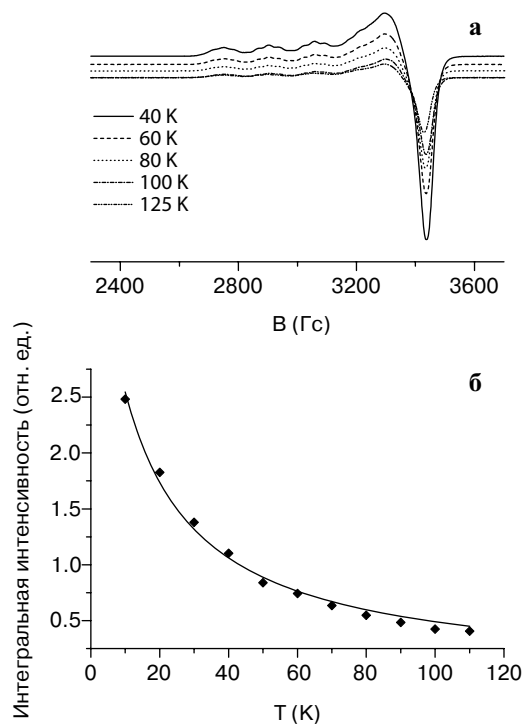


Рис. 3. а Спектр ЭПР поликристаллического голубого комплекса **1** при различных температурах; б температурная зависимость интегральной интенсивности линий ЭПР этого комплекса **1**. Точки – экспериментальные значения, сплошная линия – симулированные.

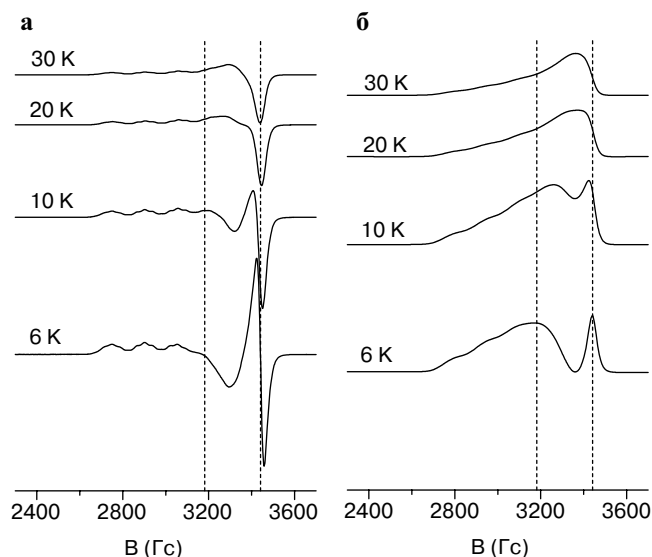


Рис. 4. Спектры ЭПР голубого комплекса **1** в виде первой производной (а) и сигнала поглощения (б) при $T < 30$ К.

которые при понижении температуры смещаются в противоположных направлениях от значения резонансного магнитного поля $B_{\perp}$. Как результат, при 6 К возникают два типа спектров: узкая симметричная линия с $g_0 = 2.025$ в сильном магнитном поле и новый анизотропный спектр меди(II). Значение изотропного g_0 -фактора симметричной линии (согласно [9]) соответствует $\text{NO}_3^{\bullet}$ радикалу.

Попытаемся понять, какие структурные преобразования в комплексах могут вызвать наблюдаемую трансформацию спектра и не связаны ли они с межмолекулярными взаимодействиями? Для этого была исследована температурная зависимость интегральной интенсивности линий ЭПР (рис. 3б). Оказалось, что её поведение описывается законом Кюри-Вейсса с константой $\theta = -11.4$ К, т.е. между ионами меди в голубом комплексе **1** существуют антиферромагнитные обменные взаимодействия. Предположим, что (NO_3^-) анион (аналогично рассмотренному выше) выполняет роль соединительного мостика между двумя дендримерными комплексами меди. Если этот анион координируется в аксиальные позиции к ионам меди, то Cu-Cu расстояние в таком димерном фрагменте будет равно $6.92 \text{ \AA}$ [10, 11] (см. схему 2).

Правильность предполагаемой модели подтверждают данные рентгенодифракционных измерений: рентгенодифрактограмма в мезофазе (рис. 5а) регистрирует наличие двух рефлексов $\theta_1 = 6.36^\circ$ и $\theta_2 = 12.86^\circ$ в области “галло” (рис. 5б), которые однозначно указывают на существование внутримолекулярного порядка в колонке 7 и $3.5 \text{ \AA}$, соответственно.

Рассмотрим другой аспект электронной структуры комплексов: за счёт чего в данном димере может возникать $\text{NO}_3^{\bullet}$ радикал? Известно [12], что комплексы меди(II) с каталитически-активными лигандами (чувствительными к окислительно-восстановительным про-

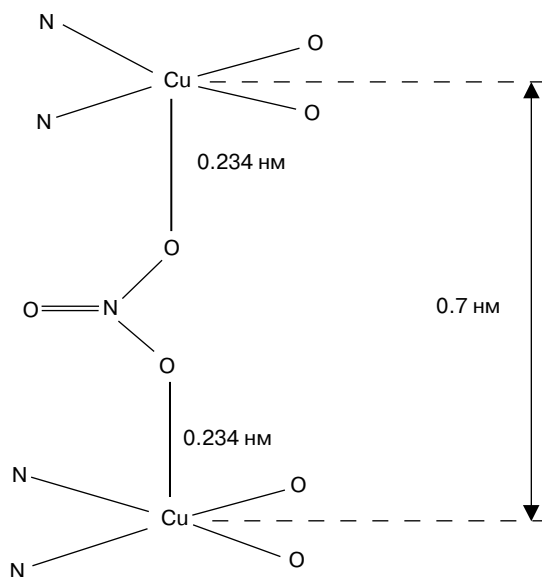


Схема 2. Представление димерной структуры ближайшего локального окружения ионов меди в голубом комплексе **1**.

цессам) образуют валентные таутомеры, которые находятся между собой в подвижном равновесии $(\text{L}^{2-})\text{Cu}^{\text{II}} \rightleftharpoons (\text{L}^{\bullet-})\text{Cu}^{\text{I}}$. Нитрат анион также является таким каталитически-активным лигандом [13]. На основании этих данных мы полагаем, что трансформация спектра ЭПР ниже 30 К связана с формированием необычного димерного фрагмента меди $\text{Cu}^{\text{II}}\text{L}-\text{NO}_3^{\bullet}-\text{Cu}^{\text{I}}\text{L}$, в котором

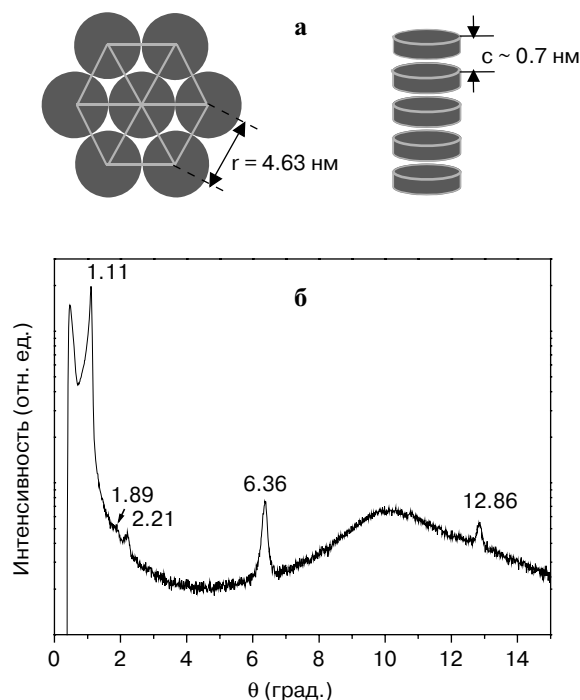


Рис. 5. а Схематическое представление гексагональной колончатой структуры дендримерных комплексов меди(II); б рентген-дифрактограмма гексагональной колончатой мезофазы голубых комплексов **1**.

$\text{Cu}^{\text{I}}\text{L}/\text{NO}_3^-$ форма образуется благодаря транспорту одного электрона и восстановлению одного из двух ионов Cu^{II} в димере. Наблюдение сигналов от Cu^{II} и NO_3^- радикала позволяет нам методом ЭПР напрямую регистрировать (см. рис. 4) индуцированный температурой сдвиг электрона вдоль связи ($\text{Cu}^{\text{II}}\text{-NO}_3^-\text{-Cu}^{\text{I}}$) и валентный таутомеризм меди. Оценка энергии активации ΔE_a наблюдаемого процесса электронного транспорта показывает, что её величина порядка 0.35 мэВ. Найденное значение ΔE_a свидетельствует о низкоэнергетической зарядовой динамике и туннельном механизме процесса электронного транспорта.

Магнитные свойства и ориентирующий эффект магнитного поля в комплексе 1 ($x = 1.9$) зелёного цвета

Перейдём к рассмотрению поведения комплекса **1** ($x = 1.9$) зелёного цвета. Он (в отличие от описанного ранее метода [4]) может быть получен другим способом: нагревом голубого комплекса **1** до 130 °С. Попытаемся идентифицировать координационный узел $\text{Cu}(\text{II})$ в этом новом соединении, используя ориентирующий эффект магнитного поля. Для этого зелёный комплекс растворялся в смеси изотропных растворителей (хлороформ/толуол), затем образец выдерживался в сильном ($B_0 = 8000$ Гс) магнитном поле и резко охлаждался в присутствии данного поля. Спектры ЭПР такого образца представлены на рис. 6а. Видно, что при вращении образца в магнитном поле (изменении угла ξ) наблюдается необычная трансформация спектра: кроме изменения интенсивности линий, все четыре параллельные компоненты спектра начинают “двигаться” как линии в монокристалле от значений резонансного поля $B_{\parallel}$ к $B_{\perp}$. Согласно теоретическим расчётам, такой тип движения линий свидетель-

ствует о совпадении главных магнитных и молекулярных осей комплекса.

На рис. 6б приведены симулированные спектры, рассчитанные для следующих значений ориентационных $R_x = R_y = 8 = R$ и магнитных $g_z = 2.363$, $g_x = g_y = 2.065$, $A_z = 164.7 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A_x = A_y = 9 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ параметров. Наилучшее согласие теоретических спектров с экспериментальными получено для эллипсоидальной функции [4] ориентационного распределения молекулярных осей. Расчёт также показывает, что степень ориентирования в магнитном поле молекулярных z -осей комплексов **1** (зелёного цвета) равна $S_z = 0.76$. Найденная величина S_z достаточно велика и близка для систем с полным упорядочением ($S_z = 1$) в магнитном поле. Анализ разрешённой суперсверхтонкой структуры спектра свидетельствует о том, что в координационный узел $\text{Cu}(\text{II})$ входит лишь один атом амидного азота ($a_{\text{Nz}} = 36 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$), который непосредственно связан со своим ближайшим атомом водорода ($a_{\text{Hz}} = 36 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$). Увеличение параметра g_z для зелёного комплекса, по сравнению с голубым, также свидетельствует в пользу этого. Таким образом, координационный узел меди(II) меняется с $\text{Cu}(\text{N}_2\text{O}_2)$ на $\text{Cu}(\text{NO}_3)$ при переходе от голубого комплекса к зелёному.

Каковы магнитные свойства и структурная организация этих новых зелёных комплексов **1**? Для ответа на поставленный вопрос была исследована температурная зависимость интегральной интенсивности линий ЭПР поликристаллического образца. Оказалось, что константа Кюри-Вейсса $\theta = -11.9$ К, что указывает на наличие антиферромагнитных обменных взаимодействий между ионами меди в зелёном комплексе **1**. В рентген-дифрактограмме данного соединения регистрируются те же рефлексы в области “галло” (как на рис. 5б), свидетельствующие о существовании внутримолекулярного порядка в колонке 7 и 3.5 Å, т.е. (NO_3^-) анионы координируются вновь в аксиальные позиции к ионам меди и выполняют роль соединительных мостиков между дендримерными комплексами. Однако, высокая степень ориентирования ($S_z = 0.76$) зелёных комплексов **1** в магнитном поле даёт нам основание считать, что эти комплексы имеют цепочечную структуру, ибо только одномерная цепочечная структура способна обеспечить столь высокую степень ориентирования (см. схему 3). Напомним, что степень ориентирования молекулярных z -осей голубых комплексов **1** в магнитном поле равна $S_z = 0.37$ [4].

Интересна и трансформация спектра ЭПР зелёного комплекса **1** ниже 20 К (рис. 7). Видно, что в спектрах наблюдаются те же самые особенности, характерные для голубого соединения: появляется сигнал от NO_3^- радикала и новый спектр меди(II). Однако форма линий ЭПР этих двух парамагнитных центров необычна. Так, например, линия NO_3^- радикала асимметрична и по форме аналогична линии Дайсона [14]. Одной из причин необычной формы линий может быть наличие электро-

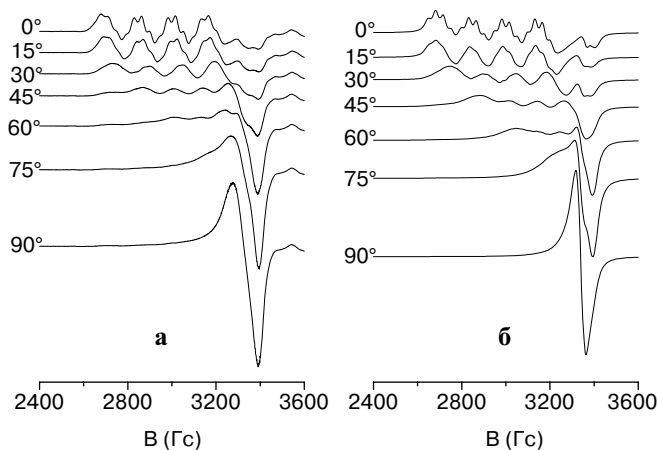


Рис. 6. Экспериментальные при 20 К (а) и симулированные (б) спектры ЭПР застеклованного раствора зелёного комплекса **1**, ориентированного предварительно при комнатной температуре в магнитном поле $B_0 = 8000$ Гс. Цифрами показаны значения угла ξ в градусах.

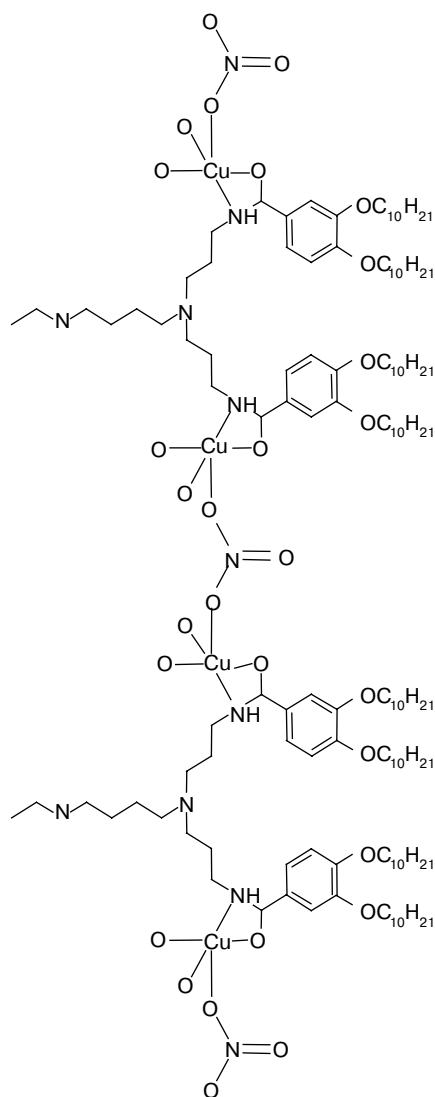


Схема 3. 1/2 часть структуры дендримерного комплекса **1** зелёного цвета. Cu–NO₃[–]–Cu–NO₃[–]–Cu мостики формируют цепочечную структуру ионов меди в колонке.

нов проводимости в образце [14]. Изучению этого вопроса будут посвящены наши будущие исследования.

Работа выполнена совместно с группами проф. М. Швёрера и Г. Латтерманна из Университета г. Байройта (Германия) при финансовой поддержке Немецкого научно-исследовательского общества DFG (проект B6, SFB 481) и гранта РФФИ (№ 06-03-32387).

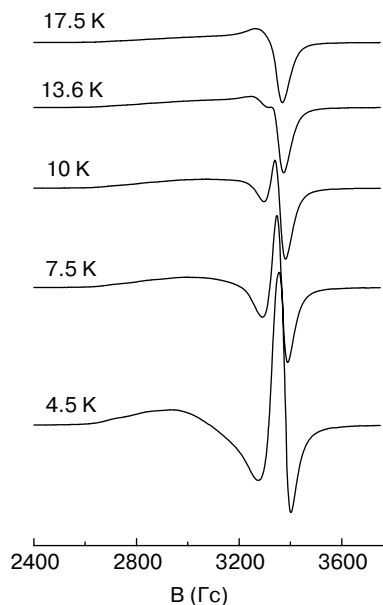


Рис. 7. Спектры ЭПР поликристаллического зелёного комплекса **1** при $T < 20$ К.

Литература

1. Frechet J.M.J.: *Science* **263**, 1710–1715 (1994)
2. Elsevier C.J., Reedijk J., Walton P.H., Ward M.D.: *Dalton Trans.* **10**, 1869–1880 (2003)
3. Gebbink R.J.M.K., Bosman A.W., Feiters M.C., Meijer E.W., Nolte R.J.M.: *Chem. Eur. J.* **5**, 65–69 (1999)
4. Domracheva N., Mirea A., Schwoerer M., Torre-Lorente L., Lattermann G.: *Chem. Phys. Chem.* **6**, 110–119 (2005)
5. Hathaway B.J., Billing D.E.: *Coord. Chem. Rev.* **5**, 143–207 (1970)
6. Poppl A., Kevan L.: *J. Phys. Chem. Soc.* **100**, 3387–3390 (1996)
7. Zhou D., Kreilick R.W.: *J. Phys. Chem.* **97**, 9304–9310 (1993)
8. Prins R., Birker P.J., Haasnoot J.G., Verschoor G.C., Reedijk J.: *Inorg. Chem.* **24**, 4128–4133 (1985)
9. Atkins P.W., Symons M.C.R.: *The structure of inorganic radicals: an application of electron spin resonance to the study of molecular structure.* Amsterdam-London-New York: Elsevier 1967. 150 p.
10. Feyerherm R.: *J. MMM* **256**, 328–333 (2003)
11. Kraft B.J., Eppley H.J., Huffman J.C., Zalski J.M.: *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 272–280 (2002)
12. Razuvaev G.A., Cherkasov V.K., Abakumov G.A.: *J. Organomet. Chem.* **160**, 361–371 (1978); Abakumov G.A., Razuvaev G.A., Nevodchikov V.K., Cherkasov V.K.: *J. Organomet. Chem.* **341**, 485–494 (1988)
13. Rigaut S., Delville M.-H., Losada J., Astruc D.: *Inorg. Chim. Acta* **334**, 225–242 (2002)
14. Poole C.P.: *Electron spin resonance* **b** comprehensive treatise on experimental techniques. New York-London-Sydney: John Wiley & Sons 1967. 331 p.

Состояние ионов Gd^{3+} в универсальных сульфосодержащих ионообменных полимерах по данным ЭПР

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

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

Методом ЭПР показано, что по отношению к редкоземельному иону Gd^{3+} , в отличие от изученных ранее ионов 3d-переходных групп, универсальные сульфосмолы частично проявляют селективные свойства. Обнаружено, что в них образуются не только аквакомплексы, но и комплексы, в формировании ближайшего окружения которых участвуют функциональные SO_3^- -группы. Проведены количественные оценки параметров тонкой структуры спектров ЭПР для обоих типов комплексов и времён корреляции вращательного движения для аквакомплексов гадолиния. Исследование диполь-дипольных взаимодействий между ионами гадолиния позволило определить локальные концентрации сорбированных ионов ($C_{\text{лок}} > C_0$), образующиеся в порах больших размеров.

Введение

Ионообменные полимеры находят самое широкое применение в практике: например, для очистки питьевой, промышленных и сточных вод от вредных примесей; в медицине – для очистки крови и для очистки и выделения биологически активных веществ; для разделения и концентрирования цветных и редких металлов; активно используются в качестве гетерогенных катализаторов, а также во многих других областях науки и техники. Все это предопределяет необходимость их всестороннего исследования различными физическими и химическими методами.

Если сорбируются парамагнитные ионы, то для исследования металлосодержащих полимеров наиболее информативным методом является метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), позволяющий избирательно регистрировать все сигналы, отличающиеся параметрами спектров, т.е. выявлять комплексы, имеющие различный состав и структуру, фиксировать их индивидуальную или кластерную природу и особенности перестройки при внешних воздействиях.

Наиболее “популярным” ионом, используемым для исследования методом ЭПР структуры и подвижности металлокомплексов в ионитах, является ион двухвалентной меди со спином $S = 1/2$, поскольку анализ спектров этого иона разработан в деталях. Ионы со спином $S > 1/2$ в матрицах полиэлектролитов изучены методом ЭПР значительно слабее. Иониты с сорбированным редкоземельным ионом Gd^{3+} ($S = 7/2$), насколько нам известно, вообще не изучались методом ЭПР.

В настоящей работе представлены результаты по исследованию спектров ЭПР ионов Gd^{3+} , сорбированных из водных растворов $Gd(NO_3)_3$ универсальными сульфо- (КУ-2×8) и сульфифенол- (КУ-1) содержащими катионитами, в которых активными группировками являются SO_3^- -группы. В смоле КУ-1 имеются ещё и фе-

нольные группировки, активность которых проявляется лишь в щелочной среде [1, 2].

Универсальные смолы сорбируют ионы металлов в основном по ионообменному механизму без участия координационных взаимодействий с активными группировками. Ранее было показано (см., например, [1–8]), что в максимально гидратированных универсальных катионитах сигналы ЭПР от ионов Cu^{2+} , VO^{2+} , Mn^{2+} , Cr^{3+} и Fe^{3+} аналогичны наблюдаемым в чисто водных растворах, и лишь при практически полном удалении свободной воды из матрицы полимера, а также слабосвязанной воды из гидратных оболочек ионов, в комплексообразовании могут принимать участие и фиксированные SO_3^- -группы.

При исследовании водных растворов $Gd(NO_3)_3$ мы обнаружили интересные особенности, которые не наблюдались для аквакомплексов других парамагнитных ионов, а именно, проявление физической и химической адсорбции акваионов гадолиния на поверхности измерительных капилляров [9, 10]. В последнем случае ионы Gd^{3+} взаимодействовали не только с кислородами молекул воды, но и кислородами самого стекла. Можно ожидать, что в сульфосмолах (а это одни из самых доступных для практического применения ионитов) ионы гадолиния будут более активно, по сравнению с другими парамагнитными ионами, взаимодействовать с кислородами функциональных SO_3^- -групп, что должно привести к повышению селективных свойств сульфокатионитов по отношению к Gd^{3+} .

Основная задача настоящей работы состоит в применении метода ЭПР для установления особенностей взаимодействия сорбированных ионов гадолиния с молекулами воды и активными группировками катионитов КУ-2×8 и КУ-1 при различном содержании влаги в матрицах полимеров и выяснении проявления селективных свойств по отношению к иону Gd^{3+} .

Экспериментальные результаты и обсуждение

Сорбцию ионов гадолиния на катионитах КУ-2 и КУ-1 проводили в статических условиях из водных растворов $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ при $\text{pH} < 6$. Содержание гадолиния в ионитах составляло от 0.0015 до 3.1 и 4.1 ммоль/г для КУ-1 и КУ-2×8, соответственно.

Указанные иониты исследовались в воздушно-сухом (ВС), максимально набухшем гидратированном (Г) и дегидратированном (ДГ) состояниях. Для получения ВС образцов ионит после сорбции выдерживался на воздухе до постоянства веса (содержание свободной воды в матрице составляло 10–15%). ДГ образцы получали путем термической обработки ВС ионитов при 380 К в течение 6 ч, после чего сразу же запаивали в измерительные ампулы. Спектры ЭПР регистрировали на спектрометре JES-3BS-X в X-диапазоне длин волн в области температур от 170 до 440 К.

В максимально гидратированных смолах КУ-2 и КУ-1 при низкой температуре (170 К) и относительно малых степенях сорбции гадолиния наблюдаются идентичные спектры ЭПР, основная линия в которых согласуется со спектром ЭПР водных застеклованных растворов $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ (рис. 1а и б). Заметим, что в ионитах в процессе охлаждения не происходит вымораживания свободной воды, и сульфосмолы часто используются в качестве удобных матриц для получения низкотемпературных спектров аквакомплексов гадолиния, харак-

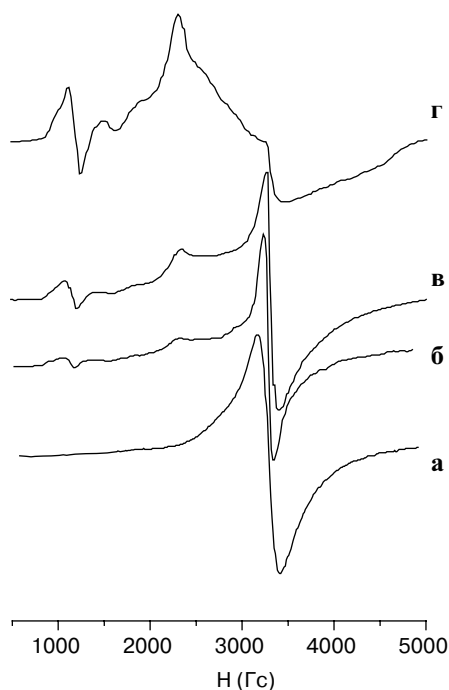


Рис. 1. Спектры ЭПР ионов Gd^{3+} **а** в застеклованном при 77 К 0.2 моль/л водном растворе $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3$ с добавлением 15 объёмных % глицерина; **б** в гидратированном катионите КУ-2×8; **в** в воздушно-сухом катионите КУ-2×8; **г** в дегидратированном катионите КУ-2×8. Концентрация сорбированных ионов Gd^{3+} в катионитах составляла 0.08 ммоль/г. Температура измерения 170 К.

терных для застеклованного состояния [2]. Основная линия, обязанная аквакомплексам гадолиния, представляет собой огибающую сигналов для нескольких переходов, связанных с тонкой структурой спектров ЭПР [11]. Спектр описывается спин-гамильтонианом

$$\mathcal{H} = g\beta\mathbf{H}\mathbf{S} + D \left[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1) \right] + E(S_x^2 - S_y^2) \quad (1)$$

с $D \ll h\nu$ и $D \gg E$. Здесь D и E – параметры тонкой структуры, характеризующие величину и симметрию локальных кристаллических полей на центральном ионе. Симуляция спектра даёт величину $D = 180 \pm 10$ Гс.

Помимо интенсивной линии при $g = 2$, обязанной аквакомплексам гадолиния, в спектрах ЭПР присутствуют линии с $g_{\text{эф}} = 2.8 \pm 0.05$, $g_{\text{эф}} = 5.55 \pm 0.05$, а также слабый сигнал с $g_{\text{эф}} = 1.3 \pm 0.1$; последний сигнал наблюдается при малых степенях сорбции, когда он не маскируется сигналом от аквакомплексов гадолиния. Интенсивность линий, не связанных с сигналом ЭПР от аквакомплексов гадолиния, растёт по мере удаления воды из матрицы полимера (рис. 1б, в, г).

Мы провели количественную оценку отношения интенсивности линий I_1/I_2 при $g = 2$ (I_1) и $g = 5.55$ (I_2) в зависимости от степени гидратации. Последняя линия была выбрана в силу того, что она является достаточно интенсивной и в то же время, в отличие от линии с $g = 2.8$, не перекрывается с сигналом от аквакомплексов гадолиния. Расчёт интенсивностей проводился по соотношению $I = \delta H^2 h$, где δH – ширина линии, h – ее амплитуда. Оказалось, что для гидратированного катионита КУ-2 $I_1/I_2 = 13.7$, а для воздушно-сухого – $I_1/I_2 = 9$. В катионите КУ-1 эти значения составляют соответственно 10.9 и 6.7. В дегидратированном образце КУ-2 интенсивность линии I_2 по отношению к гидратированному образцу возросла в 9 раз, а в КУ-1 – в 7 раз. Эти оценки показывают, что в процессе дегидратации растёт количество комплексов гадолиния, в формировании которых, помимо молекул воды, участвуют и активные SO_3^- -группировки, т.е. эти комплексы непосредственно связаны с матрицей полимера. Неучастие в комплексообразовании фенольных группировок КУ-1 при условиях эксперимента подтверждается наблюдением идентичных линий в спектрах ЭПР Gd^{3+} в КУ-2 и КУ-1 катионитах.

Сигналы с эффективными g -факторами 2.8; 5.5 и 1.3 не могут быть объяснены действием кристаллических полей только аксиальной симметрии с $D \ll h\nu$ или $D \gg h\nu$. Для правильного их отнесения было использовано приближение сильных кристаллических полей с $D \gg h\nu$ и присутствием не только аксиальных, но и ромбических компонент [12].

В [12] был введён параметр $\lambda = E/D$. Расчёты проводились для спина $S = 5/2$ и спин-гамильтониана, записанного в единицах λ :

$$\mathcal{H} = \left[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1) \right] + \lambda(S_x^2 - S_y^2). \quad (2)$$

В настоящей работе подобные расчёты выполнены для $S = 7/2$.

Решения уравнения для матрицы энергии соответствуют четырём дважды вырожденным уровням энергии (крамеровским дублетам) с эффективными спинами $S = 1/2$, которые пронумерованы индексом $i = 1, 2, 3, 4$. Дублет с индексом 1 является нижним при условии, что D положительно. На рис. 2 графически представлены зависимости эффективных g -факторов от параметра λ для каждого из четырёх дублетов.

Поскольку полимерные комплексы, как, например, и комплексы в высокотемпературных стёклах и в других неупорядоченных или частично упорядоченных системах, имеют разброс в симметриях ближайшего окружения отдельных парамагнитных центров, в спектрах ЭПР мы наблюдаем не одну линию, а огибающую совокупности линий с близкими, но отличающимися друг от друга параметрами. Поэтому, для описания этой линии необходимо, чтобы λ изменялось в определённых пределах. Наблюдаемые сигналы в спектре закреплённых комплек-

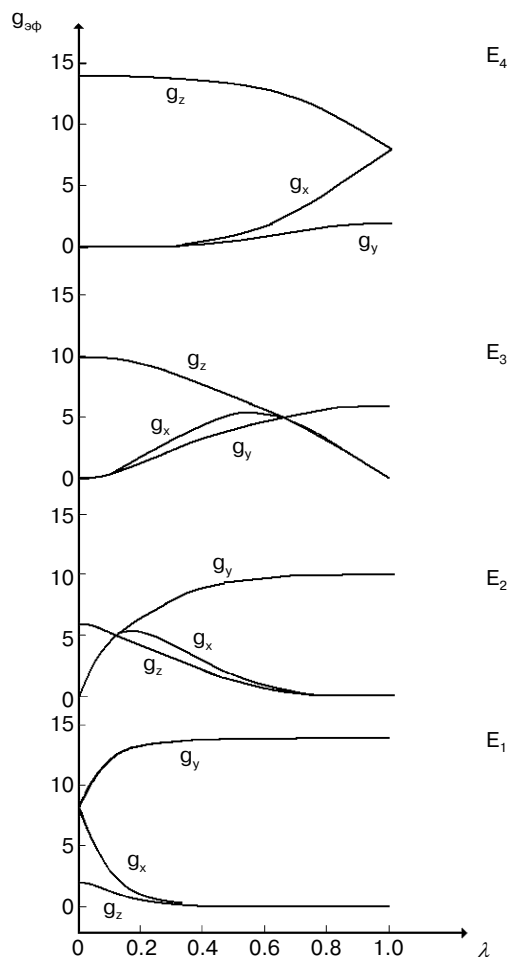


Рис. 2. Зависимость величин эффективных g -факторов дублетов E_1 – E_4 для $S = 7/2$ от $\lambda = E/D$. За исключением порядка расположения уровней энергии, область $1/3 \leq \lambda \leq 1$ является избыточной. Симметрия относительно точки $\lambda = 1/3$ достигается изменением знака D , преобразованием $y \leftrightarrow z$ и подстановкой $\lambda' = (1 - \lambda)/(3\lambda + 1)$ вместо λ [12].

сов хорошо согласуются со значениями $g_x = 2.8$, $g_z = 1.3$ от первого дублета для $\lambda = 0.125 \pm 0.025$ (сигнал, соответствующий g_y , не прописывается из-за слишком слабых магнитных полей) и $g_x \approx g_y \approx g_z \approx 5.5$ от второго дублета.

Процессы дегидратации, приводящие к уменьшению свободной и слабосвязанной воды и сближению полимерных цепей, способствуют росту количества комплексов, взаимодействующих с SO_3^- -группами по отношению к аквакомплексам.

При комнатной и более высоких температурах спектры ЭПР для малых концентраций сорбированных ионов гадолиния в гидратированных и воздушно-сухих ионитах наглядно отражают присутствие как свободных, так и закреплённых комплексов (рис. 3), поскольку температурные зависимости ширин линий спектров ЭПР этих центров различны. В водных растворах и в полимерных матрицах, где имеется свободная вода, ширины линий спектров ЭПР аквакомплексов гадолиния должны определяться механизмом электронной релаксации, связанным с модуляцией компонент тензора тонкого расщепления вращательным (“кувыркательным”) движением комплексов [13–15]. Действительно, характер зависимости $\delta H(T)$ для аквакомплексов Gd^{3+} в водных растворах и гидратированных ионитах (рис. 3) идентичен (линии сужаются с повышением температуры), но ширины линий ЭПР в ионитах больше, чем в водных растворах, причём их значения для КУ-1 и КУ-2 ло-

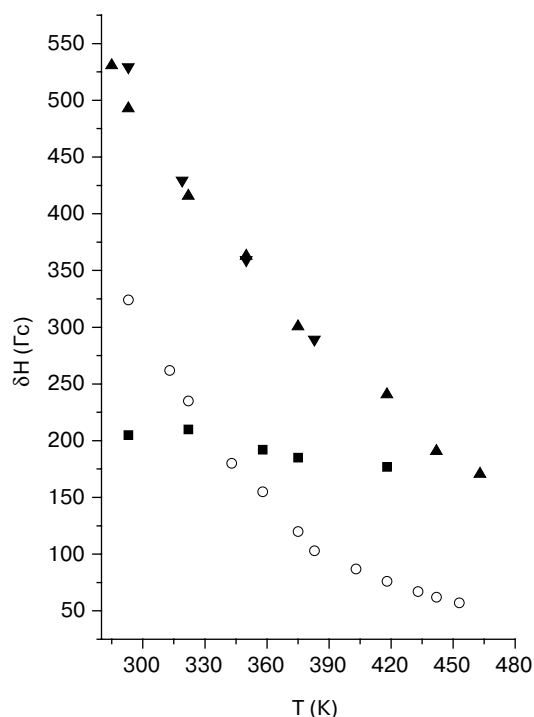


Рис. 3. Зависимость ширин линий ЭПР от температуры для аквакомплексов гадолиния в водных растворах (○), в гидратированных катионитах КУ-1 (▲) и КУ-2 (▼), а также для закреплённого комплекса (■), в образовании которого участвуют SO_3^- -группы (линия при $g_{\text{эф}} = 5.5$).

жаты на одну кривую. Мы провели оценку значений времен корреляции τ_c , исходя из формул, приведённых в работах [14, 15], и с использованием величины параметра тонкой структуры, полученной в [9] из анализа ширины линий водных растворов. Оказалось, что времена корреляции для аквакомплексов Gd^{3+} в гидратированных ионитах в 1.5–3 раза длиннее времен корреляции в водных растворах. Например, в гидратированных ионитах $\tau_c = 1.3 \cdot 10^{-11}$ с ($T = 285$ К); $0.84 \cdot 10^{-11}$ с ($T = 350$ К); $0.44 \cdot 10^{-11}$ с ($T = 450$ К), а в водных растворах при тех же температурах $\tau_c = 0.88 \cdot 10^{-11}$, $0.4 \cdot 10^{-11}$ и $0.12 \cdot 10^{-11}$ с, соответственно. В воздушно-сухих ионитах свободная вода присутствует, но в небольших количествах, и полимерные цепи не так сильно растянуты, как в гидратированных ионитах. Поэтому вращательное движение комплексов заторможено по сравнению с гидратированными ионитами. Так, при изменении температуры от 293 до 370 К ширина линии в воздушно-сухом ионите изменяется от 775 до 650 Гс, т.е. δH уменьшилась в 1.2 раза. А в гидратированных ионитах в том же диапазоне температур δH изменилась в 1.8 раза.

Ширины линий сигналов ЭПР для закреплённых комплексов не зависят от температуры или зависят от неё чрезвычайно слабо даже в максимально гидратированных ионитах (см. рис. 3), поскольку непосредственная связь ионов Gd^{3+} с функциональными SO_3^- -группами полимерной матрицы препятствует свободному движению. Отсюда наличие или отсутствие зависимости $\delta H(T)$ в гидратированных ионитах является качественным тестом для выделения свободных и закреплённых комплексов в полимерной матрице.

При увеличении концентрации сорбированных ионов Gd^{3+} наблюдается уширение линий ЭПР, причём наиболее сильно оно проявляется в процессе дегидратации ионитов, в результате которого как аквакомплексы, так и комплексы с SO_3^- -группами сближаются и между ними усиливаются диполь-дипольные взаимодействия. На рис. 4 приведена зависимость $\delta H_{дл}(C) = \delta H - \delta H_0$ для аквакомплекса Gd^{3+} в матрице воздушно-сухого полимера КУ-1 при 170 К. Здесь δH – измеряемая ширина линии; δH_0 – вклад, не зависящий от концентрации; C – концентрация в моль/л. Для данного ионита величина δH_0 получена при малых концентрациях сорбированных ионов (0.04 и 0.08 ммоль/г) и составляет 100 Гс. Отметим, что она согласуется с величиной δH_0 в застеклованных растворах $Gd(NO_3)_3$ [16].

Для диполь-дипольных взаимодействий в твёрдом приближении и лоренцовой формы линии [11, 17]:

$$\delta H_{дл} = AC, \quad (3)$$

где

$$A = 30.4 \cdot 10^{20} g\beta \sqrt{S(S+1)}. \quad (4)$$

Для спина $S = 7/2$ $A = 223.7$ Гс/моль.

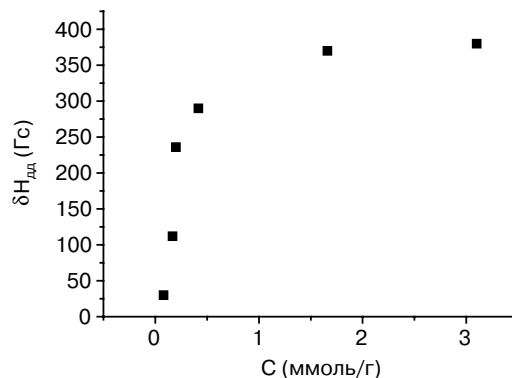


Рис. 4. Зависимость диполь-дипольной ширины линии от концентрации сорбированных ионов для сигнала, обязанного аквакомплексам гадолиния в воздушно-сухом катионите КУ-1 при 170 К.

Анализ зависимости $\delta H_{дл}(C)$ показал, что в области концентраций 0.08–0.8 ммоль/г наблюдается более резкий рост ширины линий по сравнению с ростом концентрации. Так, при изменении концентрации примерно в пять раз (от 0.08 до 0.415 ммоль/г) $\delta H_{дл}$ возрастает в 9–10 раз, т.е. активно происходит заполнение пор, в которых имеются условия для образования повышенных локальных концентраций гадолиния. При $C > 1.66$ ммоль/г зависимость $\delta H_{дл}(C)$ выходит на платообразный участок с $\delta H_{дл} = 380$ Гс. Согласно уравнениям (3) и (4), максимальная локальная концентрация, соответствующая этой ширине, составляет $C_{лок} = 1.7$ моль/л и обязана комплексам, объединённым в кластеры в порах с увеличенными размерами. Расстояние наибольшего сближения между ионами гадолиния в таких кластерах можно определить из соотношения:

$$d = \frac{1}{\sqrt[3]{C_{лок}}} \approx 10.2 \text{ \AA}.$$

Поскольку в ионитах с гелевой структурой большие поры достигают размеров нескольких сотен ангстрем, в них могут образоваться кластеры, содержащие до нескольких десятков комплексов.

Интересно отметить следующий факт: при концентрациях сорбированных ионов Gd^{3+} до 0.8 ммоль/г ширины линий спектров ЭПР в КУ-2 и КУ-1 ионитах практически совпадают; в то же время предельные величины δH , соответствующие максимальным локальным концентрациям гадолиния, отличаются для ионитов КУ-2 и КУ-1. В КУ-1 эти ширины и соответствующие им локальные концентрации ионов составляют 70–75% от аналогичных величин в КУ-2 ионите. Поскольку SO_3H -группы определяют процесс сорбции как по ионообменному механизму, так и в результате координационного взаимодействия, из данных по ширинам линий ЭПР соответствующих центров мы можем оценить относительное количество SO_3^- -групп в применяемых нами ионитах. По нашим данным SO_3^- -групп в смоле КУ-2 в 1.3

раза больше, чем в КУ-1, что согласуется с химическими данными (в 1.25 раза) [2].

Литература

1. Вишневская Г.П., Сафин Р.Ш., Липунов И.Н., Казанцев Е.И.: Теор. и эксперим. химия **12**, № 5, 707 (1976)
2. Вишневская Г.П., Молочников Л.С., Сафин Р.Ш.: ЭПР в ионитах. М.: Наука 1992. 165 с.
3. Vishnevskaja G.P., Saphin R.Sh., Molotshnikov L.S., et al.: Mol. Phys. **34**, no. 5, 1329 (1977)
4. Вишневская Г.П., Сафин Р.Ш., Рамазанов Р.Т., Горожанин В.А.: Теор. и эксперим. химия **16**, № 5, 688 (1980)
5. Вишневская Г.П., Сафин Р.Ш., Фролова Е.Н.: Журн. физ. химии **70**, № 12, 2209 (1996)
6. Манк В.В., Гороховатская Н.В., Атаманенко И.Д., Куриленко О.Д.: Коллоид. журн. **38**, № 3, 467 (1976)
7. Астанина А.Н., Волков В.И., Смирнова Г.Л. и др.: Журн. физ. химии **61**, № 10, 2802 (1987)
8. Naderi M., Dale J.A., Parkes G.M.B., Brown D.R.: React. Funct. Polym. **51**, 25 (2002)
9. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Фахрутдинов А.Р.: Журн. физ. химии **76**, № 5, 874 (2002)
10. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Гатауллин А.М.: ФТТ **45**, № 5, 817 (2003)
11. Абрагам А., Блинн Б.: Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т. 1. М.: Мир 1972. 652 с.
12. Wickman H.H., Klein M.P., Shirley D.A.: J. Chem. Phys. **42**, 2113 (1965)
13. Mc. Garvey B.R.: J. Chem. Phys. **61**, no. 9, 1232 (1957)
14. Mc. Lachlan A.D.: Proc. Roy. Soc. (L) A **280**, no. 1381, 271 (1964)
15. Powell D.H., Merbach A.E., Gonzales G., et al.: Helv. Chim. Acta **76**, 2129 (1993)
16. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Гатауллин А.М.: ФТТ **45**, № 7, 1263 (2003)
17. Лебедев Я.С., Муромцев В.И.: ЭПР и релаксация стабилизированных радикалов. М.: Химия 1972. 255 с.

Влияние внешнесферного аниона на свойства спинового перехода в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{Y}$, $\text{Y} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$

Т. А. Иванова, И. В. Овчинников, А. Н. Туранов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии

В соединениях $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{Y}$ с $\text{Y} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$ методом ЭПР наблюдался спиновый переход ионов $\text{Fe}(\text{III})$ из высокоспинового в низкоспиновое состояние. Установлено, что соединение с NO_3 , в отличие от соединения с PF_6 , обнаруживает температурный гистерезис спин-переходных свойств. На основании данных ЭПР определены термодинамические характеристики спиновых переходов. Особенности температурной динамики возникновения низкоспиновых комплексов соответствуют доменной модели развития спинового перехода.

Введение

В октаэдрических комплексах ионы $\text{Fe}(\text{III})$ могут существовать либо в высокоспиновом (BC) (${}^6\text{A}_1$, $S = 5/2$), либо в низкоспиновом (НС) (${}^2\text{T}_2$, $S = 1/2$) состояниях в зависимости от соотношения между величинами расщепления уровней энергии d-электрона в кубическом кристаллическом поле и энергии спаривания спинов. Если эти величины сравнимы, то под влиянием температуры, давления или облучения светом может быть индуцирован спиновый переход $\text{НС} \leftrightarrow \text{BC}$. Интересными для практического применения (в качестве переключаемых молекулярных устройств) являются соединения, в которых наблюдается резкий спиновый переход, обладающий температурным гистерезисом магнитных и/или оптических свойств, определяемых относительным содержанием BC и НС фракций $K = X_{\text{BC}}/X_{\text{НС}}$ [1, 2]. Возможность наблюдения спинового перехода в соединениях класса $\text{Fe}(\text{Z-SalEen})_2\text{Y}$ с $\text{Z} = 3\text{-OCH}_3$ и 5-OCH_3 продемонстрирована в [3, 4]. Показано, что свойства спинового перехода существенно зависят как от состава соединения (вида используемого фрагмента Z и внешнесферного аниона Y), так и от предыстории материала (они меняются после процедуры растирания или допирования ионами другого сорта). В ряду исследованных соединений лишь в одном был обнаружен спиновый переход с гистерезисом магнитных свойств шириной $\sim 3^\circ$. В указанных работах параметры спинового перехода определялись из измерений температурной зависимости магнитной восприимчивости или мёссбауэровских спектров. В настоящей работе обнаружен температурный гистерезис магнитных свойств шириной 11° комплексов $\text{Fe}(\text{III})$ в соединении $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{NO}_3$ и обсуждено влияние внешнесферного аниона Y на эти свойства. В отличие от [3, 4] термодинамические свойства перехода определены из данных ЭПР.

Методика эксперимента

Соединения $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{Y}$ с $\text{Y} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$ (соединения **I** и **II** соответственно) синтезированы по методике, аналогичной описанной в [3]. Измерения ЭПР выполнены в X-диапазоне в интервале температур 10–300 К, причём идентичность условий измерения в температурном цикле “300 $\rightarrow$ 10 $\rightarrow$ 300 К” контролировалась по показаниям соответствующих приборов и сигналу эталона.

Результаты измерений ЭПР

В обоих соединениях при комнатной температуре наблюдается анизотропный спектр ЭПР, представляющий суперпозицию по крайней мере двух типов сигналов: в соединении **I** это широкий слабополевой сигнал с $g_{\text{эфф}} \sim 3.6$ и сигнал с $g_{\text{эфф}} \sim 2.11$, по форме близкий к изотропному (рис. 1а); в соединении **II** это соответственно широкий слабополевой сигнал с $g_{\text{эфф}} \sim 3.45$ и сигнал с $g_{\text{эфф}} \sim 2.15$ (рис. 1б). Указанные величины $g_{\text{эфф}}$ определялись в точке пересечения с нулевой линией. Наблюдаемые сигналы принадлежат ионам $\text{Fe}(\text{III})$ в BC состоянии и описываются спин-гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = g\beta\mathbf{H}\mathbf{S} + D[S_z^2 - (1/3)S(S+1)] + E(S_x^2 - S_y^2). \quad (1)$$

При условии $h\nu \ll D$ энергетические уровни представляют собой три отдельных дублета, и спектр ЭПР внутри каждого из них описывается $S_{\text{эфф}} = 1/2$ [5, 6]. Параметры наблюдаемого в соединении **I** слабополевого сигнала соответствуют эффективным g-факторам среднего дублета при $D > 0.3 \text{ см}^{-1}$ и $E/D \sim 0.22$. Сигнал в **II** может быть описан примерно теми же параметрами, но в отличие от **I** с понижением температуры до $\sim 114 \text{ К}$ со стороны слабых полей возникает и усиливается дополнительная линия с $g_{\text{эфф}} \sim 8.5$. По-видимому, это накладывается сигнал от нижнего дублета, что указывает на

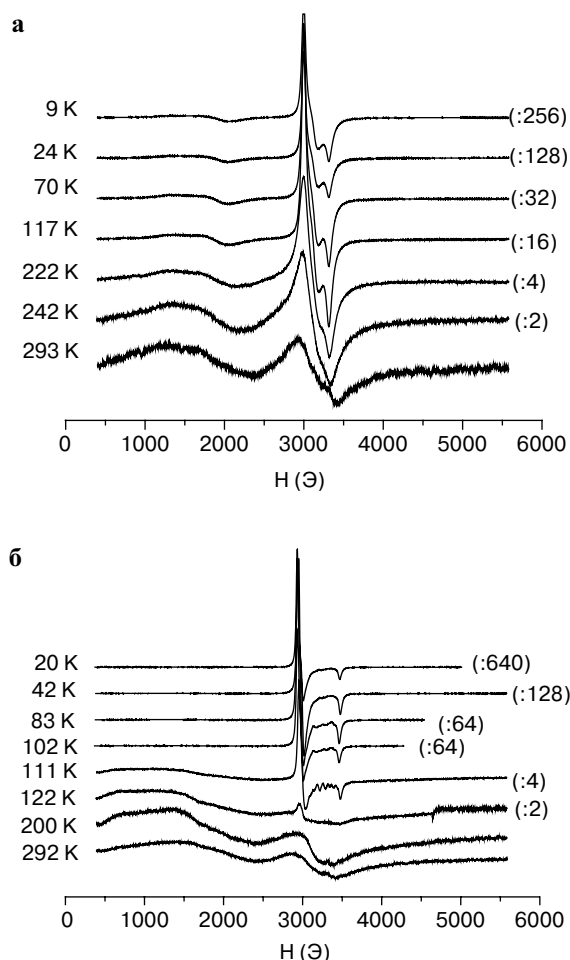


Рис. 1. Температурная зависимость спектров ЭПР Fe(III) в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{PF}_6$ (а) и $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{NO}_3$ (б); $\nu = 9343$ МГц.

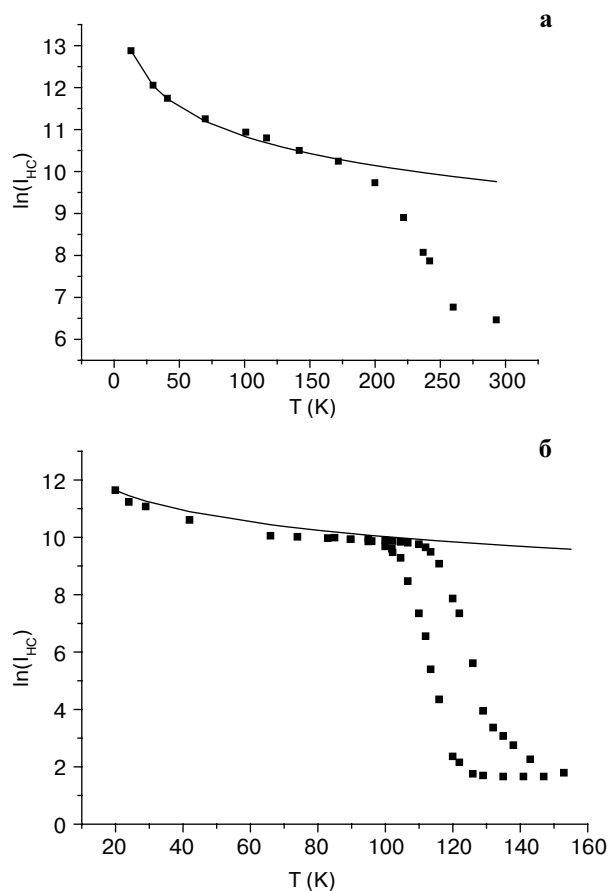


Рис. 2. Температурная зависимость интенсивности сигнала низкоспинового Fe(III) в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{PF}_6$ (а) и $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{NO}_3$ (б). Сплошная линия – относительная интенсивность, рассчитанная по закону Кюри.

большую величину расщепления в нулевом поле в этом соединении по сравнению с **I**. Дальнейшее изменение температуры ниже $T \sim 114$ К приводит к резкому уменьшению интенсивности слабополевого сигнала в **II**.

При понижении температуры, начиная с $T_1 \approx 250$ К для **I** и $T_1 \approx 120$ К для **II**, возникает и увеличивается по интенсивности сигнал от НС Fe(III) (рис. 1а и б соответственно). Он имеет форму, характерную для спектра ромбической симметрии с $S = 1/2$, и описывается не зависящими от температуры параметрами $g_1 = 2.233$; $g_2 = 2.146$; $g_3 = 2.023$ для соединения **I** и $g_1 = 2.266$; $g_2 = 2.227$; $g_3 = 1.923$ для соединения **II**. Относительное изменение интенсивности этого сигнала в области низких температур $T < T_2 \approx 170$ К для **I** и $T < T_2 \approx 90$ К для **II** хорошо описывается законом Кюри. В интервале $\Delta T = T_1 - T_2$ имеет место более резкое изменение относительной интенсивности сигнала (рис. 2), свидетельствующее о существовании в этих соединениях спинового перехода. При этом для соединения **II** ход температурной зависимости интенсивности сигнала НС Fe(III) при понижении и повышении температуры различен, то есть существует тем-

пературный гистерезис относительного содержания НС фракции. Выбор логарифмической шкалы по оси ординат на рис. 2 позволяет более наглядно показать изменение хода температурной зависимости интенсивности НС сигнала в области спинового перехода.

Следует отметить еще некоторые особенности сигналов ЭПР НС комплексов Fe(III) в **II**. Между пиками для параллельной и перпендикулярной ориентаций наблюдаются некоторые слабые дополнительные линии, положение которых меняется при вращении образца (а также и при изменении температуры). Их обычно связывают с мелкокристаллической структурой образца и путём тщательного растирания избавляются от этих дополнительных сигналов. Но, как показано в [4], процедура растирания образцов, аналогичных исследуемому в настоящей работе, приводит к изменению термодинамических характеристик спинового перехода. Поэтому мы не стремились избавиться от описанных дополнительных сигналов, а отмечаем только мелкокристаллическую структуру образца **II**.

Специфической является также динамика возникновения НС сигнала в соединении **II** при понижении тем-

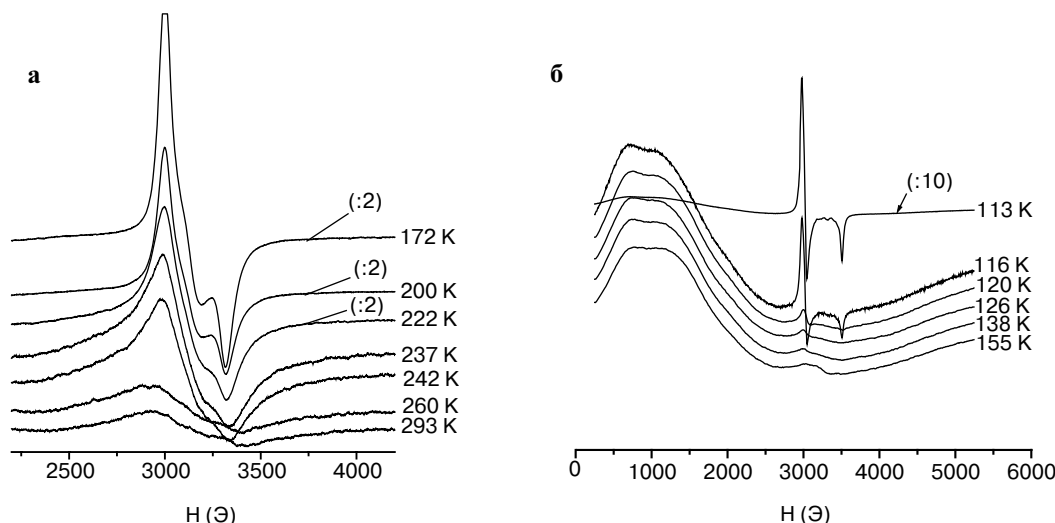


Рис. 3. Температурная динамика возникновения сигнала НС комплексов Fe(III) в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{PF}_6$ (а) и $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{NO}_3$ (б); $\nu = 9343$ МГц.

пературы. На фоне широкой линии от ВС комплексов Fe(III) при $T \sim 144$ К возникает слабый узкий сигнал, соответствующий пику для перпендикулярной ориентации НС комплекса Fe(III) (более слабый пик для параллельной ориентации не наблюдается). В достаточно широком интервале температур (вплоть до $T \sim 116$ К) его интенсивность увеличивается медленно (рис. 3б). При дальнейшем уменьшении температуры начинается резкое (в тысячи раз более быстрое) увеличение интенсивности сигнала от НС комплексов.

В образце **I** таких особенностей не наблюдается, но в отличие от **II** ширина индивидуальной линии возникающего НС сигнала уменьшается при понижении температуры от 242 до 200 К, что приводит к улучшению степени разрешения наблюдаемого анизотропного спектра (рис. 3а). При температурах ниже 200 К ширина индивидуальной линии не меняется. Аналогичные свойства спектров НС центров в процессе спинового перехода наблюдались в [7] в комплексах тиосемикарбазонов $\text{Na}[\text{Fe}(\text{Th-Sa})_2]$.

Анализ g -факторов НС комплексов Fe(III) проведён с использованием одноэлектронного приближения в рамках нижнего орбитального триплета аналогично [3, 8]. Выражения, полученные на волновых функциях нижнего триплета с учётом спин-орбитального взаимодействия $\xi 1s$, тетрагональной Δ и ромбической V компонент поля лигандов имеют вид:

$$\begin{aligned} g_z &= -2[A^2 - B^2 + C^2 + k(A^2 - C^2)], \\ g_x &= 2[AC - B^2 + kB(2^{1/2})(C - A)], \\ g_y &= -2[AC + B^2 + kB(2^{1/2})(C + A)], \end{aligned} \quad (2)$$

где k – коэффициент подавления спин-орбитальной связи; A, B, C – коэффициенты волновых функций (2) основного кramerсова дублета, связанные условием нормировки $A^2 + B^2 + C^2 = 1$:

$$\begin{aligned} y_1 &= A|1^+\rangle + B|z^-\rangle + C|-1^+\rangle, \\ y_2 &= A|-1^-\rangle + B|z^+\rangle + C|1^-\rangle, \\ z &= (1/2^{1/2})(|+2\rangle - |-2\rangle). \end{aligned} \quad (3)$$

Решение системы нелинейных уравнений (1) находилось итерационным методом по стандартной программе, использующей алгоритм Ньютона-Рафсона [9]. Подставляя полученные величины A, B, C, k в соответствующую энергетическую матрицу и решая соответствующую систему линейных уравнений, определяли величины E_r, Δ и V ; величина ξ принималась равной -460 см^{-1} . Результаты анализа g -факторов комплексов НС Fe(III) в исследованных соединениях приведены в таблице 1. При представлении волновых функций основного дублета в базисе действительных волновых функций коэффициент B соответствует коэффициенту орбитали $|d_{xy}\rangle$.

Таблица 1. Результаты анализа g -факторов комплексов НС Fe(III) в исследованных соединениях.

Соединение	g_x	g_y	g_z	A	B	C	k	Δ/ξ	V/ξ	$\Delta E_{12}/\xi$	$\Delta E_{13}/\xi$
$[\text{FeL}]\text{PF}_6$	-2.146	-2.233	1.969	0.0715	0.9973	0.0141	0.992	3.584	0.743	8.553	13.101
$[\text{FeL}]\text{NO}_3$	-2.227	-2.266	1.923	0.1164	0.9932	0.0069	0.837	2.158	0.140	5.979	7.219

Видно, что для обоих соединений основным состоянием является орбиталь $|d_{xy}\rangle$, причём примесь орбиталей $|xz\rangle$ и $|yz\rangle$, несколько больше в **II**, чем в **I**. Параметр подавления спин-орбитальной связи в **II** меньше, чем в **I**, что свидетельствует о большей степени ковалентности связей в низкоспиновых комплексах FeN_4O_2 в присутствии внешнесферного аниона NO_3 по сравнению с соединением **I**. Сопоставление параметров аксиального Δ и ромбического V искажений комплексов и величин энергетических интервалов ΔE_{12} и ΔE_{13} показывает, что НС комплексы в **I** характеризуются большей степенью тетрагональных и ромбических искажений (величина V/Δ равна 0.207 и 0.065 для **I** и **II**, соответственно, $\Delta_I/\Delta_{II} \cong 1.6$) и соответственно большим расщеплением триплетного состояния.

Обсуждение термодинамических свойств перехода

Из рис. 1 видно, что при изменении температуры форма спектра НС комплексов Fe(III) не меняется (остаются постоянными параметры). Поэтому можно утверждать, что в нашем случае температурная зависимость интенсивности сигналов адекватно передаёт характер изменения относительного содержания комплексов НС Fe(III) и может быть использована для характеристики свойств спинового перехода. Лишь для образца **I** в интервале температур 200–242 К, где ширина индивидуальной линии уменьшалась с понижением температуры, мы вводили поправку на изменение интенсивности сигнала от ширины индивидуальной линии.

Температура спинового перехода $T_{\text{СП}}$ определяется обычно в точке, в которой количество ВС и НС комплексов одинаково. При оценке величины $T_{\text{СП}}$ мы использовали то обстоятельство, что в интервале температур ΔT и в том, и в другом соединениях происходит фактически полный спиновый переход. Действительно, при температурах, больших T_1 , НС комплексы не существуют, а при температурах, меньших T_2 , относительная интенсивность сигнала от НС комплексов меняется по закону Кюри. Это позволяет представить полученную экспериментально зависимость $I_{\text{НС}}(T)$ в виде $X_{\text{ВС}}(T)$, обычно используемом для определения термодинамических параметров, где $X_{\text{ВС}}$ – доля высокоспиновой фракции. Тогда величина $T_{\text{СП}}$ определяется в точке, соответствующей $X_{\text{ВС}} = 0.5$, а величины изменения энтальпии ΔH , изменения энтропии ΔS и параметр взаимодействия Γ – путём

подгонки уравнения (1) из [1] к экспериментальной кривой

$$\ln K = \ln \left(\frac{1 - X_{\text{ВС}}}{X_{\text{ВС}}} \right) = \frac{\Delta H + \Gamma(1 - 2X_{\text{ВС}})}{RT} - \frac{\Delta S}{R}, \quad (4)$$

где R – газовая постоянная.

Полученные таким образом оценки термодинамических характеристик приведены в таблице 2. Вместе с тем, мы не можем исключить существование при низких температурах некоторой остаточной фракции ВС комплексов, не участвующих в спиновом переходе. Однако подгонка к экспериментальной кривой уравнения (4), модифицированного для этого случая в [10], в предположении относительного содержания остаточной фракции вплоть до 10%, привела к незначительному изменению термодинамических параметров.

Известны два возможных варианта зарождения НС фазы в ВС фазе, отличающиеся пространственным распределением комплексов с различными спиновыми состояниями: а) образуются домены ионов с одинаковым спином (под доменами понимаются просто агрегаты молекул с одинаковым спиновым состоянием) и б) ВС и НС ионы беспорядочно распределены в матрице. Отметим, что уравнение (4), использованное нами для определения термодинамических параметров спинового перехода, имеет одинаковый вид и в том, и в другом случае, но различный смысл параметра Γ [11]. Резкий фазовый переход, часто сопровождающийся эффектом гистерезиса, обычно связывают с образованием доменов и сильными межмолекулярными взаимодействиями (эффектами кооперативности). При слабых кооперативных взаимодействиях наблюдается плавное изменение молекулами своего спинового состояния и сохраняется их беспорядочное распределение [12, 13]. Резкий фазовый переход с гистерезисом в соединении **II** позволяет утверждать, что для него характерны сильные межмолекулярные взаимодействия. Наблюдаемая нами динамика возникновения НС сигнала в этом образце (рис. 3б) хорошо согласуется с описанным в [14] механизмом зарождения и роста фазового перехода, согласно которому, для того, чтобы домены из ионов одного сорта могли существовать и расти в матрице из ионов другого сорта, они должны достигнуть некоторых критических размеров и преодолеть некоторый активационный барьер. По-видимому, медленное нарастание интенсивности сигнала НС комплексов в интервале температур 144–116 К, предше-

Таблица 2. Термодинамические характеристики исследованных соединений.

Соединение	$T_{\text{СП}}^{\downarrow}$ (К)*	$T_{\text{СП}}^{\uparrow}$ (К)*	ΔH (кДж/моль)	ΔS (кДж/моль)	G (кДж/моль)
$[\text{FeL}]\text{PF}_6$	211	24.9	118	1.66	
$[\text{FeL}]\text{NO}_3$	104	115	18.7	170	2.49

* Величины определены непосредственно из эксперимента.

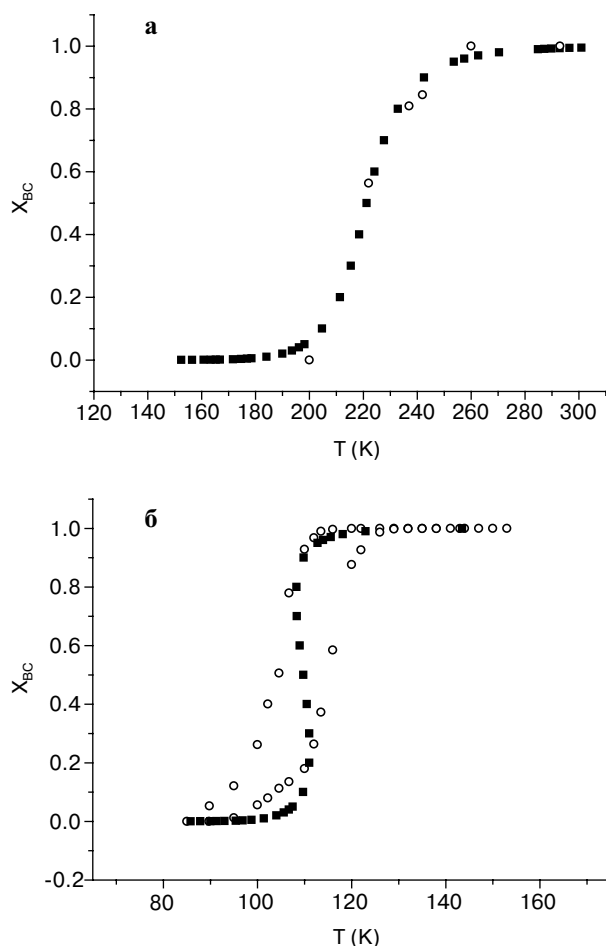


Рис. 4. Температурная зависимость относительного содержания высокоспиновой фракции в $\text{Fe}(4\text{-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{PF}_6$ (а) и $\text{Fe}(4\text{-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{NO}_3$ (б): ○ – экспериментальная; ■ – рассчитанная с параметрами, приведёнными в таблице 2.

ствующее спиновому переходу, связано с существованием зародышей НС доменов, не достигших ещё критических размеров. Заметим, что основываясь именно на таких представлениях, авторы [3] успешно объяснили результаты экспериментов по влиянию эффектов растяжения образца и допирования ионами другого сорта на его термодинамические характеристики.

Температурная динамика возникновения сигнала НС комплексов в образце **I** существенно отличается (рис. 3а). Наблюдаемое уменьшение ширины индивидуальной линии с понижением температуры в интервале 250–220 К, по аналогии с [7], можно объяснить усилением обменных взаимодействий в возникающих в структуре образца доменах из НС комплексов. Отметим, что в соответствии с [7], изменения ширины индивидуальной линии связаны с процессами, происходящими при спиновом переходе, а не с интервалом температур, при

котором он наблюдается. Это позволяет не рассматривать парамагнитную релаксацию как причину сужения линии при понижении температуры. Отсутствие такого эффекта в образце **II**, вероятнее всего, связано с тем, что в нём обменные взаимодействия между ВС и НС комплексами довольно велики, что приводит к сужению уширенных за счет диполь-дипольного взаимодействия линий уже на первых стадиях спинового перехода, когда доменная структура еще не возникает.

Таким образом, в спектрах ЭПР обоих образцов мы наблюдали некоторые особенности, которые свидетельствуют в пользу доменной модели спинового перехода в них. Этот факт коррелирует с довольно большими величинами параметра G , полученными в результате обобщения экспериментальных зависимостей $X_{\text{BC}}(T)$. Более высокое значение G в образце **II** по сравнению с **I** указывает на более сильные межмолекулярные взаимодействия и объясняет существование в нём более резкого спинового перехода, сопровождающегося эффектом гистерезиса. Усиление межмолекулярных взаимодействий в **II** можно объяснить потенциальной способностью аниона NO_3 образовывать водородные связи с протонами метильных групп соседних комплексов. Подтверждением этому является отсутствие резкого спинового перехода и тем более гистерезиса в соединении $\text{Fe}(\text{SalEen})_2\text{NO}_3$, не содержащем метоксогруппу OCH_3 [3].

Авторы выражают благодарность Г. И. Ивановой за синтез образцов и В. Е. Петрашеню за помощь в проведении измерений.

Литература

1. Kahn O., Krober J., Jay C: Adv. Mater. **4**, no. 11, 718–728 (1992)
2. Linert W., Kudryavtsev A.B.: Coord. Chem. Rev. **190–192**, 405–445 (1999)
3. Haddad M.S., Lynch M.W., Federer W.D., Hendrickson D.N.: Inorg. Chem. **20**, 123–131 (1981)
4. Haddad M.S., Federer W.D., Lynch M.W., Hendrickson D.N.: Inorg. Chem. **20**, 131–139 (1981)
5. Wickman H.H., Klein M.P., Shirley D.A.: J. Chem. Phys. **42**, no. 6, 2113–2117 (1965)
6. Aasa R.: J. Chem. Phys. **52**, no. 8, 3919–3930 (1970)
7. Zelentsov V.V., Yablokov Yu.V., Augustyniak-Jablokow M.A., Krupska A., Mrozinski J., Ulanov V.A.: Chem. Phys. **301**, 15–26 (2004)
8. Bhadbhade M.M., Srinivas D.: Polyhedron **17**, no. 16, 2699–2711 (1998)
9. Чен К., Джиблин П., Ирвинг А.: MATLAB в математических исследованиях. М.: Мир 2001. 346 с.
10. Martin J.P., Zarembowich J., Bousseksou A., Dworkin A., Haasnoot J.G., Varret F.: Inorg. Chem. **33**, 6325 (1994)
11. Gütllich P., Köppen H., Link R., Steinhäuser H.G.: J. Chem. Phys. **70**, no. 8, 3977–3983 (1979)
12. König E., Ritter G., Kulshrestha S.K.: Chem. Rev. **85**, 219 (1985)
13. Cantin C., Kliava J., Marbeuf A., Mikailitchenko D.: Eur. Phys. J. B **12**, 525–540 (1999)
14. Rao C.N.R., Rao K.J.: Phase transition in solids. New York: McGraw-Hill 1978. 325 p.

Исследование методом ЭПР NO-содержащих комплексов гемового и негемового железа в тканях крыс при фармакологической десимпатизации

С. В. Юртаева, А. А. Обычный, А. И. Исмаилова, Х. Л. Гайнутдинов

Лаборатория молекулярной радиоспектроскопии;
отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии;
отдел медицинской физики, лаборатория биофизики

Методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) установлено, что фармакологическая десимпатизация сопровождается снижением выработки оксида азота (NO) в сердце и печени у 14-дневных крыс. Наиболее сильный эффект снижения наблюдался для тканей сердца (приблизительно в 10 раз). Уменьшалось количество NO в составе спиновой ловушки и количество R- и T-конформеров нитрозильных комплексов гемоглобина (Hb-NO). При этом, в тканях сердца десимпатизированных крыс в общем количестве нитрозогемоглобинов доля T-конформеров увеличивалась. В спектрах ЭПР тканей сердца у 14-дневных контрольных крыс обнаружен сигнал от T-конформера, которого практически нет у 100-дневных крыс.

Введение

К настоящему времени известно, что оксид азота играет важную роль в работе сердечно-сосудистой системы, в частности, регулирует тонус сосудов, артериальное давление и сократимость миокарда. На сегодняшний день новым перспективным направлением является изучение роли NO в регуляции сердечной деятельности. Известно, что управление работой сердечно-сосудистой системы осуществляется посредством симпатического и парасимпатического отделов вегетативной нервной системы. Роль симпатического отдела вегетативной нервной системы в этих процессах мало изучена. Для исследования роли симпатической нервной системы широко используется метод фармакологической десимпатизации (химическое воздействие на ткань нервной системы) с помощью гуанетидина сульфата. Известно, что гуанетидин сульфат вызывает деструкцию более 90% симпатических нейронов и не оказывает влияния на нейроны других отделов вегетативной нервной системы в сердце, таким образом, практически выключая из работы симпатический отдел вегетативной нервной системы. Кроме того, установлено, что в организме млекопитающих парасимпатическая нервная система начинает развиваться раньше, чем симпатическая нервная система, при этом динамика синтеза NO в процессе развития остаётся неизученной.

Целью данного исследования является изучение NO-содержащих парамагнитных комплексов иона железа в тканях сердца и печени крыс в процессе развития (на примере крыс различного возраста: 14-дневных и 100-дневных), а также определение изменения содержания NO в тканях сердца и печени при фармакологической десимпатизации (на примере 14-дневных крыс).

Методика фармакологического воздействия и десимпатизации

В настоящей работе изучалось содержание оксида азота в десимпатизированном миокарде, а также в ткани печени. Для симпатической деструкции сердечной мышцы применялся раствор гуанетидина сульфата. Ежедневно, в одно и то же время, начиная с первого дня жизни, крысам подкожно вводился при помощи инсулиновых шприцов подогретый до 38 °C раствор гуанетидина сульфата из расчёта 10 мл на кг массы, который готовился на физиологическом растворе разведением до концентрации 2.5 мг/мл.

Образцы

Ранее нами сообщалось об изучении продукции оксида азота в тканях крыс при моделировании ишемии [1, 2]. Эти исследования проводились на крысах породы Вистар; количество оксида азота оценивалось только по интенсивности сигнала ЭПР парамагнитного комплекса оксида азота с введённой спиновой ловушкой (ДЭТК)₂-Fe-NO.

В данной работе для экспериментов использовались белые беспородные крысы. Для этих крыс, по-видимому, характерно более высокое содержание гемового железа в крови и тканях, что позволяет изучать не только оксид азота, соединившийся со спиновой ловушкой, но и его комплексы с гемовым железом, которое входит преимущественно в состав белковых молекул миоглобина и гемоглобина и является естественной спиновой ловушкой для NO в живом организме.

В качестве спиновой ловушки оксида азота использовали диэтилдитиокарбамат натрия (ДЭТК),

который вводили крысам по методике, разработанной А. Ф. Ваниным и др. [3]. Методика приготовления образцов была подробно изложена нами в работе [2]. Извлечённые ткани замораживались в жидком азоте в специальных одноразовых шприцах для измерений. Масса образцов составляла 100 мг. Спектры ЭПР приготовленных образцов записывали на спектрометре ЭПР ER-200E-SRC фирмы Брукер при 77 К в X-диапазоне.

Экспериментальные результаты

Методом ЭПР были изучены ткани сердца и печени контрольных крыс 14-дневного и 100-дневного возраста, и крыс, на которых была реализована модель десимпатизации. Анализировалось изменение спектров ЭПР тканей в процессе роста и развития организма, а также воздействие фармакологической десимпатизации на парамагнитные комплексы в тканях.

Во всех измеренных спектрах ЭПР регистрировалось три типа сигналов парамагнитных комплексов иона железа с оксидом азота: комплекса на основе спиновой ловушки $(\text{ДЭТК})_2\text{-Fe-NO}$ ($S = 1/2, I^N = 1$) (рис. 1а) и двух типов комплексов гемового железа с оксидом азота: R- и Т-конформеры Hb-NO (рис. 1б, 1в), которые обычно интерпретируют в литературе как шестикоординированный и пятикоординированный комплексы гемового железа в гемоглобине [4, 5].

Спектр ЭПР R-конформера Hb-NO (рис. 1б) имеет форму асимметричной линии и обусловлен парамагнитным центром иона железа ($S = 1/2$) ромбической симметрии с g -факторами 2.06, 2.03 и 1.98 [4–6]. Этот спектр представляет собой сумму сигналов α - и β -белковых цепей гемоглобина, в которых атомы железа обладают шестьюкоординационными связями и находятся в плоскости порфириновых колец. Интенсивность сигнала R-конформера оценивалась по амплитуде правого крыла линии (рис. 1б), так как на него не накладывались другие сигналы в спектре. Для Т-конформеров Hb-NO (рис. 1в) характерно наличие сверхтонкой структуры (СТС) от лиганда азота ($I = 1$) с расщеплением 17 Э для сигналов с g -факторами 2.06 и 2.01. Данная СТС обусловлена атомами железа α -цепей гемоглобина в состоянии с пятикоординационными связями [5] и их смещением из плоскости порфиринового кольца в направлении лиганда азота.

Следует отметить, что спектр, представленный на рис. 1в, является суперпозицией двух сигналов R- и Т-конформеров. Истинный спектр ЭПР Т-конформера можно получить, вычитая из данного спектра вклад от R-конформера (рис. 1г). Спектр только Т-конформера наблюдается редко, т.к. в гемоглобине имеется два типа белковых цепочек α и β , имеющих некоторые различия в структуре; при присоединении NO к иону железа α -цепочки

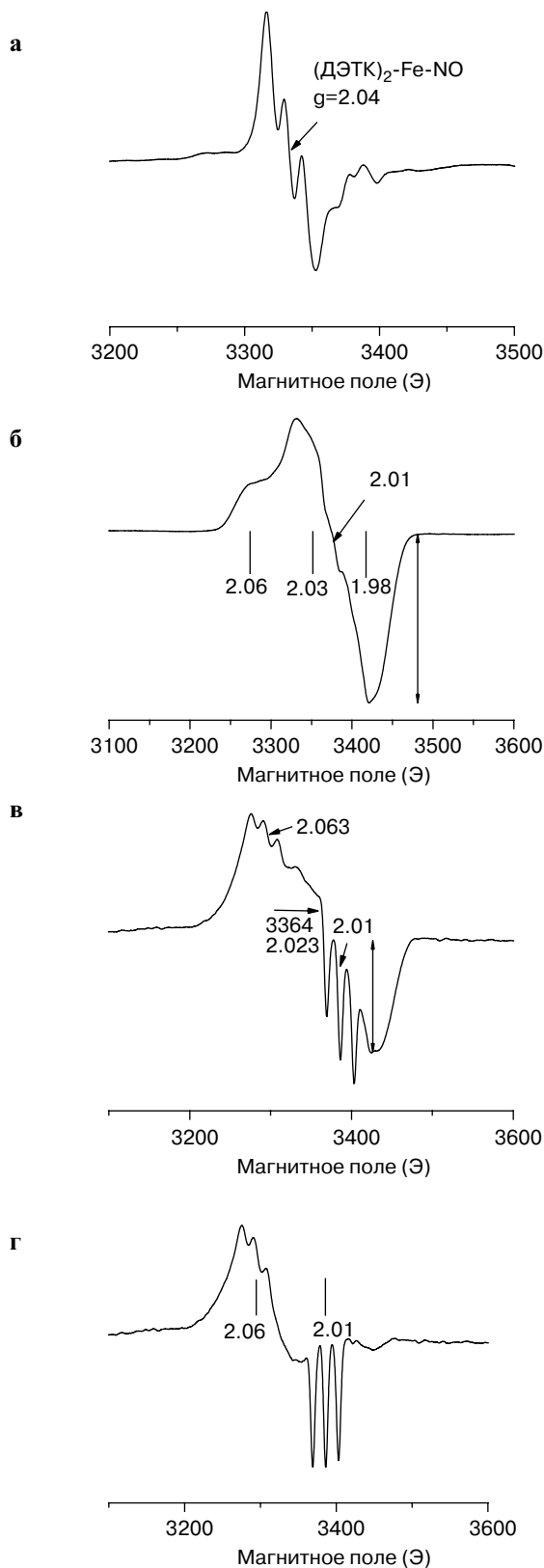


Рис. 1. Спектры ЭПР парамагнитных комплексов в тканях крысы: а спиновой ловушки $(\text{ДЭТК})_2\text{-Fe-NO}$, б R-конформера Hb-NO, в суперпозиции R- и Т-конформеров Hb-NO, г Т-конформера Hb-NO. $T = 77$ К, $\nu = 9.511$ ГГц.

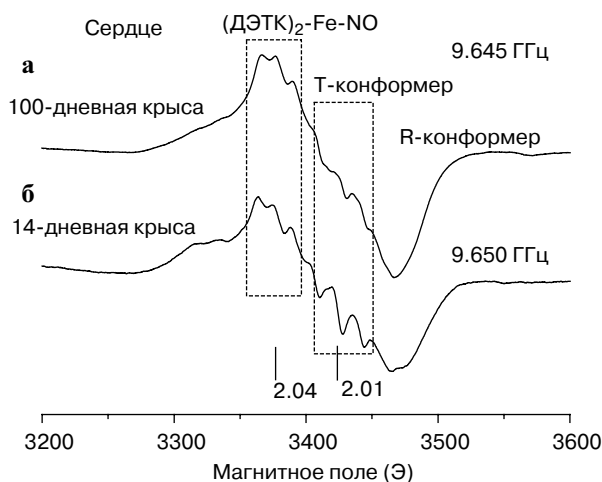


Рис. 2. Спектры ЭПР тканей сердца 100-дневной крысы (а) и 14-дневной крысы (б).

возможны оба конформера, а при присоединении NO к β -цепочке преимущественно R-конформер [6], таким образом, в суммарном спектре нитрозильных комплексов гемоглобина присутствуют чаще оба конформера. Интенсивность сигнала Т-конформера обычно оценивают по амплитуде триплетного сигнала с центром при $g = 2.01$ (рис. 1г).

Соотношение интенсивностей сигналов всех перечисленных комплексов в различных тканях заметно менялось – от присутствия в спектрах только одного типа центров до наличия всех трёх одновременно. Сигналы различного происхождения сравнивали по величине амплитуды сигнала ЭПР.

При сопоставлении спектров ЭПР тканей сердца 100-дневных (рис. 2а) и 14-дневных (рис. 2б) крыс было обнаружено изменение спектров ЭПР. Для тканей сердца 100-дневных крыс было характерно большее содержание R-конформеров Hb-NO и сигнал R-конформера был фактически основным сигналом в спектре, т.е. большая часть оксида азота находилась в составе этого комплекса. Поскольку R-конформер является очень устойчивым к оксигенации (т.е. практически не замещает NO на кислород в пятой координационной связи в гемоглобине при свободном доступе кислорода), то такой сигнал обычно характеризует состояние гипоксии тканей [7]. Сигнал от спиновой ловушки был намного меньше. Т-конформер практически отсутствовал. Такой характер спектра ЭПР объясняется особенностью тканей сердца, которая заключается в том, что сердечная мышца состоит преимущественно из миоглобина, для которого более характерна форма R-конформера [7]. Для тканей сердца крыс 14-дневного возраста было установлено увеличение доли сигнала Т-конформера, который можно объяснить увеличением количества Т-конформеров в тканевой крови.

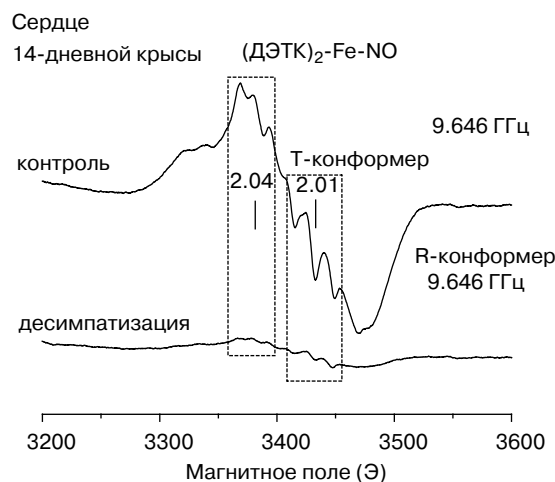


Рис. 3. Спектры ЭПР тканей сердца 14-дневной крысы: контрольной и десимпатизированной.

В тканях сердца 14-дневных крыс после десимпатизации (рис. 3) было обнаружено уменьшение амплитуды сигналов ЭПР всех парамагнитных комплексов с оксидом азота приблизительно на порядок, однако в общем количестве комплексов нитрогемоглобина доля Т-конформеров увеличивалась.

В спектрах тканей печени взрослых (100-дневных) крыс наиболее интенсивным сигналом был сигнал спиновой ловушки $(DЭТК)_2-Fe-NO$. У 14-дневных крыс доля NO, находящегося в составе ловушки, была меньше, а интенсивность сигналов от R- и Т-конформеров была значительно выше. В тканях печени 14-дневных крыс иногда регистрировались линии парамагнитного комплекса $Cu(DЭТК)_2$ (наиболее интенсивная линия соответствует $g = 2.01$) [2], которых не было в тканях взрослых крыс.

Было установлено, что десимпатизация 14-дневных крыс приводила к уменьшению количества NO-содержащих парамагнитных комплексов в печени (приблизительно в 1.5–2 раза), но в меньшей степени, чем в тканях сердца.

Таким образом, из данных ЭПР следует, что в результате проведённой десимпатизации на 14-дневных крысах количество оксида азота в тканях, входящего в состав всех перечисленных парамагнитных комплексов, уменьшается и меняется соотношение между R- и Т-конформерами Hb-NO в сторону увеличения доли последнего. Наиболее сильно этот эффект проявляется в тканях сердца. Результаты являются предварительными и требуют более детального количественного исследования.

Исследования образования NO при десимпатизации проводились совместно с кафедрой анатомии, физиологии и охраны здоровья человека Татарского государственного гуманитарно-педагогического университета (зав. кафедрой – проф. Ф. Г. Ситдилов, аспирант Ф. К. Каримов). Авторы выражают благодарность проф. Г. П. Виш-

невской за консультации по вопросам ЭПР спектроскопии металлокомплексов. Работа поддержана грантом РФФИ (№ 06-04-48834).

Литература

1. Ismailova A.I., Gnezdilov O.I., Muranova L.N., Obynochny A.A., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L., Nasirova A.G., Nigmatullina R.R., Rakhmatullina F.F., Zefirov A.L.: *Appl. Magn. Reson.* **28**, 421–430 (2005)
2. Исмаилова А.И., Юртаева С.В., Гнездилов О.И., Муранова Л.Н., Обыночный А.А., Гайнутдинов Х.Л.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2005. Ежегодник, с. 56–63. Казань: ФизтехПресс 2006.
3. Vanin A.F., Mordvintcev P.I., Kleshchev A.L.: *Studia Biophys.* **107**, 135–142 (1984)
4. Kon H.: *J. Biol. Chem.* **243**, 4350–4355 (1968)
5. Szabo A., Perutz M.F.: *Biochem.* **15**, 4427–4428 (1976)
6. Nagai K., Hori H., Yoshida S., Sakamoto H., Morimoto H.: *Biochim. Biophys. Acta* **532**, 17–28 (1978)
7. Ажипа Я.И., Реутов В.П., Каюшин Л.П., Никишкин Е.И.: *Изв. АН. Сер. биол.* № 3, 240–250 (1983)

Исследование эффектов облучения тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ионами Co^+ и Fe^+ с энергией 40 кэВ

А. Н. Бухараев, А. А. Валидов, Г. Г. Гумаров, Н. Ю. Панарина, В. Ю. Петухов,
Ю. И. Таланов, Р. И. Хасанов

Лаборатория физики перспективных материалов;
отдел радиационных воздействий на материалы, лаборатория радиационной химии и радиобиологии

В работе представлены результаты исследования влияния низкоэнергетического облучения тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ на их свойства, такие как температура перехода в сверхпроводящее состояние, плотность критического тока и положение линии необратимости на фазовой диаграмме. Доза облучения образцов ионами Fe^+ и Co^+ с энергией 40 кэВ варьировалась от $5 \cdot 10^{11}$ до $3 \cdot 10^{13}$ ион/см². Эффективность пиннинга вихрей на полученных в результате облучения дефектах оценивалась с помощью магнитных и радиоспектроскопических измерений. Было установлено, что в результате облучения ионами железа с дозой $5 \cdot 10^{11}$ ион/см² плотность критического тока увеличивается в 2 раза, а область бездиссипативного протекания тока расширяется. Увеличение дозы облучения приводит к ослаблению пиннинга и, как следствие, к ухудшению сверхпроводящих свойств тонких плёнок. Усиление пиннинга при облучении малой дозой объясняется формированием локальных аморфных областей, которые фиксируют нити магнитного потока. При облучении с большей дозой аморфные области перекрываются, образуя сплошной слой, и не препятствуют движению вихрей.

Введение

Основной проблемой, которую необходимо решить для использования сверхпроводящего материала в технике, является получение достаточно большой плотности критического тока. В случае высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) эта проблема встаёт особенно остро в связи с тем, что естественные дефекты обладают очень низким потенциалом пиннинга. В сочетании с большими термическими флуктуациями в области азотных температур (наиболее интересных с точки зрения практического применения) это часто приводит к нулевой плотности критического тока пиннинга. Поэтому усилия многих исследователей и научных центров направлены на создание искусственных центров пиннинга, которые обеспечивали бы достаточно высокую плотность критического тока при высоких температурах (вблизи T_C и температуры кипения жидкого азота). Такие центры должны иметь размеры, сравнимые с длиной когерентности. Для ВТСП эта величина составляет 2 нм и более. Поэтому необходимо создавать дефекты кристаллической решётки, понижающие параметр порядка в области, размером гораздо большим, чем размер “точечных” дефектов (вакансии, отдельные ионы внедрения), включающей в себя сотни и тысячи атомов. В научной литературе имеется описание нескольких способов создания “объёмных” дефектов. Один из методов – введение неорганических добавок (например, MgO , NbC , TaC , TiC , HfN и т.п.) в исходную шихту при твёрдофазном синтезе керамических ВТСП. Таким способом удаётся почти вдвое увеличить плотность критического тока при гелиевой и азотной температурах [1]. Существуют способы

повышения удельной силы пиннинга путём модификации поверхности: нанесение царапин [2], травление ямок [3], напыление магнитных островков [4]. Такие поверхностные центры обладают достаточно высоким потенциалом пиннинга. Однако технология приготовления этих образований не позволяет создавать их в количестве, достаточном для захвата большого числа вихревых нитей, т.е. большого магнитного потока. Для создания искусственных дефектов часто используется различного рода радиационное воздействие на сверхпроводящие материалы: облучение протонами [5], нейтронами [6] и электронами [7]. В результате таких облучений в ВТСП материале образуются в основном точечные дефекты. За счёт увеличения их числа можно повысить плотность критического тока, но незначительно. Самым эффективным способом создания большого числа центров (достаточного для захвата поля величиной более 1 Тл), обладающих самым высоким потенциалом пиннинга, считается бомбардировка сверхпроводника ионами тяжёлых элементов (Ag , Au , Pb , U и др.), разогнанными в ускорителе до энергий порядка 1 ГэВ [8]. Такие ионы прошивают насквозь достаточно толстые образцы ВТСП (до 10 мкм). На месте их треков образуются аморфные несверхпроводящие области цилиндрической формы (колончатые дефекты) диаметром около 10 нм. Ввиду уникальности свойств колончатых дефектов их исследованию посвящено большое число работ, несмотря на весьма сложную и дорогостоящую технологию их приготовления. То, что такие дефекты значительно увеличивают плотность критического тока и повышают поля необратимости, было убедительно показано многими авторами [9].

В случае тонких плёнок традиционный способ создания центров пиннинга в форме колончатых дефектов путём облучения сверхпроводящего материала пучками ионов тяжёлых элементов с высокой энергией оказывается малоэффективным. Связано это с двумя обстоятельствами. Во-первых, сила пиннинга колончатых дефектов вблизи поверхности существенно ослабевает, а в плёнках толщиной около 100 нм приповерхностные области составляют весь объём образца. Во-вторых, при бомбардировке сверхпроводника высокоэнергетическими ионами на его поверхности образуется система кратеров, диаметр которых существенно превышает диаметр колонок в глубине сверхпроводника. В результате облучения с большой дозой, необходимой для создания достаточного количества центров пиннинга, кристаллическая структура приповерхностного слоя оказывается в большой степени разрушённой, а его критические параметры значительно понижены [10].

Облучение сверхпроводящих плёнок низкоэнергетическими ионами (10–100 кэВ) не приводит к таким разрушительным последствиям. Такое облучение обычно считается неэффективным, так как проникает в материал на очень малую глубину (десятки нанометров) и формирует в основном точечные дефекты. Однако в случае плёнок толщиной порядка 200 нм большие глубины проникновения уже не требуются. Выбором подходящих ионов, энергии, дозы и условий облучения можно добиться формирования заглублённых аморфных областей или иных несверхпроводящих образований (микропоры, блистеры, нанокластеры новых фаз), обладающих значительной силой пиннинга. В данной работе представлены результаты исследования сверхпроводящих свойств тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, в которых после облучения ионами железа и кобальта с энергией 40 кэВ образовались радиационные дефекты в виде ограниченных аморфных областей. Показана возможность увеличения силы пиннинга с помощью этого метода.

Материалы и методы исследования

Тонкие плёнки ВТСП $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ были приготовлены в Институте физики Университета Гуттенберга (г. Майнц, Германия) методом магнетронного распыления исходного соединения в атмосфере кислорода и осаждения материала на диэлектрическую подложку. Подложками служили монокристаллические пластины соединения LaAlO_3 размером $10 \times 10 \times 1$ мм³. Сразу после напыления плёнки подвергались отжигу в кислородной атмосфере при температуре 820°C и давлении 3.3 мбар. Толщина плёнок составляла 200 нм. Впоследствии образцы облучались при комнатной температуре однозарядными ионами Fe^+ , Co^+ с энергией 40 кэВ на ускорителе ИЛУ-3 в Казанском физико-техническом институте. Доза облучения исходных образцов варьировалась от $5 \cdot 10^{11}$ ионов/см² (малая доза) до $3 \cdot 10^{13}$ ионов/см² (боль-

Таблица 1. Характеристики исследуемых образцов.

Образец	Размеры (мм×мм)	Ион	Доза облучения D (ион/см ²)
B1	2.8×3.2	Co^+	$3 \cdot 10^{12}$
B2	3.2×3.6		Не облучён
B3	2.9×3.6	Fe^+	$3 \cdot 10^{13}$
B4	3.1×3.4	Fe^+	$5 \cdot 10^{11}$
B5	3.1×3.4		Не облучён

шая доза). В таблице 1 приведены размеры и дозы облучения исследуемых образцов.

Мы изучали влияние облучения на такие характеристики плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, как T_c , плотность критического тока j_c и линия необратимости (ЛН). Для определения критической температуры использовались измерения высокочастотной магнитной восприимчивости на частоте 10 МГц. Плотность критического тока оценивалась по величине поля полного проникновения, которая определялась с помощью измерений ЭПР поверхностного парамагнитного зонда, зафиксированного в центре плёнки. Парамагнитным зондом служила частица дифенилпикрилгидразила (ДФПГ), малого по сравнению с плёнкой размера (около 0.1 мм). Измерялось смещение сигнала ЭПР под действием локальных магнитных полей сверхпроводника. Зная геометрические размеры образца и величину поля полного проникновения, можно определить плотность критического тока j_c по теоретической формуле, приведенной ниже, в разделе “Обсуждение”.

Точки ЛН определялись путём регистрации петель гистерезиса намагниченности $M(H)$ и нерезонансного микроволнового поглощения (МВП). Измерения МВП проводились на радиоспектрометре BER-418S фирмы Брукер, работающем в X-диапазоне на частоте около 9.2 ГГц. Зависимость намагниченности от магнитного поля $M(H)$ измерялась с помощью датчиков Холла с рабочей зоной размером 0.5×0.5 мм² и чувствительностью 9.8 мкВ/Гс. Для определения абсолютной величины намагниченности образцов использовались измерения на SQUID-магнетометре (в Институте Поля Шеррера, Цюрих, Швейцария). Петли гистерезиса намагниченности и микроволнового поглощения регистрировались в широком диапазоне температур (от 20 К до T_c) и магнитных полей (от 0 до 6 кЭ при измерениях холловскими преобразователями, до 15 кЭ на SQUID’е и до 9 кЭ при измерениях МВП).

Экспериментальные результаты

На рис. 1 представлены переходы в сверхпроводящее состояние плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ до и после облучения. Переходы получены путём измерения температурной зависимости высокочастотной магнитной восприимчивости. Образец B1 облучался ионами Co^+ с дозой $3 \cdot 10^{12}$

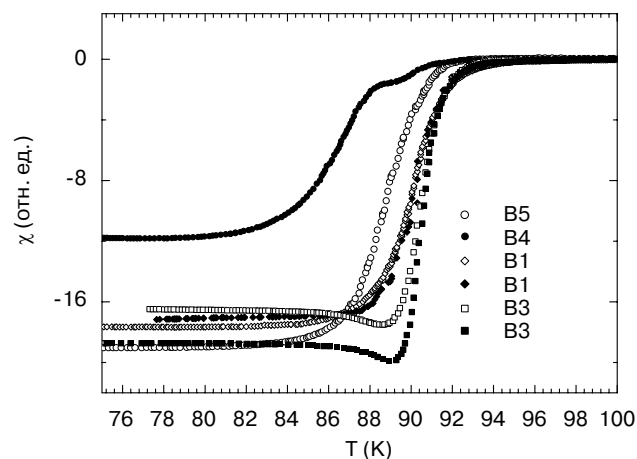


Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости необлучённых (белые значки) и облучённых (чёрные значки) образцов, отражающая их переход из нормального состояния в сверхпроводящее. Дозы облучения исследуемых образцов приведены в таблице 1.

ион/см², B3 был облучён ионами Fe⁺ с дозой $3 \cdot 10^{13}$ ион/см², а B4 – ионами Fe⁺ с дозой $5 \cdot 10^{11}$ ион/см². Изменение параметров сверхпроводящего перехода в результате облучения образцов показано в таблице 2. Видно, что облучение сверхпроводящих плёнок не приводит ни к существенному изменению их критической температуры, измеренной на полувысоте перехода, ни к уширению перехода.

На рис. 2 для примера приведены петли гистерезиса намагниченности $M(H)$ и нерезонансного микроволнового поглощения облучённой плёнки B3, записанные при температуре 61 К. Величина магнитного поля, при которой происходит схлопывание петли и исчезновение гистерезиса, называется полём необратимости H_{ir} . Набор точек $H_{ir}(T)$, полученных при разных температурах, образует ЛН, разделяющую области фазовой диаграммы с диссипативным и бездиссипативным протеканием тока.

На рис. 3 представлены ЛН нескольких образцов, полученные с помощью измерений МВП. Для корректного сравнения ЛН образцов с разной критической температурой T_c поля необратимости построены в зависимости от приведённой температуры T/T_c .

Видно, что положение ЛН на фазовой диаграмме изменяется в зависимости от дозы облучения. Эта зави-

Таблица 2. Изменение критической температуры T_c и ширины перехода в сверхпроводящее состояние ΔT_c в результате низкоэнергетического облучения.

Образец	Критическая температура T_c (К)		Ширина перехода ΔT_c (К)	
	Необлучённый	Облучённый	Необлучённый	Облучённый
B1	90	90.2	4.2	3.3
B3	90.5	90.6	2.1	1.8
B4	88.8	86.5	4.2	6.4

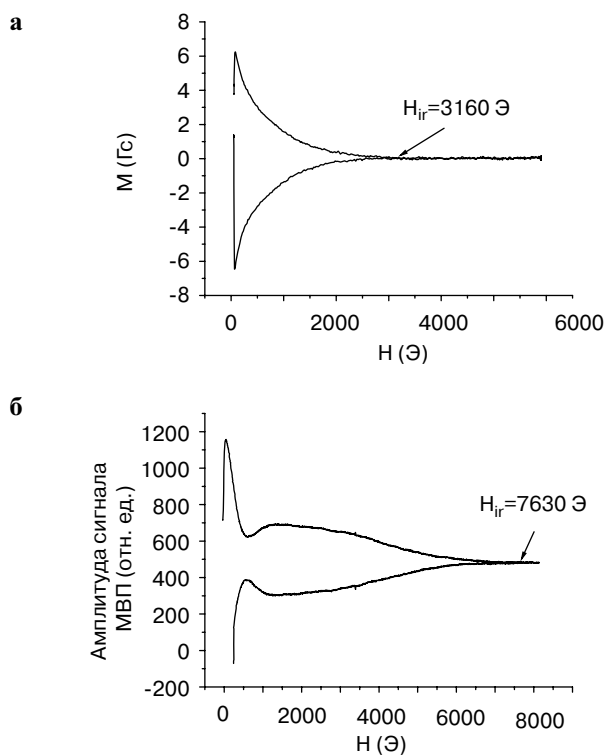


Рис. 2. Петли гистерезиса намагниченности (а) и микроволнового поглощения (б) облучённой большой дозой плёнки B3, записанные при температуре 61 К.

симость носит немонотонный характер, и, кроме того, меняется при изменении способа измерения. Из рис. 3 видно, что в результате облучения плёнки $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ионами Fe⁺ с самой малой дозой ($5 \cdot 10^{11}$ ион/см²) ЛН смещается вверх по полю и температуре по сравнению с необлучённым образцом. Увеличение дозы облучения до $3 \cdot 10^{12}$ ион/см² приводит к значительному уменьшению сдвига ЛН относительно исходного положения. У образца, облучённого наибольшей дозой ($3 \cdot 10^{13}$ ионов Fe⁺/см²), ЛН сместилась еще ниже по полю и темпера-

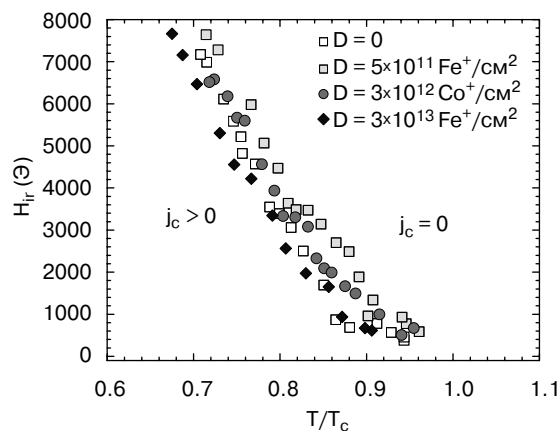


Рис. 3. Линии необратимости, полученные из измерений МВП плёнок с разными дозами облучения.

туре и расположилась даже ниже, чем ЛН необлучённого образца.

Несколько иное поведение ЛН под действием облучения обнаруживается при измерении гистерезиса намагниченности. Прежде всего, все ЛН, полученные из измерений намагниченности, заметно смещены вниз по температуре (примерно на 10°C) по сравнению с ЛН, полученными из МВП. Это смещение отражает частотную зависимость положения ЛН, которая обусловлена конечным “временем жизни” вихревой нити на центре пиннинга с потенциальной ямой малой глубины [12]. Кроме того, ЛН всех облучённых образцов смещены в сторону низких полей и температур относительно ЛН необлучённых плёнок при измерениях намагниченности на постоянном токе.

Как было отмечено выше, оценку плотности критического тока можно произвести по величине поля полного проникновения H^* . Для того, чтобы его определить, мы использовали следующую процедуру. Образец с крупинкой ДФПГ, помещённой на его центр, охлаждался от $T > T_C$ до температуры измерения в поле H_{cool} , близком к резонансному полю “свободного” ДФПГ. Положение сигнала в спектре ЭПР меняется при изменении H_{cool} . Полученная зависимость сдвига резонансного сигнала ДФПГ ($\Delta H_R = H_R - H_{R0}$) от величины поля замораживания имеет немонотонный характер (рис. 4). Здесь H_R соответствует резонансному полю крупинки ДФПГ, помещённой на сверхпроводник, а H_{R0} есть резонансное поле ДФПГ без сверхпроводника. Результаты измерений, выполненных на облучённом большой дозой образце ВЗ, представлены на рис. 4. При малых отклонениях поля замораживания от H_{R0} , сдвиг сигнала ДФПГ ΔH_R сильно зависит от разности $(H_{R0} - H_{cool})$. Подобное поведение обусловлено изменением профиля поля на поверхности сверхпроводника. Изменение ΔH_R связано с тем, что вблизи поверхности сверхпроводника, где помещается пара-

магнитный зонд, присутствует тангенциальная компонента поля H_x [13]. По мере увеличения разности $(H_{R0} - H_{cool})$ вклад этой компоненты уменьшается и становится равным нулю, когда разность достигает величины H^* – поля полного проникновения. После этого, при дальнейшем изменении поля H_{cool} , профиль поля в его поверхности остаётся неизменным, что проявляется как независимость сдвига резонансного сигнала от $(H_{R0} - H_{cool})$. Другими словами, функция $\Delta H_R (H_{R0} - H_{cool})$ выходит на насыщение. Таким образом, график (рис. 4) позволяет определить величину поля полного проникновения H^* , которая однозначно связана с плотностью критического тока [14].

Обсуждение

Слабое изменение критической температуры после облучения указывает на то, что бомбардировка тонкоплёночных сверхпроводников пучком низкоэнергетических ионов не вызывает существенных изменений их кристаллической структуры в отличие от высокоэнергетического облучения, которое приводит к разрушению поверхностного слоя и значительному понижению T_C [15].

Вывявленное по измерениям МВП смещение ЛН образца с наименьшей дозой облучения ($5 \cdot 10^{11}$ ион/см²) в область более высоких температур и полей свидетельствует о расширении области бездиссипативного протекания тока в образце. Этот эффект, по-видимому, связан с тем, что при облучении ионами в сверхпроводящей плёнке образуются радиационные дефекты в виде локальных заглубленных аморфных областей, которые закрепляют вихри магнитного потока, то есть служат эффективными центрами пиннинга. Наше предположение подтверждается приведёнными ниже расчётами размеров и распределения дефектов.

Распределение плотности внедрённых ионов и дефектов в зависимости от глубины проникновения имеет гауссову форму (рис. 5) и может быть задано выражением [16]

$$N(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (1)$$

где D – доза имплантации, R_p есть средняя глубина залегания ионов, а ΔR_p – среднеквадратичное отклонение, характеризующее разброс положений дефектов. Мы использовали формулу (1) для оценки размеров дефектов, образовавшихся при облучении образцов дозой $5 \cdot 10^{11}$ Fe⁺/см². Значения R_p и ΔR_p зависят от массы иона, средней массы облучаемого вещества и энергии облучения. Они протабулированы и могут быть взяты из книги [17]. Средняя масса атомов в исследуемых сверхпроводящих плёнках Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ равняется 60, а атомная масса имплантированных ионов составляет 56 (Fe⁺) и 59 (Co⁺), соответственно. При таком соотношении масс ионов подложки и бомбардирующего иона с энергией 40 кэВ иско-

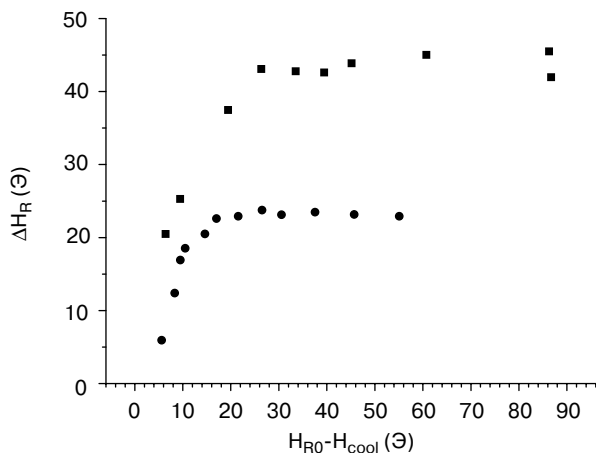


Рис. 4. Зависимость сдвига резонансного сигнала парамагнитного зонда (ДФПГ), помещённого на центр плёнки, от поля замораживания для образца ВЗ, облучённого дозой $3 \cdot 10^{12}$ Co⁺/см². Зависимость получена при температурах 25 К (■) и 34 К (●).

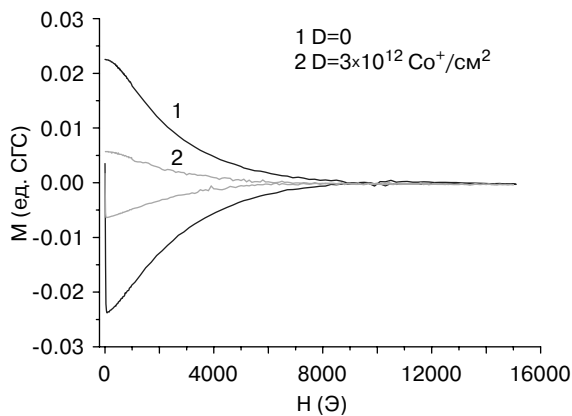


Рис. 5. Петли гистерезиса намагниченности необлучённого (1) и облучённого с дозой $3 \cdot 10^{12}$ ион/см² (2) образцов, полученные на SQUID-магнетометре при температуре 34 К.

мые параметры равны: $R_p = 11.2$ нм и $\Delta R_p = 5.9$ нм. Таким образом, плотность ионов в максимуме распределения $N_{\max}(x)$ при дозе имплантации $5 \cdot 10^{11}$ Fe⁺/см² равна

$$N_{\max}(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \approx \frac{5 \cdot 10^{11} \text{ ион/см}^2}{2.5 \cdot 5.9 \cdot 10^{-7} \text{ см}} \approx 3.4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}.$$

Отсюда расстояние между внедрёнными ионами, около которых образуются разупорядоченные области, может быть оценено как

$$R = \sqrt[3]{\frac{1}{N_{\max}}} = \sqrt[3]{\frac{1}{3.4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}}} \approx 14 \text{ нм}.$$

Учитывая, что размер разупорядоченной области обычно составляет 5–10 нм, дефекты, образовавшиеся в результате облучения малой дозой, не перекрываются и

отстоят друг от друга на расстоянии 4–9 нм. Такова ситуация в максимуме концентрации дефектов. На самом деле, расстояние между разупорядоченными областями может достигать и больших величин.

Таким образом, при облучении низкоэнергетическими ионами средней массы с дозой $5 \cdot 10^{11}$ ион/см² формируются отдельно расположенные заглублённые аморфные области. При увеличении дозы облучения плотность аморфных областей достигает такой величины, что они перекрываются между собой, образуя сплошной слой на глубине около 6 нм от поверхности (рис. 6). Этот слой лишён сверхпроводящих свойств и не может служить в качестве центра пиннинга. Образование аморфного несверхпроводящего слоя отражается в уменьшении объёмной намагниченности образцов после облучения с большой дозой. Для примера на рис. 5 приведены результаты измерений намагниченности, выполненных с помощью SQUID-магнетометра. Они демонстрируют явное уменьшение магнитного момента единицы площади плёнки после облучения ионами Co⁺ с дозой $3 \cdot 10^{12}$ ион/см².

Как было показано выше, измерения микроволнового поглощения выявляют положительный эффект низкоэнергетического облучения на сверхпроводящие свойства плёнок, который выражается в расширении области бездиссипативного протекания тока. В то же время, в измерениях намагниченности на постоянном токе этот эффект не проявляет себя. Можно предположить, что при высоких температурах (вблизи T_C) время жизни вихрей на образованных в результате облучения дефектах слишком мало для того, чтобы гистерезис проявлялся в измерениях, выполненных на длинных временах. Поэтому пиннинг вихрей может быть зарегистрирован только в измерениях МВП, способных обнаружить короткоживущие состояния (от 10^{-9} до 1 с). Сдвиг линии необратимости в сторону низких магнитных полей и температур, выявленный по измерениям намагниченности при помощи датчиков Холла, скорее всего, не связан с ослаблением пиннинга, а лишь отражает зависимость положения

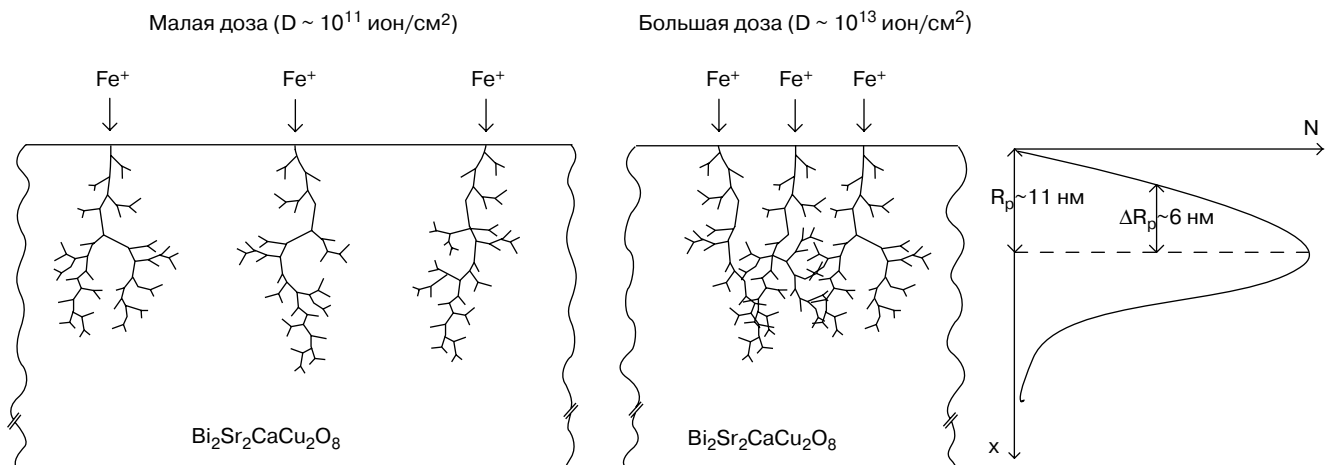


Рис. 6. Схематическое изображение радиационных дефектов в образцах, облучённых разной дозой, и их распределение по глубине залегания.

ЛН от эффективной толщины плёнки, уменьшающейся по мере увеличения дозы облучения. Как известно [18], с уменьшением толщины плёнки сверхпроводника d до величины менее 500 нм ЛН смещается вниз по полю и температуре. Именно эту тенденцию и отражает ЛН, полученная с помощью измерений намагниченности.

Для оценки плотности критического тока и влияния на него облучения мы использовали связь j_c с полем полного проникновения H^* . Его значение мы определяли по зависимости сдвига сигнала ЭПР парамагнитного зонда (ДФПГ), помещённого в центр плоской поверхности образца, от величины поля замораживания H_{cool} (рис. 4). Сдвиг сигнала становится независимым от величины развёртки магнитного поля, когда она становится равной H^* [13]. В свою очередь H^* связано с плотностью критического тока j_c простым соотношением, выведенным для длинной тонкой пластины в работе [14]:

$$H^* \approx j_c \frac{2d}{\pi} \ln\left(\frac{2w}{d}\right).$$

Зная поле полного проникновения, можно однозначно определить плотность критического тока, так как кроме j_c в эту формулу входят только размеры плёнки: толщина d и ширина w . Следует отметить, что поле полного проникновения, как и плотность критического тока, зависит от температуры. Поэтому сравнение плотности критической температуры производилось при фиксированной температуре – 25 К.

Из данных, приведённых в таблице 3, видно, что после облучения образцов с дозой $5 \cdot 10^{11}$ Fe⁺/см², плотность критического тока возросла более чем вдвое. Приrost плотности тока существенно снижается при больших дозах облучения. Выявленная тенденция подтверждает предложенную выше модель образования, накопления и перекрытия радиационных дефектов по мере увеличения дозы облучения. Можно определить критическую дозу облучения D_c , ниже которой плотность критического тока растёт с увеличением дозы, а ЛН сдвигается в высокие поля и температуры. При $D > D_c$ изменения j_c и ЛН имеют противоположное направление. Для исследованной нами серии плёнок критическая доза – около 10^{12} ион/см². Отметим, что критическая температура облучённых образцов практически не меняется в исследованном диапазоне доз.

Таблица 3. Оценки плотности критического тока для исследуемых образцов по полю полного проникновения. Температура измерений 25 К.

Образец	H^* (Э)	j_c (А/см ²)
B2 ($D = 0$)	13	$1.5 \cdot 10^5$
B4 ($D = 5 \cdot 10^{11}$ Fe ⁺ /см ²)	30	$3.5 \cdot 10^5$
B1 ($D = 3 \cdot 10^{12}$ Co ⁺ /см ²)	24	$2.8 \cdot 10^5$
B3 ($D = 3 \cdot 10^{13}$ Fe ⁺ /см ²)	22	$2.7 \cdot 10^5$

Выводы

Таким образом, на данном этапе исследований было выявлено, что низкоэнергетическое ионное облучение с малой дозой ($D < 10^{12}$ ион/см²) может улучшить параметры тонкоплёночных сверхпроводников, такие как абсолютное значение плотности критического тока и размер области протекания тока без рассеяния. Это связано с образованием радиационных дефектов в виде отдельно стоящих аморфных областей, размером около 10 нм, которые могут служить эффективными центрами пиннинга. Увеличение дозы облучения вызывает обратный эффект, то есть ухудшение свойств, что обусловлено перекрыванием аморфных областей и образованием сплошного несверхпроводящего слоя.

Литература

1. Mikhailov B.P., Tazetdinova N.F., Leitus G.M., et al.: J. Low Temp. Phys. **105**, 1553–1557 (1996)
2. Einfeld J., Lahl P., Kutzner R., Wordenweber R., Kastner G.: Physica C **351**, no. 2, 103–117 (2001)
3. Crisan A., Pross A., Cole D., Bending S.J., Wordenweber R., Lahl P., Brandt E.H.: Phys. Rev. B **71**, no. 14, 144504 (2005)
4. Jaccard Y., Martin J.I., Cyrille M.-C., Velez M., Vicent J.L., Schuller I.K.: Phys. Rev. B **58**, no. 13, 8232–8235 (1998)
5. Lombardo L.W., Mitzi D.B., Kapitulnik A., Leone A.: Phys. Rev. B **46**, no. 9, 5615–5620 (1992)
6. Velter-Stefanescu M., Totovana A., Sandu V.: J. Supercond. **11**, no. 3, 327–330 (1998)
7. Nishizaki T., Naito T., Okayasu S., Iwase A., Kobayashi N.: Phys. Rev. B **61**, no. 5, 3649–3654 (2000)
8. Civalé L.: Supercond. Sci. Technol. **10**, no. 7A, A11–A28 (1997)
9. Kazumata Y., Kumakura H., Togano K.: Phys. Rev. B **54**, no. 22, 16206–16210 (1996)
10. Gregory J.K., James M.S., Bending S.J., van der Beek C.J., Konczykowski M.: Phys. Rev. B **64**, no. 13, 134517 (2001)
11. Шапошникова Т.С. (неиздан.)
12. Malozemoff A.P., Worthington T.K., Yeshurun Y., Holtzberg F., Kes P.H.: Phys. Rev. B **38**, 7203–7206 (1988)
13. Khasanov R., Talanov Yu., Vashakidze Y., Teitel'baum G.B.: Physica C **242**, 333–341 (1995)
14. Brandt E.H.: Phys. Rev. B **54**, no. 6, 4246–4264 (1996)
15. Talanov Yu., Adrian H., Basset M., Jakob G., Wirth G.: Physica C **402**, 114–118 (2004)
16. Риссел Х., Руге И.: Ионная имплантация (Гусева М.И., ред.). М.: Наука 1983. 360 с.
17. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Тёмкин М.М.: Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей. Минск: Изд-во БГУ 1980. 349 с.
18. Neminsky A., Dumas J., Thrane B., Schlenker C., Karl H., Stritzker B.: Phys. Rev. B **50**, 3307–3311 (1994)

Ферромагнитное упорядочение примесей железа в кондо-полупроводнике SmB_6

Т. С. Альтшулер, Ю. В. Горюнов

Лаборатория физики перспективных материалов

Проведены исследования ЭПР в кондо-полупроводнике SmB_6 , легированном 1 ат.% Fe. Ферромагнитное упорядочение ионов железа, наблюдаемое при относительно высокой температуре 100 К, объясняется их косвенным обменом через поляризацию матрицы SmB_6 , усиленную благодаря ионам с флуктуирующей валентностью.

Гексаборид самария является классическим кондо-диэлектриком, т.е. полупроводником с узкой энергетической щелью. Он интенсивно изучался разными методами в течение двух десятилетий, но многие вопросы в физике флуктуирующей валентности остались нерешёнными.

Данная работа посвящена исследованию методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) монокристалла SmB_6 , легированного ионами железа концентрации $n = 1$ ат.%. Кристаллическая структура SmB_6 – простая кубическая решётка, подобная CsCl. Монокристалл выращен методом раствор-расплав и представляет собой пластину $1.5 \times 1.5 \times 0.3$ мм³. Измерения были выполнены на частоте 10^{10} Гц при $T = 1.6\text{--}300$ К.

Во всём диапазоне температур наблюдался спектр ЭПР, состоящий из нескольких линий. Он принадлежит ионам железа, так как в чистом, нелегированном SmB_6 сигналов в этой области полей не наблюдалось. Значение g -факторов линий ЭПР при $T = 300$ К и при углах $\alpha = \Theta = 0^\circ$ (где α – угол вращения магнитного поля вокруг оси четвёртого порядка монокристалла в плоскости образца, Θ – угол вращения магнитного поля вокруг оси четвёртого порядка монокристалла в плоскости, перпендикулярной плоскости образца), равны $g_1 = 2.22 \pm 0.04$, $g_2 = 3.00$, $g_3 = 1.76$. Наиболее интенсивной является центральная линия с g_1 ; она соответствует, по-видимому, неионизированному атому железа Fe^0 . По своей электронной структуре Fe^0 является аналогом Ni^{2+} ($3d^8 3F$), который даёт в кубическом поле MgO одну изотропную линию с g -фактором, близким к наблюдаемому в $\text{Sm}_{0.99}\text{Fe}_{0.01}\text{B}_6$ ($g_{\text{Ni}} = 2.227$ [2]). Неионизированные атомы железа наблюдались методом ЭПР, в основном, в полупроводниках: впервые в кремнии в 1955 году [3], позднее в некоторых других работах (см., например, [4]). Две другие линии расположены на равных расстояниях от центральной и зависят от угла вращения образца в магнитном поле: при $\alpha = 90^\circ$ линии меняются местами. По-видимому, часть неионизированных атомов железа находится в локальных полях аксиальной симметрии, образованных из исходного поля кубической симметрии.

Наиболее интересным результатом работы является температурная зависимость положений и ширины линий ЭПР. При понижении температуры до 100 К положение

линий не менялось, однако ниже этой температуры наблюдается резкий сдвиг линий при $\Theta = 0$ в область малых полей (см. рис. 1), а при $\Theta = 90^\circ$ – в область больших полей. Такое поведение является доказательством того, что происходит ферромагнитное упорядочение примесного железа. Ниже точки Кюри (около 100 К) образуется спонтанное намагничивание M_0 , которое смещает резонансное поле.

Для ферромагнетика мы должны учесть различие между внутренними и внешним магнитными полями, которое определяется факторами размагничивания. Фактор размагничивания равен нулю для магнитного поля, лежащего в плоскости пластины, и 4π для магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости пластины. Частота ферромагнитного резонанса в параллельной геометрии равна

$$\omega = g\mu_B[H_0(H_0 + 4\pi M_0(T))]^{1/2}, \quad (1)$$

и положение резонанса определяется формулой

$$H_R(T) = \sqrt{H_{R0}^2 + 4\pi^2 M_0^2(T)} - 2\pi M_0(T), \quad (2)$$

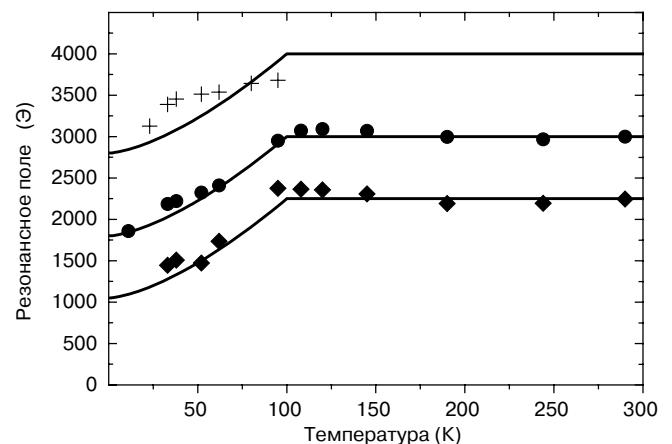


Рис. 1. Температурная зависимость положений ЭПР линий (центральной и боковых) для неионизированных атомов Fe^0 при углах $\alpha = \Theta = 0^\circ$. + и ◆, анизотропные центры железа; ●, изотропные центры; сплошные линии – результат теоретических расчётов, проведённых по формуле (2).

где H_{R0} – резонансное поле при высокой температуре, а спонтанное намагничение $M_0(T)$ аппроксимировалось для достижения согласия с экспериментом функцией

$$M_0(T) = M_{00} \left[1 - (T/T_C)^{3/2} \right], \quad (3)$$

где T_C – температура Кюри, M_{00} – спонтанное намагничение при абсолютном нуле $T_C = 0$ К. Такая температурная зависимость соответствует возбуждению магнонов ([5], с. 22). Хотя эта формула несправедлива для хорошо упорядоченного ферромагнетика при температурах, близких к точке Кюри, мы воспользовались ею для грубого описания положения резонансных линий при $T < T_C$ (причины, по которым такое описание экспериментальных результатов приводит к хорошему согласию с экспериментом, будут обсуждаться ниже). На рис. 2 представлена температурная зависимость спонтанного намагничения, рассчитанная по формуле (3). В качестве $2\pi M_{00}$ мы взяли значение 1200 Гс, определённое из температурной зависимости положений резонансных линий ниже 100 К. Результаты расчётов по формуле (2) показаны на рис. 1 сплошными линиями. Видно, что согласие с экспериментом весьма удовлетворительное.

Исследование температурной зависимости ширины линии показало следующее. При комнатной температуре уверенно ширину экспериментальной линии можно определить только у центральной линии. Она равна 300 Гс и почти не меняется от температуры, однако около 100 К наблюдается резкий максимум (рис. 3). Ширина линии резонанса определяется, по-видимому, диполь-дипольным взаимодействием, поэтому она не зависит от температуры. Однако вблизи точки Кюри (~ 100 К) существенный вклад в ширину линии дают флуктуации намагничения M . Так как M смещает положение резонанса, то его флуктуации приводят к уширению резонансной линии. Средний квадрат флуктуаций намагничения равен

$$M^2 = T_C \chi / V \propto |T_C - T|^{-1}, \quad (4)$$

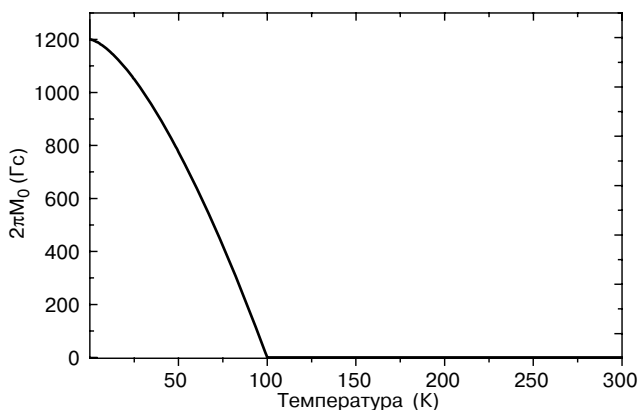


Рис. 2. Температурная зависимость спонтанной намагниченности ионов железа, рассчитанная в соответствии с формулой (3).

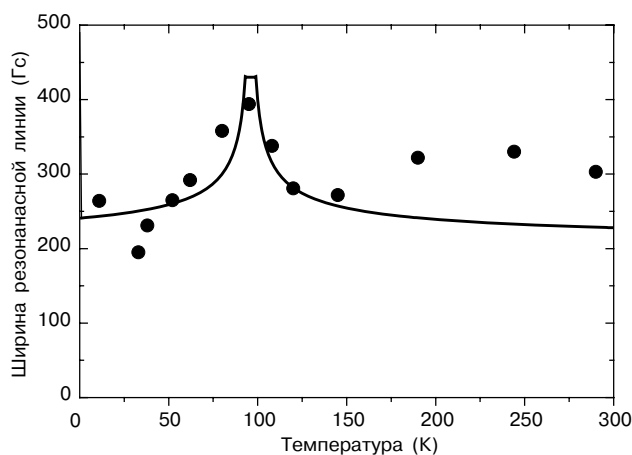


Рис. 3. Температурная зависимость ширины линий ЭПР неионизированных ионов железа. Точки – эксперимент, сплошная линия рассчитана, согласно теории Ландау, по формуле (4).

где χ – восприимчивость, V – обменный потенциал, т.е. флуктуация M обратно пропорциональна квадратному корню из отклонения температуры от точки Кюри ([6], §146, с. 528). В теории масштабной инвариантности ([6], с. 542), вместо -1 показатель степени равен γ , причём $\gamma = 1.4$ [5]. Мы смоделировали температурный ход ширины линии на рис. 3 на основе теории Ландау, не претендуя на точное количественное описание результатов, причём для точки Кюри принято значение 100 К.

При температуре около 100 К происходит ферромагнитное упорядочение системы ионов Fe^0 . Так как нет оснований считать, что ионы железа занимают регулярные положения в кристаллической решётке гексаборида самария, то мы имеем дело с ферромагнетизмом неупорядоченной системы [7] аналогичным, в основных чертах, ферромагнетизму сплавов PdFe или AuFe. Как известно, ферромагнитный переход в таких системах происходит за счёт косвенного обменного взаимодействия ионов железа вида $V = V_0(R/r)\exp(-r/R)$, причём точка Кюри определяется условиями появления “большого кластера” взаимодействующих ионов по теории протекания (см. [7]). Заметим, что в сплавах типа PdFe при концентрации магнитных ионов порядка 1 ат.% наблюдается температура Кюри порядка нескольких десятков Кельвинов (40 К для PdFe и 60 К для PdCo). Хотя в вырожденных полупроводниках типа HgTe-MnTe и наблюдается ферромагнитное упорядочение за счёт обмена магнитных ионов с помощью взаимодействия Рудермана-Киттеля-Касуя-Иосиды, но вряд ли можно ожидать такого механизма в кондо-полупроводнике с узкой щелью, в котором концентрация электронов проводимости экспоненциально убывает с температурой, как раз в той температурной области, в которой наблюдается ферромагнитное упорядочение.

Гамильтониан обменного взаимодействия иона железа со спином $\vec{S}_0$ с флуктуирующими ионами окружения равен

$$\hat{H} = - \sum_i J_0 (\vec{S}_0 \vec{S}_i) \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_i), \quad (5)$$

J_0 – обменный интеграл, $\vec{S}_i$ – спин иона матрицы, а взаимодействие предполагается контактным. Вследствие взаимодействия (5) спин примесного иона поляризует ионы матрицы и наводит магнитный момент, зависящий от расстояния до примеси.

Усредняя спин иона матрицы по объёму и пользуясь тем, что обменный интеграл быстро (экспоненциально) спадает с расстоянием от выделенного иона, напишем приближённо потенциал взаимодействия иона железа с окружением

$$\hat{H} \approx -J\chi \exp(-r/R) \vec{S}_0. \quad (6)$$

В кондо-полупроводнике при температуре ниже энергии щели магнитная восприимчивость определяется большим ван-флековским вкладом, отражающим поляризацию флуктуирующих ионов. Энергия косвенного взаимодействия растёт с возрастанием восприимчивости матрицы и, по-видимому, неслучайно, что ферромагнитное упорядочение примесей происходит в области максимума магнитной восприимчивости.

Теперь рассмотрим температурную зависимость спонтанного намагничивания, следующую из теории неупорядоченных ферромагнетиков. Согласно И. Я. Коренблиту и Е. Ф. Шендеру [7], она описывается функцией, которая существенно зависит от параметра $\nu_R = (4/3)\pi n R^3$ (n – концентрация ионов примеси, R – характерный радиус косвенного взаимодействия ионов железа). Для значения $\nu_R = 5 \cdot 10^{-3}$ на рис. 8 из [7] построена кривая, которая довольно близко аппроксимируется нашей формулой (3) (см. рис. 4). Именно этот результат оправдывает применённую нами процедуру нахождения положений резонансов при температурах ниже точки Кюри. Заметим, что более корректно было бы найти зависимость $M(T)$ из положений резонансов и отсюда определить параметр ν_R и, следовательно, радиус R . Однако при большой ширине резонансных линий и вводимой этим неопределённостью,

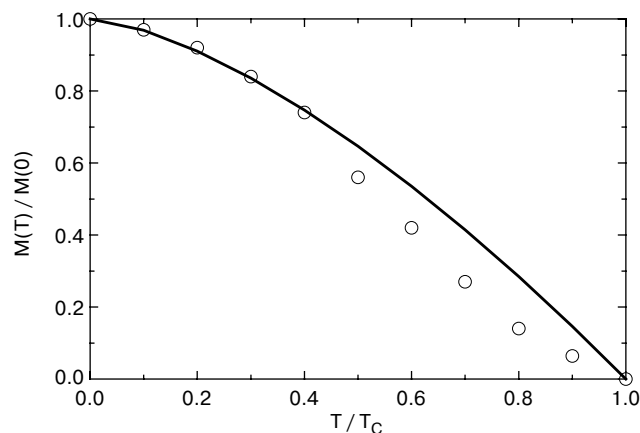


Рис. 4. Температурные зависимости спонтанной намагниченности, рассчитанные по формуле (3) (сплошная кривая), рассчитанные в работе И. Я. Коренблита и Е. Ф. Шендера [6] по теории неупорядоченных ферромагнетиков (точки).

сти, такая процедура оценки ν_R и R не будет предпочтительной. Наши оценки показывают, что при $\nu_R = 5 \cdot 10^{-3}$ для концентрации 1 ат.% характеристический радиус равен $R \sim 2-3$ Å. Он соответствует радиусам в сплавах Pd(Fe, Co, Mn), где $R \sim 3-5$ Å [7]. Однако, если попытаться оценить константу взаимодействия U_0 из значения температуры Кюри

$$T_C = U_C R / r_0 \exp[(-0.87)/(Rn^{1/3})], \quad (7)$$

где $U_C \approx U_0 S^2$, $r_0 = 0.87/n^{1/3}$, S – спин взаимодействующих ионов, то получается необыкновенно высокое значение $U_0 \approx 3 \cdot 10^5$ К по сравнению с $\sim 10^3$ К для PdFe. Мы полагаем, что оно обязано высокой магнитной восприимчивости кондо-полупроводника, отражающей высокую плотность состояний в узкой f-зоне ионов самария. Таким образом, матрица, состоящая из валентно-флуктуирующих ионов, усиливает косвенный обмен ионов примеси и ведёт к высокому значению точки Кюри.

Таким образом, в настоящей работе обнаружено ферромагнитное упорядочение ионов железа, введенных в качестве примеси в кондо-полупроводник SmB₆, при относительно высокой температуре 100 К и концентрации примесных ионов всего около 1 ат%. Этот результат можно объяснить влиянием матрицы гексаборида самария, состоящей из ионов с флуктуирующей валентностью. Ферромагнитное упорядочение ионов железа происходит за счёт их косвенного взаимодействия, передаваемого поляризацией электронных оболочек ионов матрицы, окружающих ионы железа, причём состояние флуктуирующей валентности благоприятствует такой поляризации вследствие ослабления жёсткости поляризуемых оболочек.

В связи с развитием спинтроники в настоящее время наблюдается значительный интерес к магнитным полупроводникам с высокой температурой Кюри [8]. Мы полагаем, что кондо-полупроводники имеют определённое будущее в качестве таких материалов.

Авторы благодарят г.н.с. М. С. Бреслера (ФТИ им. А. И. Иоффе РАН, Санкт-Петербург) за помощь в работе.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№ 06-02-16319).

Литература

1. Fisk Z., Sarrao J.L., Cooper S.L., Nyhus P., Boebinger G.S., Passner A., Canfield P.C.: *Physica B* **223-224**, 409 (1996)
2. Абрагам А., Блيني Б.: Электронный парамагнитный резонанс ионов переходных металлов, т. 1. М.: Мир 1973. 504 с.
3. Ludwig G.W., Woodbury H.H., Carlson R.O.: *Phys. Rev. Lett.* **1**, 295 (1958)
4. Ludwig G.W., Woodbury H.H.: *Solid State Phys.* (Seitz F., Turnbull D., eds.), vol. 13, p. 223. New York: Academic Press 1962.
5. Паташинский А., Покровский В.: Теория флуктуаций фазовых переходов, с. 22. М.: Наука 1982.
6. Ландау Л., Лифшиц Е.: Статистическая физика, т. 1, с. 542. М.: Наука 1995.
7. Коренбит И.Я., Шендер Е.Ф.: *УФН* **126**, 233 (1978)
8. Dietl T.: *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 377 (2002)

Квантовая память в режиме оптического субизлучения. Оптимальная форма импульсов

А. А. Калачёв, В. В. Самарцев

Лаборатория нелинейной оптики

Показано, что эффективность квантовой памяти на основе оптического субизлучения стремится к единице в пределе большой оптической толщины резонансной среды и при условии использования оптимальной формы записываемых однофотонных волновых пакетов, представляющей собой обращённую во времени импульсную характеристику резонансной системы атомов.

Введение

Использование фотонов в качестве носителей квантовой информации предполагает создание эффективных устройств оптической квантовой памяти, способных записывать, хранить и воспроизводить однофотонные квантовые состояния электромагнитного поля. Основные разработки, которые ведутся в этом направлении в настоящее время, связаны с явлениями электромагнитно-индуцированной прозрачности [1–5] и фотонного эха [6–11]. Отметим также успешный эксперимент [12] по записи и считыванию многофотонных квантовых состояний поля. В работе [13] была предложена схема оптической квантовой памяти, позволяющая записывать и воспроизводить квантовые состояния однофотонных волновых пакетов путём когерентного преобразования сверхизлучательных коллективных атомных состояний, возникающих при поглощении фотонов, в субизлучательные и обратно. Позже в работе [14], при более детальном анализе функционирования данной схемы, было отмечено, что для высокой эффективности записи и считывания информации временная форма однофотонного волнового пакета должна быть обращённой во времени импульсной характеристикой оптически плотной среды. При этом временная форма считанного фотона оказывается обращённой по отношению к исходной. Целью данной работы является детальное обоснование данного утверждения и, тем самым, завершение анализа эффективности предлагаемой схемы квантовой памяти.

Когерентный контроль коллективных атомных состояний

Рассмотрим систему из N одинаковых двухуровневых атомов, взаимодействующих с одномодовым электромагнитным полем. Обозначим через $|0_j\rangle$ и $|1_j\rangle$ основное и возбуждённое состояния j -го атома. Здесь, как обычно в одномодовой модели, предполагается, что атомные состояния определены с учётом запаздывания, т.е. содержат фазовый множитель $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)$, где $\mathbf{k}$ – волновой век-

тор моды, а $\mathbf{r}_j$ – радиус-вектор j -го атома. При поглощении фотона атомная система из исходного состояния $|0\rangle = |0_1, \dots, 0_N\rangle$ переходит в симметричное сверхизлучательное состояние Дике

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N |0_1, \dots, 1_i, \dots, 0_N\rangle. \quad (1)$$

Теперь предположим, что атомы имеют ещё один вспомогательный уровень $|2_j\rangle$, относительно которого достаточно пока сказать, что частота перехода ω_{12} не равна ω_{01} . Тогда воздействием короткого когерентного 2π -импульса на частоте ω_{12} можно практически мгновенно изменить фазу коллективного состояния $|1\rangle$ на противоположную. Разобьём весь образец на две равные части, по $N/2$ атомов в каждой, и обозначим их через А и В. При этом сверхизлучательное состояние (1) удобно записать следующим образом:

$$|1_{A+B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1_A, 0_B\rangle + |0_A, 1_B\rangle). \quad (2)$$

При воздействии когерентного 2π -импульса на атомы одной из частей, например В, атомная система перейдёт из состояния (2) в антисимметричное одномодовое субизлучательное состояние

$$|1_{A-B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1_A, 0_B\rangle - |0_A, 1_B\rangle). \quad (3)$$

Скорость испускания фотона из состояния (3) в рассматриваемую моду тождественно равна нулю. Воздействие ещё одного 2π -импульса приведёт к испусканию поглощённого фотона, причём, если считывающий импульс действует на те же атомы, что и записывающий, то фаза испускаемого фотона будет противоположной фазе исходного, а если на другую половину атомов, то останется неизменной.

Рассмотренный метод когерентного контроля коллективного спонтанного излучения протяжённой системы атомов, позволяющий преобразовывать сверхизлучательные многоатомные состояния в субизлучательные и обратно, можно использовать в устройствах оптической квантовой памяти для записи и воспроизведения однофотонных волновых пакетов. В работе [14] были предложены две возможные схемы реализации: активная, использующая когерентные 2π -импульсы, и пассивная, использующая фазовые модуляторы. В любом случае, эффективность квантовой памяти определяется прежде всего тем, насколько велика (близка к единице) вероятность поглощения фотона при его распространении в однородно уширенной резонансной системе атомов и последующего его испускания в том же направлении. Кроме того, успех преобразования коллективных состояний зависит от того, насколько однородным по образцу оказывается возбуждение атомов в момент преобразования. Как будет показано далее в этой работе, эти два условия оказываются взаимосвязанными и выполняются при использовании оптически толстых сред и однофотонных волновых пакетов, имеющих определённую (оптимальную) временную форму.

Основные уравнения

Вновь обратимся к системе $N \gg 1$ одинаковых двухуровневых атомов, имеющих радиус-векторы $\mathbf{r}_j$ ($j = 1, \dots, N$) и частоту перехода ω_0 , которые взаимодействуют теперь уже с многомодовым электромагнитным полем. Гамильтониан системы в представлении взаимодействия и приближении вращающейся волны имеет вид

$$H = \sum_{j,k,s} \hbar g_{k,s}^* b_j^+ a_{k,s} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \exp(i(\omega_0 - \omega)t) + \text{э.с.} \quad (4)$$

Здесь $g_{k,s} = \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar \omega}{2\varepsilon_0 V} \right)^{1/2} (\mathbf{d} \mathbf{e}_{k,s})$ – константа взаимодей-

ствия атомов с полем; $b_j = |0_j\rangle\langle 1_j|$ – атомный оператор перехода; $a_{k,s}$ – оператор уничтожения фотона в моде, характеризующей частотой $\omega = kc$ и единичным вектором поляризации $\mathbf{e}_{k,s}$ ($s = 1, 2$); V – объём квантования поля и $\mathbf{d}$ – дипольный момент атомного перехода. Для простоты предполагаем, что векторы $\mathbf{e}_{k,s}$ и $\mathbf{d}$ являются действительными величинами.

Предположим, что однофотонный волновой пакет распространяется вдоль оси z , область взаимодействия его со средой имеет вид цилиндра длиной L_z и площадью сечения S , число Френеля которого $F = S(L_z \lambda)^{-1} \geq 1$, а волновой фронт его является плоским в пределах области возбуждения. Разделим область возбуждения на n одинаковых слоёв так, чтобы толщина каждого слоя Δz была намного больше резонансной длины волны излучения $\lambda = 2\pi c/\omega_0$, но существенно меньше длины цилиндра L_z . Будем считать, что каждый слой содержит боль-

шое число атомов $\Delta N = N/n$, но имеет малую оптическую толщину $\alpha \Delta z \ll 1$, где α – резонансный показатель поглощения. Тогда медленно меняющиеся амплитуды полевых и атомных переменных можно считать постоянными в пределах одного слоя и рассматривать их как “крупнозернистые” функции координаты z . Наконец, предположим, что время распространения света через среду L_z/c пренебрежимо мало по сравнению с характерными временами изменения поля и среды.

Прежде всего, рассмотрим систему, состоящую из одного слоя атомов и электромагнитного поля. Для слоя, заключённого между плоскостями z и $z + \Delta z$, можно определить следующий коллективный оператор

$$R(z) = \sum_{j=1}^{\Delta N} b_j \exp(-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_j), \quad (5)$$

где вектор $\mathbf{k}_0$ направлен вдоль оси z и имеет длину ω_0/c , а состояние рассматриваемой системы в произвольный момент времени записать в виде

$$|\psi(t, z)\rangle = \sum_{\mathbf{k},s} f_{\mathbf{k},s}(t, z) |0\rangle |1_{\mathbf{k},s}\rangle + c(t, z) |1\rangle |\text{вак}\rangle. \quad (6)$$

Здесь $|0\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0_{\Delta N}\rangle$ – основное состояние атомной системы тонкого слоя, $|\text{вак}\rangle$ – вакуумное состояние электромагнитного поля $|1_{\mathbf{k},s}\rangle = a_{\mathbf{k},s}^+ |\text{вак}\rangle$, $|1\rangle = \Delta N^{-1/2} R^+(z) |0\rangle$ и справедливо условие нормировки

$$\sum_{\mathbf{k},s} |f_{\mathbf{k},s}(t, z)|^2 + |c(t, z)|^2 = 1. \quad (7)$$

Подставляя (4) и (6) в уравнение Шредингера, получаем следующие уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\mathbf{k},s}(t, z)}{\partial t} &= -i g_{\mathbf{k},s} \sqrt{\Delta N} \phi(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \\ &\quad \times c(t, z) \exp(-i(\omega_0 - \omega)t), \\ \frac{\partial c(t, z)}{\partial t} &= -i \sqrt{\Delta N} \sum_{\mathbf{k},s} g_{\mathbf{k},s}^* \phi^*(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \\ &\quad \times f_{\mathbf{k},s}(t, z) \exp(+i(\omega_0 - \omega)t), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\phi(\mathbf{x}) = \Delta N^{-1} \sum_j \exp(+i\mathbf{x}\mathbf{r}_j)$ – дифракционная функция.

Запишем амплитуду исходного однофотонного волнового пакета, взаимодействующего со слоем атомов, как функцию времени, следующим образом:

$$F_{\text{вх}}(t, z) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k},s} f_{\mathbf{k},s}(-\infty, z) \exp(+i(\omega_0 - \omega)t). \quad (9)$$

Для излучения, выходящего из среды, аналогичное выражение получается заменой $F_{\text{вх}}(t, z)$ и $f_{\mathbf{k},s}(-\infty, z)$ вели-

чинами $F(t, z)$ и $f_{k,s}(t, z)$, соответственно. Решение системы уравнений (8) имеет вид

$$c(t, z) = c(-\infty, z) \exp(-t/2T_1) - \sqrt{b(\Delta z)} \int_0^\infty d\tau F_{\text{вх}}(t - \tau, z) \exp(-t/2T_1), \quad (10)$$

$$F(t, z) = F_{\text{вх}}(t, z) + \sqrt{b(\Delta z)} c(t, z), \quad (11)$$

где $b(x) = \frac{\alpha x}{4T_1}$, $\alpha = \frac{3\lambda^2}{2\pi} \frac{\Delta N}{\Delta z S}$ и $\frac{1}{T_1} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4d^2\omega_{01}^3}{3\hbar c^3}$ – ра-

диационное время жизни возбуждённого состояния отдельного атома. Если положить $c(-\infty, z) = 0$ и подставить (10) в (11), то получим известное решение, описывающее сверхизлучательное рассеяние вперед оптически тонким слоем резонансной системы атомов [15, 16]:

$$F(t, z) = F_{\text{вх}}(t, z) - b(\Delta z) \int_0^\infty d\tau F_{\text{вх}}(t - \tau, z) \exp(-t/2T_1). \quad (12)$$

Данное решение можно записать через импульсную или частотную характеристики тонкого слоя атомов

$$F(t, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau F_{\text{вх}}(t, z) \Phi(t - \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_{\text{вх}}(\omega, z) \Phi(\omega) \exp(-i\omega t), \quad (13)$$

где

$$\Phi(t) = \delta(t) - b(\Delta z) \theta(t) \exp(-t/2T_1), \quad (14)$$

и

$$\Phi(\omega) = 1 - b(\Delta z) \frac{i}{\omega + i/2T_1}. \quad (15)$$

Здесь $\theta(t)$ – ступенчатая функция, равная 0 при $t < 0$, 1/2 при $t = 0$ и 1 при $t > 0$.

Если среда является оптически толстой, то её можно рассматривать в виде последовательности оптически тонких слоёв, каждый из которых характеризуется указанными импульсной (14) или частотной (15) характеристиками. Величина $c(t, z)/\sqrt{L_z}$, где $z \in [0, L_z]$, приобретает смысл плотности амплитуды вероятности возбуждённого состояния. Для оптически толстой среды частотная характеристика принимает вид

$$\Phi(\omega) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - b \left(\frac{L_z}{n} \right) \frac{i}{\omega + i/2T_1} \right)^n = \exp \left(-b(L_z) \frac{i}{\omega + i/2T_1} \right). \quad (16)$$

Раскладывая данное выражение в степенной ряд и осуществляя преобразование Фурье, получаем импульсную характеристику атомной системы с произвольной оптической толщиной [16]

$$\Phi(t) = \delta(t) - b(L_z) \frac{J_1(2\sqrt{b(L_z)t})}{\sqrt{b(L_z)t}} \theta(t) \exp(-t/2T_1), \quad (17)$$

где $J_1(x)$ – функция Бесселя первого рода. С учётом зависимости амплитуды вероятности однофотонного пакета от координаты $F(t, z)$ в оптически толстой среде, соотношение (13) принимает следующий вид:

$$F(t, L_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau F_{\text{вх}}(\tau, 0) \Phi(t - \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_{\text{вх}}(\omega, 0) \Phi(\omega) \exp(-i\omega t), \quad (18)$$

где подразумевается, что однофотонный волновой пакет входит в среду в точке $z = 0$ и выходит в точке $z = L_z$.

Оптимальная форма однофотонных волновых пакетов

В теории линейных фильтров хорошо известно, что максимальное отношение полезного выходного сигнала к шуму получается у согласованных (оптимальных) фильтров, импульсная характеристика которых имеет вид обращённого во времени входного сигнала. В рассматриваемом нами случае однородно уширенной резонансной линии требуется получить максимальное отношение вероятности поглощения фотона к вероятности его прохождения через среду без поглощения. Таким образом, учитывая (17), можно предположить, что однофотонные волновые пакеты вида

$$F_{\text{вх}}(-t, 0) = \frac{1}{\sqrt{1 - g(\alpha L_z)}} \times \frac{J_1(2\sqrt{b(L_z)t})}{\sqrt{t}} \theta(t) \exp(-t/2T_1) \quad (19)$$

являются оптимальными с точки зрения взаимодействия с однородно уширенной резонансной системой атомов. Здесь $[1 - g(\alpha L_z)]^{1/2}$ – нормировочный множитель, $g(x) = \exp(-x/2)[I_0(x/2) + I_1(x/2)]$, $I_n(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого рода. Действительно, подставляя (19) в общую формулу (18) и используя при этом выражения (16) или (17) для случая произвольной оптической толщины, получаем

$$F(t, L_z) = \gamma(t, \alpha L_z) - F_{\text{вх}}(-t, 0), \quad (20)$$

где $\gamma(t, \alpha L_z)$ – симметричная колоколообразная функция, которая при больших значениях αL_z хорошо аппроксимируется функцией

$$\gamma(t, \alpha L_z) = \frac{\sqrt{b} g(\alpha L_z)}{\sqrt{1 - g(\alpha L_z)}} \exp\left(-\frac{|t| \sqrt{\alpha L_z}}{2T_1}\right), \quad (21)$$

а в случае $\alpha L_z \ll 1$ равна $\gamma(t, \alpha L_z) = \sqrt{1/T_1} \exp(-|t|/2T_1)$. С увеличением оптической толщины вклад функции $\gamma(t, \alpha L_z)$ в зависимость поля от времени стремится к нулю, поскольку $\int_{-\infty}^{+\infty} \gamma^2(t, \alpha L_z) dt = 2/(\pi \sqrt{\alpha L_z})$ при $\alpha L_z \gg 1$. В пределе $\alpha L_z \rightarrow \infty$ излучение на выходе среды равно нулю, вплоть до момента времени $t = 0$, соответствующего окончанию входного импульса и началу испускания выходного импульса $F_{\text{вх}}(-t, 0)$, обращённого во времени и противоположного по фазе исходному.

Рассмотрим теперь распределение плотности амплитуды возбуждённого атомного состояния $c(t, z)/\sqrt{L_z}$ в момент времени $t = 0$. Исходя из формулы (18), можно показать, что входной импульс (19), действующий на временном интервале $t \in [-\infty, 0]$, проходя через слой толщины z видоизменяется следующим образом. В области $z/L_z < 1 - 4/\sqrt{\alpha L_z}$ он имеет форму (19), только значение параметра L_z заменяется величиной $L_z - z$, т.е. при увеличении z импульс растягивается во времени. Тогда из формулы (10) при начальном условии $c(-\infty, z) = 0$ следует, что в момент времени $t = 0$ плотность амплитуды возбуждённого состояния $c(t, z)/\sqrt{L_z}$ равна $-(1 - \exp(-\alpha(L_z - z)))/\sqrt{L_z(1 - g(\alpha L_z))}$, т.е. в случае большой оптической плотности среды энергия поглощённого импульса практически равномерно распределяется вдоль оси z . В области $z/L_z \geq 1 - 4/\sqrt{\alpha L_z}$, когда ширина основного пика функции $F_{\text{вх}}(t, L_z - z)$ во времени становится сравнимой с шириной функции $\gamma(t, z)$, форма импульса существенно деформируется, поглощение ослабевает и значение величины $c(t, z)/\sqrt{L_z}$ падает до $1/2\sqrt{L_z}$ при $z = L_z$. Таким образом, относительная толщина конечного слоя, в котором наблюдается спад возбуждения среды, обратно пропорциональна $\sqrt{\alpha L_z}$.

Наконец, вычислим эффективность квантовой памяти, которую удобно определить следующим образом:

$$p = \frac{\int_0^{\infty} |F_{\text{вх}}(t)|^2 dt - \int_{-\infty}^0 |F_{\text{вх}}(t)|^2 dt}{\int_{-\infty}^0 |F_{\text{вх}}(t)|^2 dt}. \quad (22)$$

Второй член в знаменателе описывает вероятность, с которой фотон успел выйти из среды до момента времени $t = 0$, соответствующего преобразованию в субизлучательное состояние. Используя формулы (19), (20) и (21), получаем следующую оценку:

$$p = 1 - \frac{4}{\sqrt{\pi \alpha L_z}}.$$

Как и следовало ожидать, эффективность стремится к единице в пределе $\alpha L_z \rightarrow \infty$.

Заключение

Показано, что эффективность квантовой памяти на основе оптического субизлучения, когда запись и считывание фотонов осуществляются с использованием однородно уширенной резонансной линии, может быть сколь угодно близкой к единице, если оптическая плотность среды достаточно высока и записываемые однофотонные волновые пакеты имеют форму обращённой во времени импульсной характеристики среды. Испускаемые при считывании фотоны имеют обращённую временную форму, т.е., наоборот, воспроизводят импульсную характеристику. Таким образом, предлагаемая схема квантовой памяти может оказаться полезной, прежде всего, в тех случаях, когда требуется однократная запись и считывание однофотонных квантовых состояний, например, в квантовых повторителях [17]. Полученный результат имеет также и самостоятельный интерес, поскольку показывает возможность создания пространственно однородной инвертированной двухуровневой среды (или состояний Дике в протяжённой системе атомов) при продольном возбуждении амплитудно- и фазово-модулированным резонансным импульсом.

Литература

1. Fleischhauer M., Yelin S.F., Lukin M.D.: Opt. Commun. **179**, 395–410 (2000)
2. Lukin M.D., Fleischhauer M., Cote R., Duan L.M., Jaksch D., Cirac J.I., Zoller P.: Phys. Rev. Lett. **87**, 037901 (2001)
3. Fleischhauer M., Lukin M.D.: Phys. Rev. A **65**, 022314 (2002)
4. Lukin M.D.: Rev. Mod. Phys. **75**, 457–472 (2003)
5. Chanelière T., Matsukevich D.N., Jenkins S.D., Lan S.-Y., Kennedy T.A.B., Kuzmich A.: Nature (London) **438**, 833 (2005)
6. Кессель А.Р., Моисеев С.А.: Письма в ЖЭТФ **58**, 77–81 (1993)
7. Moiseev S.A., Kröll S.: Phys. Rev. Lett. **87**, 173601 (2001)
8. Ohlsson N., Nilsson M., Kröll S.: Phys. Rev. A **68**, 063812 (2003)
9. Moiseev S.A., Tarasov V.F., Ham B.S.: J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. **5**, S497–S502 (2003)
10. Kraus B., Tittel W., Gisin N., Nilsson M., Kröll S., Cirac J.I.: Phys. Rev. A **73**, 020302(R) (2006)
11. Moiseev S.A., Simon C., Gisin N.: e-print quant-ph/0609173 (2006)
12. Julsgaard B., Sherson J., Cirac J.I., Fiurášek J., Polzik E.S.: Nature (London) **432**, 482–486 (2004)
13. Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Изв. РАН. Сер. физ. **70**, 514–517 (2006)
14. Kalachev A., Kröll S.: Phys. Rev. A **74**, 023814 (2006)
15. Burnham D.C., Chiao R.Y.: Phys. Rev. **188**, 667–675 (1969)
16. Crisp M.D.: Phys. Rev. A **1**, 1604–1611 (1970)
17. Briegel H.-J., Dür W., Cirac J.I., Zoller P.: Phys. Rev. Lett. **81**, 5932–5935 (1998)

Спектральные особенности сигналов фемтосекундного фотонного эха в легированных полимерных плёнках при комнатной температуре

В. С. Лобков, А. В. Леонтьев, К. М. Салихов, В. В. Самарцев, Г. М. Сафиуллин, В. А. Зуйков

Отдел химической физики, лаборатория молекулярной фотохимии; лаборатория нелинейной оптики

Проведены экспериментальные исследования сигналов фемтосекундного фотонного эха в полимерной плёнке, легированной молекулами красителя, при комнатной температуре. Изучена зависимость относительной интенсивности этих эхо-сигналов от значений временных интервалов между возбуждающими фемтосекундными импульсами и установлено, что временной спад эхо-сигналов обязан случайному взаимодействию примесных молекул с квазилокальными низкочастотными колебательными модами аморфной матрицы. Оценен вклад этого взаимодействия в однородную ширину $S_0 \rightarrow S_1$ спектральной линии: $\approx 3 \cdot 10^{12}$ Гц. Обнаружено, что спектры сдвинуты в коротковолновую область по отношению к спектрам возбуждающих импульсов. Это свидетельствует о реализации антистоксового режима возбуждения фемтосекундных эхо-сигналов и возможности когерентного режима лазерного охлаждения твёрдых образцов.

Введение

Подавляющее число оптических эхо-экспериментов в твёрдых телах поставлено при температуре жидкого гелия [1]. Использование низких температур необходимо для того, чтобы устранить влияние необратимых релаксационных процессов с участием фононов, разрушающих фазовую память, лежащую в основе явления фотонного эха. Известно, что фазовая память в резонансной среде существует в условиях, когда длительность возбуждающих лазерных импульсов (Δt) и временные задержки (τ_{12} и τ_{23}) импульсов друг относительно друга короче времени жизни возбуждённого состояния и времени фазовой дефазировки. В наносекундном диапазоне длительностей эти условия выполняются лишь при низких температурах исследуемых твёрдых образцов [1]. Существует ещё один путь выполнения вышеуказанных условий: перейти в фемтосекундный диапазон длительностей $\Delta t = 10^{-13} \div 10^{-14}$ с. Это позволяет в фемтосекундных эхо-экспериментах поднять температуру многих твёрдых образцов до комнатной, поскольку времена фазовой дефазировки (T_d) в них при столь высокой температуре не короче 10^{-13} с. Первый твёрдый фемтосекундный эхо-эксперимент был поставлен авторами работы [2], исследовавшими методом первичного (двухимпульсного) эха время фазовой дефазировки в полупроводнике GaAs при комнатной температуре. Отметим, что фемтосекундное стимулированное (трёхимпульсное) эхо в этом [2] и последующих твёрдых эхо-экспериментах при комнатной температуре не исследовалось. Впервые такое исследование выполнено в КФТИ [3] (см. также [4]) на полимерной плёнке, легированной молекулами красителя. Поскольку именно стимулированное фотонное эхо и его многоимпульсные аналоги широко используются в функционировании оптических эхо-процессоров (см., например, [5, 6]), то

практическая значимость подобных фемтосекундных эхо-экспериментов [3, 4] для создания высокотемпературных эхо-процессоров не вызывает сомнений.

Результаты экспериментальных исследований и их обсуждение

Экспериментальная установка для исследования фемтосекундных эхо-сигналов описана в работе [4]. Там же (см. также [3]) приведены кривые спада сигнала первичного фемтосекундного фотонного эха (ПФФЭ) в легированной полимерной плёнке при температуре жидкого азота и при комнатной температуре. В качестве исследуемого образца использовалась плёнка поливинилбутирила (PVB), легированная молекулами фталоцианина марки HW 1009 в концентрации $10^{-3} \div 10^{-4}$ моль/литр при толщине плёнки 65 мкм. Фемтосекундное лазерное возбуждение импульсами титан-сапфирового лазера длительностью 65 фс осуществлялось на длине волны 793 нм, соответствующей энергетическому переходу $S_0 \rightarrow S_1$. Визуально наличие сигналов ПФФЭ и стимулированного фемтосекундного фотонного эха (СФФЭ) можно проследить, наблюдая “следы” на экране, помещённом за образцом (рис. 1).



Рис. 1. Фотография “следов” на экране (за образцом), обязанных трём возбуждающим импульсам (более сильные “следы” в центре) и сигналам ПФФЭ и СФФЭ.

Поскольку кривые спада ПФФЭ были приведены и обсуждались в работе [4], то здесь ограничимся лишь анализом кривой спада СФФЭ при комнатной температуре при фиксированном значении временного интервала $\tau_{12} = 100$ фс. Она изображена на рис. 2. Видно, что кривая спада СФФЭ состоит из двух участков: быстрого спада (до значения $\tau_{23} = 370$ фс) и продолжительного спада (от 370 до 2000 фс и далее). Такой характер спада СФФЭ обычно присущ долгоживущему стимулированному фотонному эхо [7, 8]. При анализе этого спада использовалась теория, развитая в работе [9]. В работе [3] мы отмечали, что сила электрон-фононного взаимодействия характеризуется фактором Пекара-Хуанга, который для нашего образца равен значению 0.67 (т.е. меньше единицы). Поэтому электрон-фононная связь в исследуемом образце является слабой. Это позволяет упростить анализ кривой спада (по крайней мере, её быстрого участка) и воспользоваться более простыми формулами, следующими из теории [9], и результатами предыдущих исследований [10, 11]. Этот анализ показал, что быстрый спад обязан случайному взаимодействию примесных молекул красителя с квазилокальными низкочастотными колебательными модами [10, 11], энергия которых при комнатной температуре может достигать $50 \div 60 \text{ см}^{-1}$.

Отметим, что в наших фемтосекундных эхо-экспериментах использовалась ещё одна методика, известная как “методика некогерентного фотонного эха” (см., например, [11]). Обычно, для её реализации требуется очень широкополосное импульсное оптическое излучение. В нашей экспериментальной установке это требование выполнялось. Упрощённая оптическая схема экспериментальной установки по реализации этой методики изображена на рис. 3. Обратим внимание на то, что в этой методике используется двухканальное детектирование, как и в методике четырёхволнового смешения. При вре-

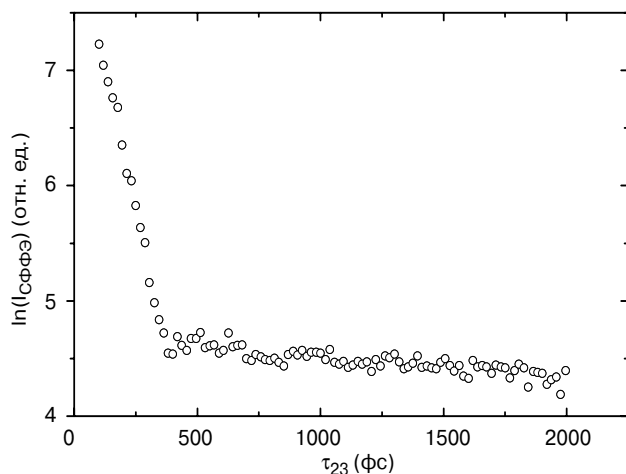


Рис. 2. Кривая временного спада сигнала СФФЭ при фиксированном значении $\tau_{12} = 100$ фс при комнатной температуре исследуемого образца.

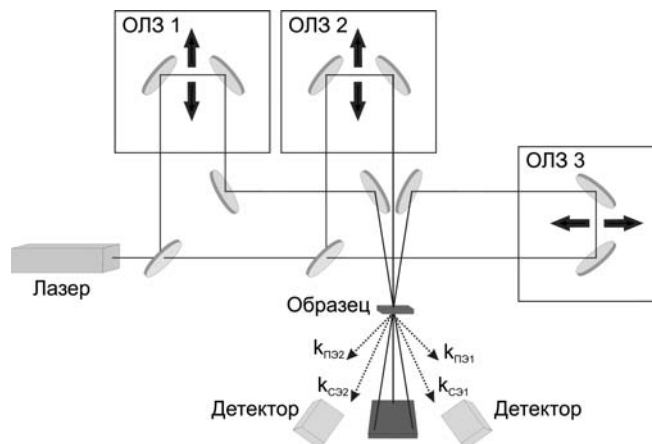


Рис. 3. Упрощённая оптическая схема экспериментальной установки по исследованию фемтосекундного фотонного эха в двухканальном режиме детектирования. Обозначения: ОЛЗ 1, ОЛЗ 2, ОЛЗ 3 – оптические линии задержек; $k_{п31}$, $k_{п32}$, $k_{с31}$, $k_{с32}$ – волновые векторы сигналов первичного эха и стимулированного эха. Возбуждение осуществлялось фемтосекундными импульсами титан-сапфирового лазера с длительностью импульсов 65 фс, их энергией 200 мкДж, частотой повторения 50 Гц, на длине волны 793 нм. Трёхимпульсное возбуждение выполнялось при фиксированном значении $\tau_{12} = 100$ фс.

менном перекрытии возбуждающих импульсов фотодетекторы фиксируют отклик, состоящий из сигнала самодифракции [12] и эхо-сигнала, а при наличии временных задержек, превышающих длительность импульсов (Δt), эти фотодетекторы фиксируют только эхо-сигналы.

Хорошо известно (см., например, [12]), что, если на систему примесных центров в твёрдотельной матрице одновременно и резонансно воздействуют в направлениях волновых векторов k_1 и k_2 два лазерных импульса (рис. 4а), то в этой системе сформируется динамическая “решётка” неравновесной разности населённостей, на которой испытают самодифракцию возбуждающие импульсы. В первом порядке сигналы самодифракции следует ожидать в направлениях $2k_2 - k_1$ и $2k_1 - k_2$. Зависимости интенсивностей сигналов, зафиксированных отдельными фотодетекторами в соответствующих направлениях от времени задержки τ_{12} , приведены на рис. 4б. Для каждого из этих сигналов в направлении $2k_2 - k_1$ и $2k_1 - k_2$ мы в эксперименте получили контуры, максимумы между которыми раздвинуты на величину $T_{\max}$. В серии фемтосекундных экспериментов [13–15] показано, что, зная $T_{\max}$, можно оценить время дефазировки T_d , найти по формуле $\Gamma_{\text{hom}} = 1/(\pi T_d)$ однородную ширину линии Γ_{hom} . В частности, в работе [13] значение T_d приравнялось $T_{\max}/2$, что при $T_{\max} = 75$ фс (как на рис. 4б) давало бы для нашего эксперимента оценку $\Gamma_{\text{hom}} \approx 8 \cdot 10^{12}$ Гц. Однако, на практике ситуация сложнее. В работе [15] показано, что соотношение между временем дефазировки T_d и расстоянием между максимумами $T_{\max}$ зависит от условий эхо-эксперимента (неоднородной ширины, времён задержек). Авторы работы [15] предлагают использовать корректирующий график, приведённый на рис. 5. Из него

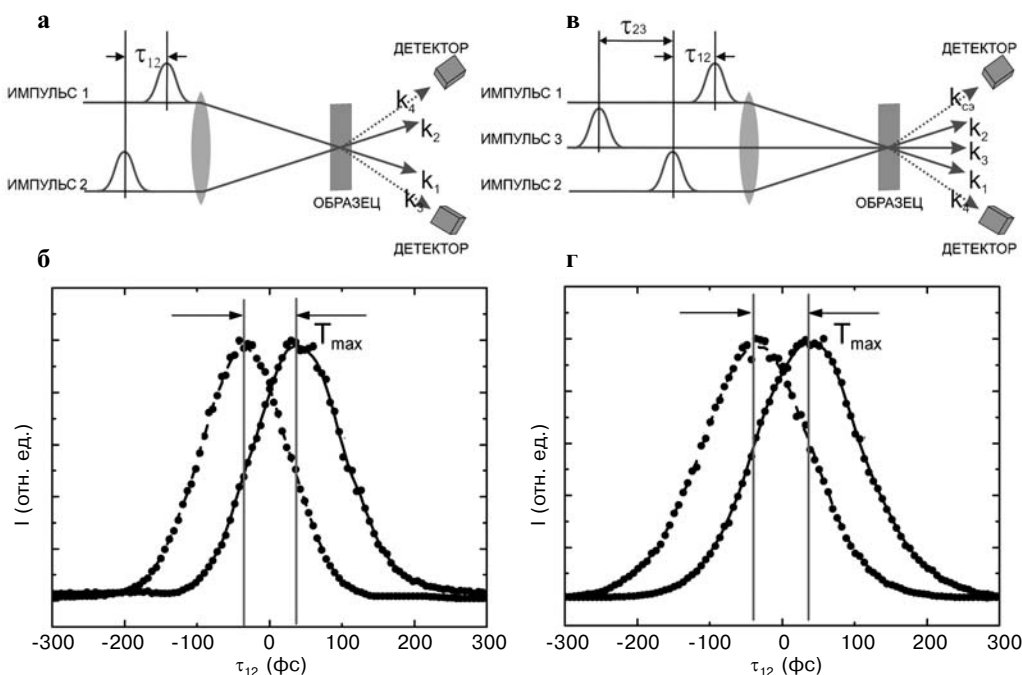


Рис. 4. Двухканальный режим детектирования фемтосекундных сигналов самодифракции и фотонного эха: **а** и **в** упрощённые схемы возбуждения сигналов ПФФЭ и СФФЭ, соответственно; **б** и **г** экспериментальные зависимости относительной интенсивности откликов (самодифракции и эхо-сигналов) от интервала τ_{12} при двухимпульсном и трёхимпульсном возбуждениях, соответственно. $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$ – волновые векторы импульсов; $\mathbf{k}_{ПЭ}$, $\mathbf{k}_{СЭ}$ – волновые векторы ПФФЭ и СФФЭ, соответственно.

следует, что при $T_{\max}/\tau_{12} = 1$ имеет место соотношение: $T_d = 1.8 T_{\max}$. Оно при $T_{\max} = 75$ фс (см. рис. 4б) приводит к значению $\Gamma_{\text{hom}} \approx 3 \cdot 10^{12}$ Гц. Отметим, что измеренное в эксперименте [16] значение Γ_{hom} на аналогичном образце при 240 К примерно равно 10^{12} Гц. Временное разрешение вышеизложенной методики определения Γ_{hom} не ограничено длительностью импульса, а определяется временем когерентности возбуждающих импульсов (т.е. обратной величиной их спектральной ширины или шириной пика автокорреляционной функции импульсов τ_c).

Теперь обсудим результаты аналогичных исследований при трёхимпульсном режиме возбуждения (рис. 4в). В этом случае сигналы самодифракции будут распространяться в направлениях $\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3$ и $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3$. Следуя [3], в данной работе была исследована зависи-

мость относительной интенсивности рассеянных сигналов (самодифракции + СФФЭ) от времени задержки τ_{12} . Она приведена на рис. 4г. Измеряя $T_{\max} = 75$ фс так же, как и в двухимпульсном режиме, находим значение $\Gamma_{\text{hom}} = 3 \cdot 10^{12}$ Гц.

В наших экспериментах исследовались спектры сигналов ПФФЭ и СФФЭ при комнатной температуре. Они приведены на рис. 6. Видно, что спектры фемтосекундных эхо-сигналов (особенно ПФФЭ) характеризуются коротковолновым сдвигом по отношению к спектру возбуждающих импульсов. Это означает, что квант эхо-фотона больше кванта фотона возбуждающего лазера. Анализ показывает, что эта энергетическая разница совпадает с величиной кванта решёточных фононов, участвующих в процессе возбуждения примесных молекул красителя в суперпозиционное состояние на энергетическом переходе из основного состояния в электронно-колебательное. Энергия этих фононов черпается из резервуара квазилокализованных низкочастотных колебательных мод аморфной матрицы. В итоге, существуют перспективы реализации когерентного антистоксового режима лазерного охлаждения подобных легированных плёнок, которые могут быть использованы в качестве хладагентов твёрдотельных оптических рефрижераторов [17].

Возникает ещё один вопрос: почему коротковолновый сдвиг спектра СФФЭ существенно меньше сдвига спектра ПФФЭ? Дело в том, что в процессе формирования сигнала СФФЭ почти не принимает участие фононное крыло линии поглощения, в отличие от сигнала

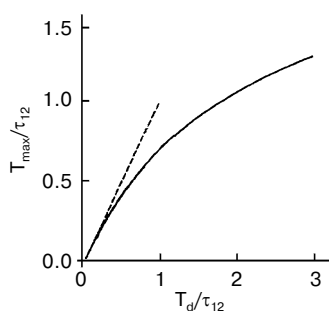


Рис. 5. Корректирующая зависимость времени оптической дефазировки T_d от расстояния между максимумами пиков $T_{\max}$ на рис. 4б и г [15].

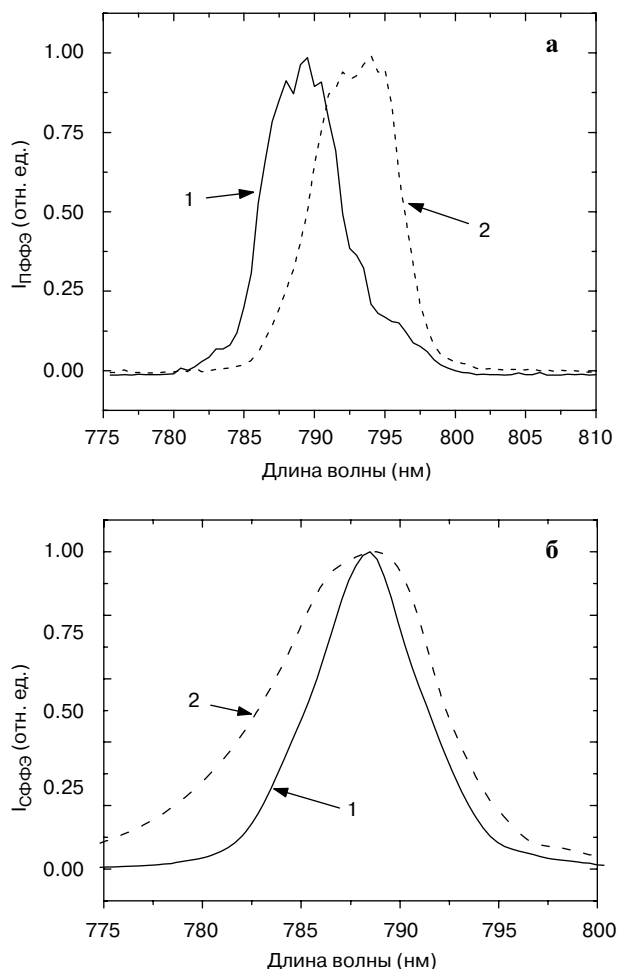


Рис. 6. Спектры фемтосекундных эхо-сигналов (1) на фоне спектра возбуждающих импульсов (2) при комнатной температуре образца: **а** – сигнал ПФФЭ, **б** – сигнал СФФЭ.

ПФФЭ, где эта роль была доминирующей. Таким образом, полученные результаты согласуются с выводами работы А. К. Ребане с коллегами [16].

Напомним, что теоретически стимулированное фотонное эхо вытекает из той части матрицы плотности, которая была диагональной после двухимпульсного воздействия. Согласно Т. Моссбергу [18], этот сигнал можно рассматривать как третий импульс, рассеянный на “решётке” неравновесной населённости, созданной первыми двумя импульсами. А. К. Ребане с коллегами [16] установили, что влияние фононного крыла линии поглощения на сигнал СФФЭ почти отсутствует, в то время как в случае ПФФЭ оно доминирует. Это объясняется тем, что сигнал СФФЭ является сигналом рассеяния третьего импульса на “решётке” неравновесной населённости, в то время как сигнал ПФФЭ обязан “решётке” неравновесной поляризации [12], которая “живёт” существенно меньше.

Заключение

Таким образом, в данной работе исследованы спектральные особенности сигналов ПФФЭ и СФФЭ в полимерной плёнке поливинилбутирала, легированной молекулами фталоцианина, при комнатной температуре. Обнаружены коротковолновые сдвиги спектров фемтосекундных эхо-сигналов по отношению к спектру возбуждающих импульсов, свидетельствующие о возможности реализации фемтосекундного когерентного режима лазерного охлаждения вышеуказанных легированных полимерных плёнок и перспективах их использования в качестве хладагентов твёрдотельных оптических рефрижераторов. С другой стороны, эти легированные плёнки могут быть использованы в качестве носителей информации высокотемпературных оптических эхо-процессоров.

Данные экспериментальные исследования были поддержаны грантом Президента РФ “Ведущие научные школы” (НШ-6213.2006.02), Программами Президиума РАН “Квантовая макрофизика” и ОФН РАН “Оптическая спектроскопия и стандарты частоты”, грантами РФФИ (№ 05-02-16003; № 06-02-16491 и № 04-02-81009-Бел2004). Авторы благодарны проф. А. К. Ребане (США) за исследуемый образец, проф. И. С. Осадько за полезные дискуссии и Т. Г. Митрофановой за помощь.

Литература

1. Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Когерентные явления в оптике. Казань: ИЦ КГУ 2003. 281 с.
2. Becker P.C., Fragnito H.L., Cruz C.H.B., Fork R.L., Cunningham J.E., Henry J.E.: *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1647 (1988)
3. Lobkov V.S., Leontiev A.V., Salikhov K.M., Samartsev V.V., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: *Laser Phys. Lett.* **3**, 485 (2006)
4. Лобков В.С., Салихов К.М., Самарцев В.В., Сафиуллин Г.М., Зуйков В.А., Леонтьев А.В.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2005. Ежегодник, с. 73. Казань: ФизтехПресс 2006.
5. Lin H., Wang T., Wilson G.A., Mossberg T.W.: *Opt. Lett.* **20**, 91 (1995)
6. Merkel K.D., Mohan R.K., Cole Z., Chang T., Olson A., Babbitt W.R.: *J. Luminescence* **107**, 62 (2004)
7. Rebane A.K., Kaarli R.K., Saari P.M.: *Письма ЖЭТФ* **38**, 320 (1983)
8. Осадько И.С.: Селективная спектроскопия одиночных молекул. М.: Физматлит 2000. 319 с.
9. Осадько И.С., Сташек М.В.: *ЖЭТФ* **106**, 535 (1994)
10. Наумов А.В., Вайнер Ю.Г.: *Изв. РАН. Сер. физ.* **70**, 470 (2006)
11. Вайнер Ю.Г.: Динамика неупорядоченных молекулярных твёрдотельных сред: исследования методами фотонного эха и спектроскопии одиночных молекул. Дис. на соискание учён. степ. д-ра физ.-мат. наук. Троицк: ИС РАН 2005. 251 с.
12. Shtyrkov E.I., Nevelskaya N.L., Lobkov V.S., Yarmukhametov N.G.: *Phys. Stat. Solidi (b)* **98**, 473 (1980)
13. Smith R.: Photon echo and single molecule fluorescence measurements of organic dyes in thin polymer films. Ph. D. thesis. USA: Swartmore college 2003. 92 p.
14. Рятсеп М.Л.: Световое эхо и проблемы когерентной оптики. Сб. ст., с. 97. Куйбышев: КуйбГУ 1990.
15. Kobayashi T., Terasaki A., Hattori T., Kurokawa K.: *Appl. Phys. B* **47**, 107 (1988)
16. Rebane A.K., Gallus J., Ollikainen O.: *Laser Physics* **8**, 1126 (2002)
17. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Лазерное охлаждение твёрдых тел. М.: Физматлит 2005. 223 с.
18. Mossberg T.W.: *Opt. Lett.* **7**, 77 (1982)

Плотность энергии “медленного света”

Р. Н. Шахмуратов

Лаборатория нелинейной оптики

Исследуется процесс преобразования энергии сигнального импульса когерентного света, распространяющегося с малой групповой скоростью в среде, в которой с помощью контролирующего поля созданы условия электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП). Мы сравниваем формирование медленного света в условиях ЭИП и самоиндуцированной прозрачности (СИП). В условиях СИП солитоноподобное распространение импульса с малой групповой скоростью происходит благодаря кратковременному хранению значительной части его энергии в возбуждённом состоянии атомов. В условиях ЭИП энергия импульса не хранится в возбуждённом состоянии атомов. Она преобразуется в энергию контролирующего поля и покидает резонансную среду без поглощения с фазовой скоростью света c . Медленный свет формируется благодаря низкочастотной когерентности, которая создаётся сигнальным импульсом и контролирующим полем в процессе двухквантового возбуждения атомов на входе в образец. Эта когерентность распространяется в образце с малой групповой скоростью как “спиновая волна”. На больших расстояниях от входа в образец она управляет процессом преобразования энергии контролирующего поля в энергию сигнального импульса, точно воспроизводя временную форму сигнального импульса на входе в образец.

Введение

В оптически плотной среде, в которой с помощью контролирующего поля создаётся окно электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП), лазерный импульс распространяется очень медленно [1]. Так, например, в работе [2] было получено рекордно малое значение групповой скорости импульса, $V = 17$ м/с, которое на 6 порядков меньше фазовой скорости света c . Уменьшение групповой скорости импульса обязано тому, что в окне прозрачности, помимо существенного уменьшения поглощения, присутствует нормальная дисперсия. Зависимость реальной части показателя преломления от частоты имеет очень крутой наклон, который определяется шириной окна прозрачности Δ_f . Согласно теории распространения волн в материальных средах, групповую скорость импульса в среде с ЭИП легко оценить, зная этот наклон и коэффициент поглощения в отсутствие ЭИП α_0 : $V \approx 2\Delta_f/\alpha_0$. Между тем, такой простой подход не даёт понимания физики процесса медленного распространения света в веществе. Так, например, простые оценки плотности энергии “медленного” импульса могут привести к неожиданному, противоречащему здравому смыслу, результату. Если, следуя работе [3], оценить приведённые в работе [2] экспериментальные параметры импульса, то получится, что на входе в образец он имеет пространственную длину порядка километра, а внутри среды импульс сжимается до субмиллиметровой длины. Между тем, его амплитуда не изменяется. Таким образом, плотность энергии импульса падает примерно в миллион раз. Возникает вопрос – куда делась энергия импульса? Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо рассмотреть

взаимодействие импульса с атомами и проанализировать процесс преобразования его энергии в возбуждение вещества.

Довольно поучительным может оказаться сравнение ЭИП с предыдущими работами по квантовой оптике. Ещё в 70-х годах прошлого века Д. Гришковский наблюдал существенное уменьшение групповой скорости лазерного импульса в оптически плотной двухуровневой среде при условии, что частота импульса отстроена от резонанса в область нормальной дисперсии [4]. Он дал простое объяснение этого эффекта, ссылаясь на кратковременное хранение энергии импульса в комбинированной системе: атомы + поле. Между тем, атом-полевая комбинация под названием “тёмный поляритон” также была введена в работе [5] для объяснения ЭИП. Однако этот поляритон не может дать простого, наглядного объяснения, как импульс становится медленным. Он был предложен, в основном, для объяснения “остановки” света, хранения информации, которую содержит импульс света, в низкочастотной когерентности и восстановления светового импульса.

В настоящей работе мы показываем, что в действительности энергия медленного света не хранится в комбинированной атом-полевой системе. Медленный свет создаётся “спиновой” волной, которая управляет процессом перекачки энергии между контролирующим полем и сигнальным импульсом. Мы сравниваем этот процесс с замедлением лазерного импульса в двухуровневой среде. Кроме того, мы покажем, что, в отличие от тёмного поляритона, другое возбуждение – адиабатон, впервые найденный Дж. Эберли с соавторами [6], содержит всю необходимую информацию о физических процессах, участвующих в ЭИП.

Плотность энергии медленно распространяющегося импульса

Для объяснения медленного распространения лазерного импульса в оптически плотной среде, состоящей из двухуровневых атомов, Д. Гришковский обратился к самоиндуцированной прозрачности (СИП), которая была открыта в конце шестидесятых годов С. Мак-Коллом, Э. Ханом [7] и К. Пателом, Р. Слашером [8]. Он сослался на работу Э. Куртенса [9], в которой было показано, что в условиях СИП уменьшение групповой скорости импульса обязано хранению значительной части его энергии в возбуждённом состоянии атомов. Э. Куртенс использовал очень простые аргументы. Пусть величина U_{em} представляет собой плотность энергии лазерного импульса длительности t_p , а U_a – плотность энергии, аккумулированная в возбуждённых двухуровневых атомах, которые находятся в резонансе с лазерным импульсом. Если определить эти величины как интегральные по сечению лазерного луча, тогда групповую скорость импульса V можно выразить следующим образом. Полная энергия, проинтегрированная вдоль пространственной длины импульса в образце Vt_p , может быть представлена как сумма энергии импульса и энергии, запасённой в среде: $(U_{\text{em}} + U_a)Vt_p$. Перенос энергии вдоль луча осуществляется только посредством электромагнитной компоненты U_{em} и он происходит с фазовой скоростью электромагнитной волны в образце c/n . Здесь n – показатель преломления образца, в котором расположены двухуровневые атомы. Поэтому поток энергии через любое сечение луча, проинтегрированный по времени (длительности импульса), равен $U_{\text{em}}ct_p/n$. По закону сохранения энергии он должен быть равен полной энергии $(U_{\text{em}} + U_a)Vt_p$. Из этого равенства получаем

$$V = \frac{c/n}{1 + U_a/U_{\text{em}}}, \quad (1)$$

откуда следует, что, чем больше энергии запасено в атомах, тем медленнее групповая скорость импульса. Д. Гришковский показал, что такое простое объяснение уменьшения скорости распространения импульса в условиях СИП также применимо для объяснения медленного распространения в двухуровневой среде лазерного импульса, частота которого отстроена от резонанса. Отличие от СИП заключается в том, что в нерезонансном случае площадь импульса не обязательно должна быть кратной $2\pi^*$. Она может быть даже мала, поскольку уменьшение поглощения и групповой скорости в нерезонансном случае происходит благодаря адиабатическому следованию вектора состояния двухуровневого атома за изменяющимся вектором эффективного поля,

что не накладывает никаких ограничений на площадь импульса (см. подробности в работе [4]). В этом отношении ЭИП имеет много общего со случаем, рассмотренным Д. Гришковским. Вектор состояния трёхуровневого атома тоже адиабатически изменяется, почти совпадая с собственным состоянием атома, взаимодействующего с двумя резонансными полями (или так называемым “одетым” состоянием). Между тем, как ниже будет показано, в условиях ЭИП энергия медленно распространяющегося импульса не хранится в возбуждённом состоянии атомов.

Эволюция плотности энергии медленного света для ЭИП

Основная схема ЭИП, предполагает Λ -возбуждение трёхуровневого атома (см. рис. 1) двумя полями: сигнальным полем на переходе g - e и контролирующим полем на переходе e - m , где g , e и m – основное, возбуждённое и метастабильное состояния. Атом изначально находится в основном состоянии g , а метастабильное состояние m не заселено (например, до действия сигнального поля состояние m опустошается контролирующим полем, которое стационарно и имеет большую интенсивность). Сигнальное поле мало и представляет собой импульс. Поглощение сигнального импульса существенно уменьшается благодаря наличию контролирующего поля. Это объясняется пленением населённости в тёмном состоянии [10]

$$|d_0\rangle = \cos\theta_0|g\rangle - \sin\theta_0|m\rangle, \quad (2)$$

которое является собственным состоянием гамильтониана трёхуровневого атома, взаимодействующего с сигнальным и контролирующим полями с постоянными амплитудами E_s и E_c , соответственно. Угол смешивания состояний g и m определяется из соотношения $\tan\theta_0 = \Omega_s/\Omega_c$, где $\hbar\Omega_s = \mu_{ge}E_s/2$ и $\hbar\Omega_c = \mu_{me}E_c/2$ – частоты Раби сигнального и контролирующего полей; μ_{ge} и μ_{me} – матричные элементы дипольных переходов между состояниями g , e и m , е. Если выполняется условие $\Omega_s/\Omega_c \ll 1$, то атом почти не возбуждается. Вообще говоря, объяснение

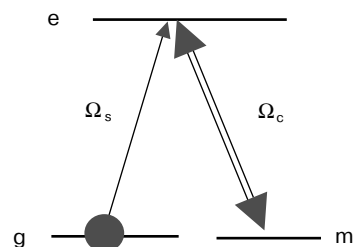


Рис. 1. Λ -схема возбуждения трёхуровневого атома. До действия импульса атом находится в основном состоянии g . Стрелками обозначены возбуждения сигнальным (Ω_s) и контролирующим (Ω_c) полями, находящимися в резонансе с соответствующими переходами.

* Прозрачность в условиях СИП формируется благодаря 2π -циклу возбуждения, в котором атом обратимым образом переходит из основного состояния в возбуждённое и затем возвращается обратно.

[10] справедливо только для стационарных полей. В случае, когда сигнальное поле зависит от времени, имеет место пленение населённости в другом состоянии [11]

$$|d_1\rangle = C_g|g\rangle + C_m|m\rangle + C_e|e\rangle, \quad (3)$$

$$C_g = \cos \theta_0 \cos \theta_1,$$

$$C_m = -\sin \theta_0 \cos \theta_1,$$

$$C_e = i \sin \theta_1, \quad (4)$$

которое принципиально отличается от состояния d_0 тем, что оно содержит примесь возбуждённого состояния. Оно является следующим приближением собственного состояния атома, которое учитывает изменение во времени амплитуды сигнального поля. Параметры состояния d_1 следующим образом зависят от амплитуд полей: $\tan \theta_0 = \Omega_s/\Omega_c$, $\tan \theta_1 = \dot{\theta}_0/\Omega_0$, где $\Omega_0^2 = \Omega_s^2 + \Omega_c^2$. Мы назвали это состояние “тёмным состоянием первого порядка”. До и после действия импульса ($\Omega_s = 0$) оно совпадает с основным состоянием g так как $C_g = 1$, $C_m = C_e = 0$. Если атом находится в состоянии d_1 и адиабатически следует за его изменением, то возбуждение атома (заселение возбуждённого состояния e) становится полностью обратимым. Передний фронт импульса возбуждает атом, отдавая ему часть своей энергии, а задний фронт забирает эту энергию. В идеале такой процесс приводит к отсутствию поглощения и уменьшению групповой скорости импульса. Наиболее впечатляющим является то, что даже быстрый спонтанный распад возбуждённого состояния не влияет на обратимость (т.е. динамический характер) процесса возбуждения и возвращения атома в основное состояние, если этот процесс протекает достаточно медленно. Критерий медленности процесса требует, чтобы спектральная ширина импульса Δ_p была меньше ширины окна прозрачности Δ_T , т.е. длительность импульса должна быть больше $1/\Delta_T$. В случае быстрого спонтанного распада возбуждённого состояния e , время жизни которого T_1 , удовлетворяет условию $T_1 \ll 1/\Omega_s$, ширина окна прозрачности равна $\Delta_T = 4\Omega_c^2 T_1$. В том, что быстрая релаксация не влияет на процесс возбуждения атома в первом порядке теории адиабатического приближения [11], можно убедиться с помощью решения уравнений Шредингера для трёхуровневого атома, возбуждённое состояние которого быстро распадается в некое четвёртое состояние, которое не рассматривается, т.е. для открытой системы. Это решение имеет вид

$$|\Psi(t)\rangle = |d_1\rangle + \frac{\dot{\Omega}_s(t)}{\Omega_c \Delta_T} |m\rangle - i \frac{\ddot{\Omega}_s(t)}{\Omega_c^2 \Delta_T} |e\rangle. \quad (5)$$

При условии $\Delta_p \ll \Delta_T$ вклад двух последних членов в правой части решения пренебрежимо мал. Ниже мы не будем рассматривать эти члены, считая, что решением материальных уравнений для среды является состояние d_1 (см. (3)). Оно содержит информацию об обратимом

характере заселения возбуждённого состояния e . Между тем, оценка вероятности заселённости возбуждённого состояния показывает, что эта заселённость мала и энергии U_a , запасённой в атомах, недостаточно для объяснения величины групповой скорости импульса V , которая получается из закона дисперсии.

Для того, чтобы разобраться в причинах такого несоответствия, мы исследуем систему уравнений для материальной среды и двух электромагнитных полей. В общем случае распространение сигнального импульса и контролирующего поля описываются волновыми уравнениями

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) E_s(z, t) = i \hbar \alpha_s C_g^* C_e / \mu_{eg}, \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) E_c(z, t) = i \hbar \alpha_c C_m^* C_e / \mu_{cm}, \quad (7)$$

где $\alpha_s = 2\pi\omega_s N |\mu_{eg}|^2 / \hbar c$, $\alpha_c = 2\pi\omega_c N |\mu_{cm}|^2 / \hbar c$, ω_s и ω_c – частоты сигнального и контролирующего полей, N – концентрация резонансных атомов в образце. Если частота Раби контролирующего поля на входе в образец $\Omega_c(0, t) = \Omega_{c0}$ удовлетворяет условию $\Omega_c(0, t) \gg \Omega_s(z, t)$, то в качестве решения уравнения Шредингера можно использовать следующее приближение: $C_g^*(t) \approx 1$ и $C_e(t) \approx i \Omega_{s0}(t) / \Omega_{c0}^2$, которое соответствует приближению линейного отклика. В этом случае уравнение (6) приобретает вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Omega_s(z, t) = - \frac{\alpha_s}{2\Omega_{c0}^2} \frac{\partial}{\partial t} \Omega_s(z, t). \quad (8)$$

Оно имеет простое решение $\Omega_s(z, t) = \Omega_s(0, t - z/V)$, где V – групповая скорость сигнального импульса. Она описывается выражением

$$V = \frac{c}{1 + c\alpha_0 / 2\Delta_T}, \quad (9)$$

содержащим ширину окна прозрачности $\Delta_T = 4\Omega_c^2 T_1$ и коэффициент поглощения $\alpha_0 = 4\alpha_s T_1$ на переходе $g \rightarrow e$ в отсутствие контролирующего поля.

Это решение линейно зависит от амплитуды сигнальной волны и не содержит информации о преобразовании энергии волны или её сохранении в атомных степенях свободы. Только квадратичные по амплитудам волн уравнения, т.е. уравнения для интенсивности, могут содержать такую информацию. Например, населённость возбуждённого состояния атома пропорциональна интенсивности возбуждающего поля. Поэтому далее мы рассмотрим уравнения для интенсивности волн. Для контролирующего поля такое рассмотрение соответствует поиску поправок к его амплитуде во втором порядке теории возмущений по амплитуде сигнальной волны. Из решения материальных уравнений (3) следует, что амплитуда

литуды вероятности состояний g , m и e удовлетворяют уравнениям

$$\Omega_s C_g^* C_e + \Omega_c C_m^* C_e = 0, \quad (10)$$

$$\Omega_s C_g^* C_e - \Omega_c C_m^* C_e = \frac{i\Omega_0^2}{2(\Omega_0^2 + \theta_0^2)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\Omega_s^2 - \Omega_c^2}{\Omega_0^2} \right). \quad (11)$$

Для простоты рассмотрим случай $\alpha_s = \alpha_c = \alpha$. Тогда с помощью соотношений (10) и (11) можно получить уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) (\Omega_s^2 + \Omega_c^2) = 0, \quad (12)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) (\Omega_s^2 - \Omega_c^2) = -\frac{\alpha}{2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{(\Omega_s^2 - \Omega_c^2)}{\Omega_0^2}. \quad (13)$$

При условии $\mu_{eg} = \mu_{em}$, уравнение (12) соответствует тому, что либо сумма энергий сигнального и контролирующего полей сохраняется и не зависит от пройденного расстояния: $(E_s^2 + E_c^2)/4\pi = \text{const}$, либо её изменение распространяется с фазовой скоростью c . Уравнение (13) говорит о том, что разность энергии этих полей распространяется с малой групповой скоростью V . В этом можно убедиться, если пренебречь изменением величины Ω_0 в уравнении (13), предполагая, что $\Omega_0 \approx \Omega_{0c}$. Тогда решение уравнений (12) и (13) приобретает вид [12]

$$\Omega_s^2(z, t) = \Omega_s^2(0, t - z/V), \quad (14)$$

$$\Omega_c^2(z, t) = \Omega_{c0}^2 + \Omega_s^2(0, t - z/c) - \Omega_s^2(0, t - z/V). \quad (15)$$

На рис. 2 показана зависимость от времени Ω_s^2 и Ω_c^2 на большом расстоянии от входа в образец (эти величины пропорциональны интенсивностям полей). Пикок на временном профиле интенсивности контролирующего поля соответствует члену $\Omega_p^2(0, t - z/c)$ в решении (15). Он появляется в результате преобразования энергии сигнального импульса в энергию контролирующего поля. Этот пикок распространяется с групповой скоростью c , которая совпадает с фазовой скоростью света при $n = 1$. Таким образом, согласно нашему решению, сигнальный импульс на входе в образец преобразуется в контролирующее поле и затем распространяется без поглощения со скоростью c . Компонента $\Omega_p^2(0, t - z/V)$ в уравнении (14) распространяется медленно с групповой скоростью V и она сопровождается провалом во временном профиле интенсивности контролирующего поля. Этот провал описывается компонентой $-\Omega_p^2(0, t - z/V)$ в решении (15). Амплитуда провала в точности совпадает с амплитудой пика во временном профиле интенсивности сигнального поля. Поэтому сумма интенсивности сигнального и контролирующего полей не изменяется со временем и расстоянием.

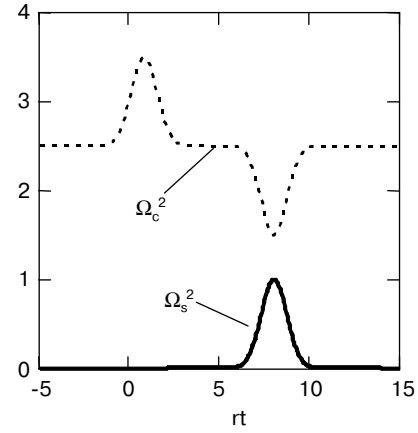


Рис. 2. Эволюция во времени интенсивности сигнального импульса (сплошная линия) и контролирующего поля (пунктирная линия) на выходе из толстого образца. Интенсивность сигнального импульса на входе в образец имеет следующую зависимость от времени $\Omega_s^2(0, t) = \Omega_{s0}^2 \exp(-r^2 t^2)$. На графике ее амплитуда принята равной единице (в безразмерных единицах). Шкала времени приведена в единицах rt . Длина образца взята равной $z = 8V/r$, а групповая скорость $V = c/10$. Величина $r \ll \Delta_1$ произвольна, так как время t и координата z определены в единицах r и $1/r$, соответственно. Интенсивность контролирующего поля смещена на графике вниз на большое положительное число для наглядности.

Обсуждение результатов

На входе в образец, $z = +0$, параметр $\theta_0(0, t) \approx \Omega_p(0, t)/\Omega_0$ имеет такую же временную зависимость, как и импульс сигнального поля. Поскольку справедливы соотношения $C_g \approx 1$ и $C_e = i \sin \theta_1 \approx i \theta_0/\Omega_0$, передний фронт импульса поглощается, так как для него выполняется неравенство $\dot{\theta}_0(0, t) > 0$. До тех пор, пока это неравенство справедливо, энергия сигнального импульса преобразуется в энергию контролирующего поля, создавая пикок во временном профиле его интенсивности. Для того, чтобы понять, как формируется медленное распространение коррелированного образования: пикок + провал, во временном профиле сигнального и контролирующего полей, необходимо рассмотреть эволюцию параметра θ_0 во времени и пространстве. Этот параметр определяет структуру тёмного состояния (2) и, как таковой, он содержит информацию о населённости метастабильного состояния m . С помощью соотношений (10) и (11) можно вывести следующее уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \theta_0 = -\alpha \frac{\dot{\theta}_0}{2(\Omega_0^2 + \theta_0^2)}. \quad (16)$$

Воспользовавшись приближением $\Omega_0^2 + \dot{\theta}_0^2 \approx \Omega_c^2$ получаем, что θ_0 изменяется в образце как $\theta_0(z, t) = \theta_0(0, t - z/V)$. Поскольку амплитуда вероятности заселения метастабильного состояния удовлетворяет соотношению $C_m \approx -\sin \theta_0(z, t) \approx -\theta_0(z, t)$, то сама вероятность заселённости

этого состояния распространяется в образце, воспроизводя пространственно-временную зависимость интенсивности сигнального импульса, которая соответствует движению импульса с малой групповой скоростью V : $|C_m|^2 \approx \Omega_p^2(0, t - z/V)/\Omega_{c0}^2$. После завершения формирования пичка во временном профиле интенсивности контролирующего поля возбуждается так называемая “спиновая волна”, которая задаётся когерентностью состояний g и m , т.е. величиной $C_g^* C_m$. Параметр θ_0 тоже содержит информацию об этой когерентности, так как $C_g^* \approx 1$ и $C_m \approx -\theta_0$. Согласно решению $\theta_0(z, t) = \theta_0(0, t - z/V)$ уравнения (16), эта низкочастотная когерентность распространяется как импульс с групповой скоростью V , откуда и происходит название “спиновая волна”.

Рассмотрим удалённую от входа часть образца z ($z/Vt_p \gg 1$), где $t_p = 1/\Delta_p$ – длительность сигнального импульса. Расположенные в этой области атомы находятся в основном состоянии g , а их состояния m и e не заселены. Поэтому для них θ_0 равна нулю. Когда спиновая волна достигает этой части образца, θ_0 становится отличной от нуля и заселённость состояния m увеличивается, приводя к поглощению связывающего поля. Благодаря этому, состояние e заселяется, что приводит к генерации сигнального импульса. Амплитуда вероятности заселения возбуждённого состояния равна $C_e \approx i\dot{\theta}_0(0, t)/\Omega_0$ (см. (4)). Поэтому, когда $\dot{\theta}_0$ меняет знак (это происходит на максимуме импульса), процесс меняет свое направление: энергия сигнального импульса преобразуется в энергию контролирующего поля.

Коррелированное распространение медленного сигнального поля и провала во временном профиле контро-

лирующего поля впервые было найдено Дж. Эберли с соавторами в работе [6]. Они назвали эту коррелированную пару адиабатомом. Они также нашли точное аналитическое решение волнового уравнения в виде некоторой обратной функции $Z^{-1}(t - z/c)$. Между тем, ее аналитическая реконструкция для любой формы импульса на входе в образец, а также анализ этой функции неочевидны. В общем случае анализ требует численных расчётов. Наше приближённое решение имеет более простой вид и может быть легко проанализировано.

Данная работа выполнена в соавторстве с профессором Дж. Одюрсом (Институт ядра и ядерного излучения Католического университета Лёвена, Бельгия) при частичной поддержке РФФИ (№ 04-02-17082).

Литература

1. Harris S.E.: Physics Today **50**, no. 7, 36–42 (1997)
2. Hau L.V., Harris S.E., Dutton Z., Behroozi C.H.: Nature (London) **397**, no. 6720, 594–598 (1999)
3. Fleischhauer M., Imamoglu A., Marangos J. P.: Rev. Mod. Phys. **77**, 633 (2005)
4. Grischkowsky D.: Phys. Rev. A **7**, 2096 (1973)
5. Fleischhauer M., Lukin M.D.: Phys. Rev. Lett. **84**, 5094 (2000)
6. Grobe R., Hioe F.T., Eberly J.H.: Phys. Rev. Lett. **73**, 3183 (1994)
7. McCall S.L., Hahn E.L.: Bull. Am. Phys. Soc. **10**, 1189 (1965); Phys. Rev. Lett. **18**, 908 (1967)
8. Patel C.K.N., Slusher R.E.: Phys. Rev. Lett. **19**, 1019 (1967)
9. Courtens E.: Phys. Rev. Lett. **21**, 3 (1968)
10. Arimondo E.: Progress in Optics (Wolf E., ed.), vol. 35, pp. 257–354. Amsterdam: Elsevier 1996.
11. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Phys. Rev. A **71**, 013819 (2005)
12. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Phys. Rev. A **74**, 043807 (2006)

Программное обеспечение “среднего” уровня для низкополевого медицинского МР томографа ТМР-0.12-КФТИ

Э. Ф. Биктимиров, С. И. Осокин

Отдел медицинской физики, лаборатория методов медицинской физики

В данной работе представлено программное обеспечение (ПО) “среднего” уровня для низкополевого медицинского МР томографа ТМР-0.12-КФТИ. ПО “среднего” уровня является связующим звеном между прикладным ПО и аппаратурой томографа.

Введение

В последнее время в медицине большое развитие получают методы неинвазивной интроскопии. Особое место занимает магнитно-резонансная (МР) томография. Это связано с отсутствием вредных воздействий на организм человека в ходе обследования. В настоящее время потребность в таких приборах непрерывно растёт. В связи с этим, в КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН было принято решение о создании относительно дешёвых и конкурентоспособных МР томографов для российского рынка. Томографы ТМР-КФТИ предназначены для диагностики различных заболеваний, планирования хирургического вмешательства и лучевой терапии, контроля проводимого лечения и его эффективности. Томографы применяются для диагностики головного мозга, позвоночника, суставов.

Задачу создания томографа можно разделить на две различные, но взаимосвязанные части. Первая часть – это создание аппаратного обеспечения томографа: магнитной системы, блока радиоспектрометра, комплекта радиочастотных (РЧ) катушек, системы охлаждения, источника питания электромагнита, усилителя тока гра-

диентов, источника токов корректирующих катушек (ШИММ) и др. Вторая часть – создание программного обеспечения (ПО) для МР томографа, состоящее из трёх уровней (см. рис. 1):

1. драйверы уровня ядра операционной системы – это драйвер ввода/вывода шины радиоспектрометра и драйвер платы аналого-цифрового преобразователя (АЦП),
2. драйверы пользовательского уровня – интерфейсные драйверы устройств радиоспектрометра (“средний” уровень),
3. прикладное ПО – управляющая оболочка, модули импульсных последовательностей, тестирующее, диагностическое и сервисное ПО.

В данной работе решена задача создания ПО “среднего” уровня.

Программное обеспечение “среднего” уровня

Управление блоками МР томографа осуществляет специализированный радиоспектрометр, который, в свою

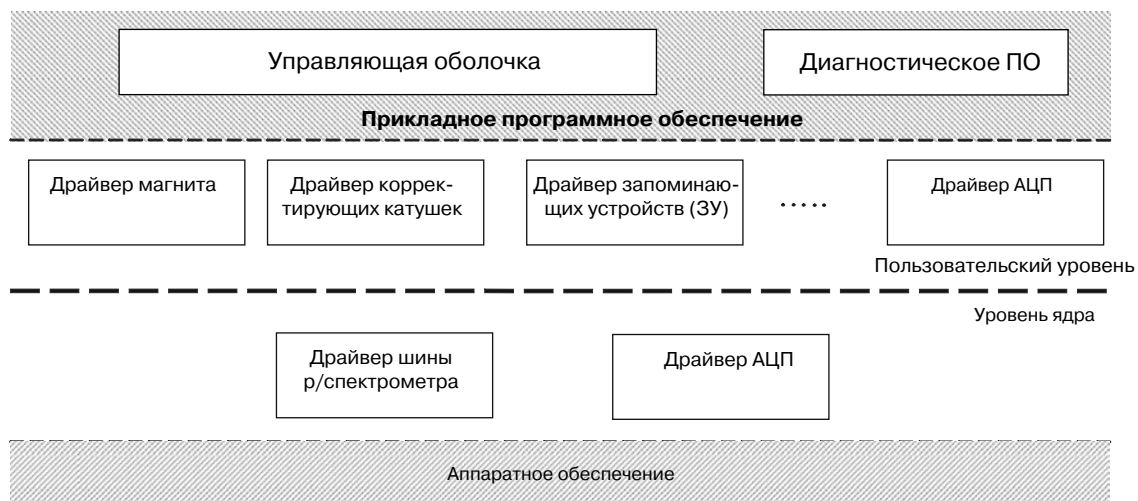


Рис. 1. Архитектура программного обеспечения.

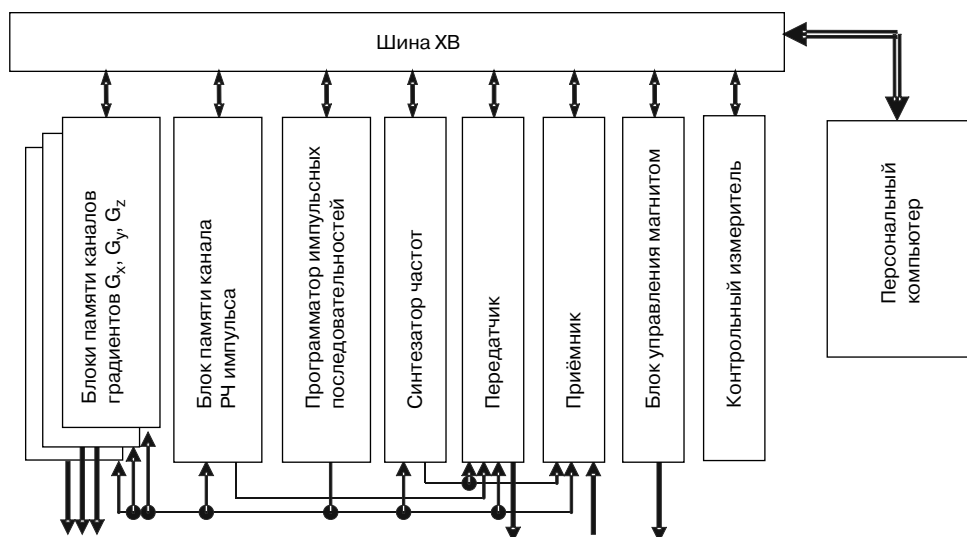


Рис. 2. Блок-схема радиоспектрометра.

очередь, контролируется персональным компьютером через шину XB (eXtended Bus). Блок-схема радиоспектрометра изображена на рис. 2. В своём составе радиоспектрометр имеет: программатор импульсных последовательностей с собственной памятью для хранения импульсных программ, блоки памяти трёх градиентных каналов и РЧ-импульса, блок синтезатора частот, передатчик, приёмник, контрольный измеритель и блок управления магнитной системой.

Рассмотрим процесс управления томографом на примере загрузки памяти градиентного канала (ГК). В память ГК загружается информация об очередности и амплитудах градиентных импульсов. Сама память ГК представляет собой ЗУ с курсорным доступом к ячейкам памяти. Операции чтения и записи данных можно проводить только с ячейкой памяти выбранной курсором. Перемещение курсора осуществляется 3 командами: установка курсора на первую ячейку памяти, переход к следующей ячейке, переход к предыдущей ячейке. Компьютер управляет памятью ГК при помощи 2 регистров в адресном пространстве шины XB: один для передачи данных, другой – для команд. Доступны следующие команды:

- WRITE_DAC – запись данных в цифро-аналоговый преобразователь (ЦАП);
- WRITE_MEM – запись данных в память;
- READ_MEM – чтение данных из памяти;
- RESET_ADR – сброс адресного счётчика;
- NCR_ADR – инкремент адресного счётчика.

Рассмотрим последовательность действий, которые необходимо выполнить для загрузки данных в память ГК. Загрузка осуществляется драйвером градиентного канала. На входе драйвер получает следующие данные: указатель на массив амплитуд градиентных импульсов и размер массива. Далее в регистр команд памяти ГК записывается команда RESET_ADR, устанавливающая курсор на первую ячейку памяти. Далее выполняется последователь-

ность команд, которая повторяется для каждого элемента массива и осуществляет запись значения в текущую ячейку памяти, а также переход к следующей. Псевдокод этой последовательности выглядит следующим образом:

```
xbWrite( DATA_REG, "значение" );
xbWrite( COMMAND_REG, WRITE_MEM );
xbWrite( COMMAND_REG, INCR_ADR );
```

Здесь xbWrite – это команда записи данных (второй аргумент) в регистр шины XB, адрес которого указан первым аргументом; COMMAND_REG и DATA_REG – регистры команд и данных канала памяти ГК, соответственно.

Помимо операции загрузки данных в память ГК, в драйвере так же реализованы следующие операции: чтение массива данных из памяти ГК, чтение массива данных из теневой копии памяти ГК, тестирование памяти ГК, управление ЦАП и др.

В рамках данной работы было написано 6 драйверов: драйвер управления магнитом (nmrtms.dll), драйвер управления корректирующими катушками (nmrtshim.dll), драйвер ЗУ каналов градиентов и радиочастотного импульса (nmrtgrad.dll), драйвер управления приёмником и АЦП (nmrtadc.dll), драйвер управления программатором импульсных последовательностей (nmrtppu.dll) и драйвер контроллера прерываний (nmrtc.dll).

Заключение

Данная работа представляет собой часть большого проекта по созданию ПО для томографов типа TMP-0.12-КФТИ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ-ОФИ (№ 06-02.08072), Программы Президиума РАН “Поддержка инноваций” и гранта АН РТ (№ 06-6.6-73).

Компьютерное моделирование испытаний кабин грузовых автомобилей

С. К. Черников, А. М. Файзуллин, А. Н. Ахмадышин

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

Описана методика математического моделирования испытаний кабин грузовых автомобилей на соответствие требованиям пассивной безопасности. Описан алгоритм определения контактных сил. Приведены некоторые результаты расчёта характеристик кабины автомобиля.

Введение

Проектирование грузового автомобиля, удовлетворяющего всем современным требованиям пассивной безопасности – сложная инженерная задача, решить которую за разумное время и с приемлемыми затратами без компьютерного моделирования практически невозможно. Главные усилия здесь направляются на совершенствование пассивной безопасности кабины грузовика, т.е. на достижение таких её характеристик жёсткости и энергоёмкости, которые позволят при аварии сохранить для находящихся в кабине людей достаточное жизненное пространство.

Требования к пассивной безопасности

Методики испытаний на пассивную безопасность призваны моделировать сценарии реальных аварийных ситуаций. По отношению к грузовикам основными из них являются лобовой удар, удар по кабине сзади сорвавшимся при торможении грузом и опрокидывание автомобиля. Требования к пассивной безопасности кабин

грузовых автомобилей сформулированы в документе [1]. Существует также ряд документов [2, 3], описывающих требования к грузовикам в отношении безопасности других участников дорожного движения. Виды испытаний кабины грузового автомобиля, описанные в [1], наглядно иллюстрирует рис. 1.

При испытаниях на удар спереди (испытание А) по кабине, установленной на транспортном средстве, производится удар маятником с заданными размерами и кинетической энергией (3000 кгс·м для транспортных средств с максимальной разрешённой массой до 7 т и 4500 кгс·м для транспортных средств с максимальной разрешённой массой свыше 7 т). При испытаниях прочности крыши и задней стенки (испытания В и С) нагружение заданной силой производится статически при помощи жёсткой плиты, призванной равномерно распределять нагрузку на конструкцию. К крыше кабины при этом прикладывается нагрузка, соответствующая максимальной разрешённой нагрузке на переднюю ось транспортного средства, максимальное значение которой равно 10 т. При испытаниях задней стенки она нагружается силой, величина которой определяется из расчёта 200 кгс на тонну разрешённой полезной нагрузки. После проведения каждого вида испытаний в кабине должно оставаться достаточно места для размещения специального манекена, антропометрические параметры которого оговорены в [1] и соответствуют 50-му перцентилю взрослого мужчины.

Методика численного анализа

При численном моделировании испытаний кабины на соответствие требованиям пассивной безопасности её конструкция рассматривается как совокупность большого количества конечных элементов различных типов: объёмных, оболочечных, балочных, а также так называемых дискретных элементов – пружин, демпферов и масс. Моделирование процесса ударного деформирования предполагает обязательный учёт явлений физической и геометрической нелинейности, что сильно сказывается на выборе математических формулировок, описывающих

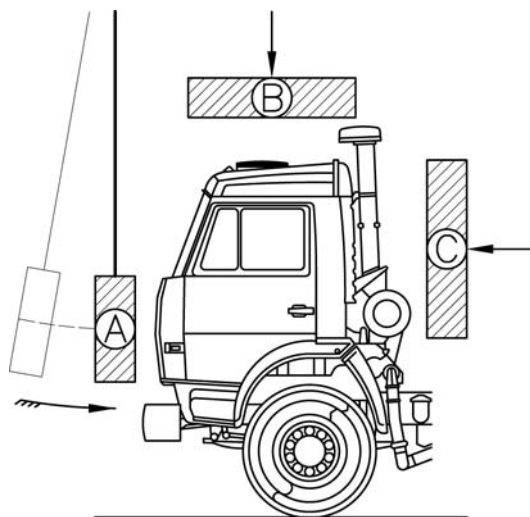


Рис. 1. Виды испытаний кабины по ГОСТ Р 41.29-99.

деформации и напряжения в элементах. Немаловажным требованием к используемым конечным элементам является также их высокая вычислительная эффективность. Последняя достигается, во-первых, простотой используемых функций формы и, во-вторых, снижением порядка интегрирования. Упрощённое описание поверхностей элементов снижает также сложность решения задач, связанных с контактным взаимодействием.

Уравнения движения системы конечных элементов, моделирующих поведение кабины при испытаниях, представляют собой дифференциальные уравнения второго порядка

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = \mathbf{R}(t),$$

которые решаются по схеме прямого явного интегрирования по времени методом центральных разностей [4]. В этих уравнениях $\mathbf{M}$, $\mathbf{C}$ и $\mathbf{K}$ – соответственно матрицы масс, демпфирования и жесткости; $\mathbf{u}$, $\dot{\mathbf{u}}$ и $\ddot{\mathbf{u}}$ – векторы узловых перемещений, скоростей и ускорений ансамбля конечных элементов; $\mathbf{R}$ – вектор внешней узловой нагрузки.

При моделировании испытаний кабин вектор внешней узловой нагрузки $\mathbf{R}(t)$ представляет собой вектор сил контактного взаимодействия. При формировании этого вектора приходится на каждом временном шаге решать две задачи: поиск области контакта и вычисление контактных сил.

Для вычисления контактных сил в коммерческих пакетах используется, как правило, метод штрафов из-за относительной простоты его реализации и малого влияния на величину необходимого шага интегрирования по времени. Из всего многообразия существующих на сегодня алгоритмов поиска контакта [5] стоит выделить два – алгоритм иерархических территорий (НІТА – Hierarchical Territory Algorithm) [6] и алгоритм единой поверхности [7], как получивших практическую реализацию в реальных программных продуктах.

Идея алгоритма НІТА состоит в построении иерархии контактных объектов, т.е. в последовательном разбиении контактной системы на контактные поверхности, тех – на контактные сегменты, сегментов – на контактные кромок, и, наконец, кромок – на контактные узлы. Для каждого объекта иерархии строится так называемая территория – некая пространственная фигура (в простейшем случае – описывающий объект прямоугольный параллелепипед), при пересечении с которой территории другого контактного объекта возникает потенциальная вероятность контакта. Поиск контактных зон ведётся начиная с высших уровней иерархии, что позволяет эффективно отсекал ненужные проверки на низших уровнях, если пересечения территорий у объектов высшего уровня не обнаружено.

На алгоритме единой поверхности остановимся несколько более подробно. Вначале формируется собственно единая контактная поверхность (ЕКП), в пределе

включающая в себя все внешние грани (сегменты) элементов модели, которые не обязательно должны быть связаны между собой, т.е. совокупность поверхностей разных тел рассматривается как единое целое (откуда и название метода). Следующим этапом является поиск контактных пар типа “узел-сегмент”, путём определения для каждого узла ЕКП (slave-узла) ближайшего к нему сегмента этой же поверхности (master-сегмента). Поиск разбивается на два этапа – глобальный, когда для каждого узла ЕКП ищется ближайший к нему узел этой же ЕКП (master-узел), и локальный, когда среди всех сегментов, сходящихся в найденном master-узле, определяется нужный. К локальному поиску относится также определение непосредственно контактной точки, т.е. такой точки master-сегмента, в которой нормаль к контактной поверхности проходит через slave-узел рассматриваемой контактной пары.

Глобальный поиск в описанной выше постановке является одним из вариантов так называемой задачи поиска ближайшего соседа, для которой разработано несколько методов эффективного решения [8]. Применительно к контактным задачам лучше всего зарекомендовал себя метод блочной сортировки, называемый также методом ячеек. Идея его такова: занимаемая ЕКП область пространства, вписывается в прямоугольный параллелепипед с рёбрами, параллельными осям глобальной системы координат. Этот параллелепипед разбивается на регулярные ячейки, общее число которых N равно числу узлов модели. Ускорение процедуры поиска достигается за счёт того, что ближайший master-узел ищется только в той ячейке, куда попадает рассматриваемый slave-узел, и 26 смежных с ней ячеек. Теоретически (при равномерном распределении узлов в пространстве) потребный на такой поиск объём вычислений растёт пропорционально N , т.е. линейно. На практике ускорение составляет 100 ... 1000 раз по сравнению с методом полного перебора (попарного сравнения), у которого эта зависимость квадратичная.

Способ определения принадлежности slave-узла n_s конкретному master-сегменту S_i поясняется на рис. 2. Здесь m_s – ближайший к узлу n_s узел, определённый на этапе глобального поиска; $\mathbf{c}_i$ и $\mathbf{c}_{i+1}$ – рёбра проверяемого master-сегмента, исходящие из этого узла. По знаку скалярного произведения вектора $\mathbf{g}$, соединяющего узлы m_s и n_s , и вектора нормали $(\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_{i+1})$ определяется, пересёк ли slave-узел плоскость векторов $\mathbf{c}_i$ и $\mathbf{c}_{i+1}$. При $(\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_{i+1}) \cdot \mathbf{g} \leq 0$ (есть пересечение), вычисляется единичная нормаль $\mathbf{m} = (\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_{i+1}) / |\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_{i+1}|$ и проекция вектора $\mathbf{g}$ на плоскость векторов $\mathbf{c}_i$ и $\mathbf{c}_{i+1}$ $\mathbf{s} = \mathbf{g} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{m}) \cdot \mathbf{m}$. Расположение вектора $\mathbf{s}$ в растворе векторов $\mathbf{c}_i$ и $\mathbf{c}_{i+1}$ говорит о принадлежности узла n_s данному master-сегменту и определяется по выполнению двух условий:

$$\begin{cases} (\mathbf{c}_i \times \mathbf{s}) \cdot (\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_{i+1}) \geq 0, \\ (\mathbf{c}_i \times \mathbf{s}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{c}_{i+1}) \geq 0. \end{cases}$$

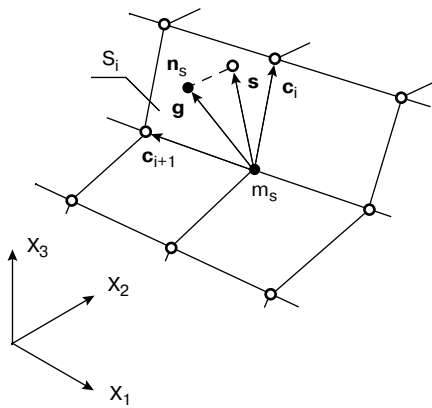


Рис. 2. Поиск контактного сегмента.

Для треугольных контактных сегментов определение контактной точки особых проблем не представляет, сложное дело обстоит с четырёхугольными сегментами, поверхность которых обычно задана при помощи билинейной изопараметрической аппроксимации и в общем случае не плоская. Для них изопараметрические координаты (ξ_c, η_c) точки контакта определяются из условия минимизации функции, $J = 0.5[\mathbf{r}(\xi, \eta) - \mathbf{t}][\mathbf{r}(\xi, \eta) - \mathbf{t}]$ представляющей собой расстояние от slave-узла до произвольной точки master-сегмента (рис. 3). Решение ищется итерационно.

Использование метода единой поверхности тесно связано с применением для вычисления контактных сил метода штрафных функций. Сила, действующая в slave-узле по нормали к поверхности контакта, определяется по формуле $\mathbf{f}_n = -k\rho\mathbf{n}$. Здесь k – контактная жёсткость; $\rho = [\mathbf{t} - \mathbf{r}(\xi_c, \eta_c)]\mathbf{n}$ – величина проникновения slave-узла через master-сегмент; $\mathbf{n}$ – вектор нормали к поверхности контакта.

Контактная жёсткость $k = f_{si}KA^2/V$ зависит от объёмного модуля упругости материала K , параметра штрафа f_{si} , площади master-сегмента A и объёма элемента V , которому принадлежит данный master-сегмент. Для большинства практических задач величина параметра штрафа может быть принята равной 0.1.

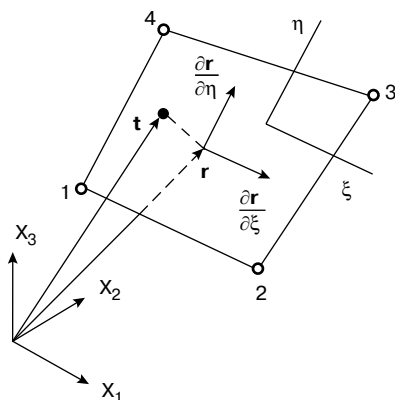


Рис. 3. Поиск контактной точки.

Для определения тангенциальных сил $\mathbf{f}_t$ на поверхностях контакта, как правило, используется классическая кулоновская модель трения, реализуемая в динамических задачах при помощи алгоритма радиального возврата [7]. Так как в общем случае коэффициенты статического μ_s и динамического μ_d трения различны, используется аппроксимация вида:

$$\mu(v) = \mu_d + (\mu_s - \mu_d)\exp(-\lambda|v|).$$

где λ – декремент затухания, $\mathbf{v}$ – относительная скорость скольжения контактных поверхностей.

Суммарная контактная сила, действующая в slave-узле:

$$\mathbf{F} = \mathbf{f}_n + \mathbf{f}_t.$$

Равная по величине и противоположная по направлению сила действует и на master-сегмент. Её разложение по узлам четырёхугольного сегмента:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{1}{4}(1 + \xi_i\xi_c)(1 + \eta_i\eta_c)\mathbf{F}.$$

Здесь $\xi_i = \pm 1$ и $\eta_i = \pm 1$ – изопараметрические координаты узлов сегмента.

Полученные таким образом контактные узловые усилия добавляются в вектор внешних нагрузок $\mathbf{R}(t)$ и система уравнений движения интегрируется обычным образом.

Программные средства и примеры использования

Описанные выше подходы реализованы в нескольких коммерческих программных продуктах. Среди них стоит упомянуть MSC.Dytran фирмы MSC.Software, PAM-CRASH фирмы ESI-Group, ABAQUS/Explicit фирмы ABAQUS Inc. и LS-DYNA фирмы Livermore Software

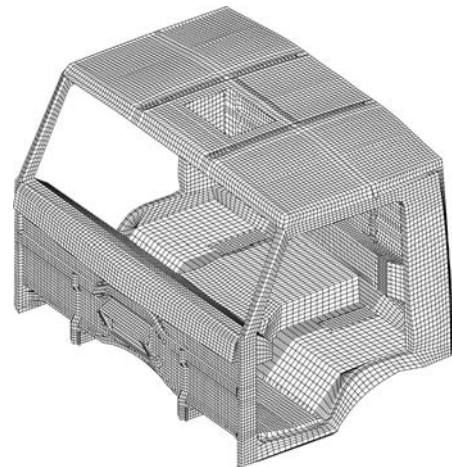


Рис. 4. Конечно-элементная модель кабины грузового автомобиля.

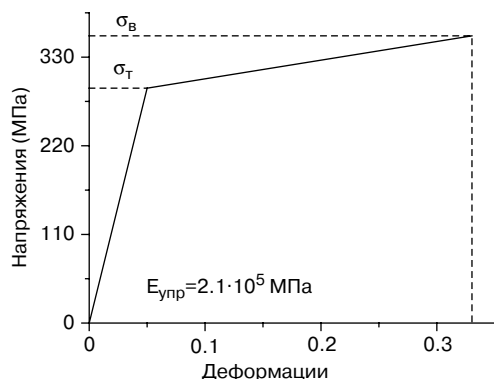


Рис. 5. Аппроксимация диаграммы деформирования материала.

Technology Corp. Примеры использования последнего приведены в работе [9].

В описанной ниже работе по моделированию испытаний кабины грузового автомобиля на удар спереди использовалась версия mpr970/Rev. 5434 этого пакета, предназначенная для работы на параллельных вычислительных системах.

Конечно-элементная модель кабины грузового автомобиля, показанная на рис. 4, насчитывала 27865 узлов и 27803 элемента оболочки Belytschko-Tsay [10]. Для удобства моделирования и анализа результатов кабина рассматривалась как совокупность 9 подконструкций, двери при этом не моделировались. Закрепление кабины осуществлялось по узлам её навески на раме и по задним амортизационным опорам. Маятнику весом 1500 кг сообщалась начальная скорость в момент удара 7.671 м/с, что соответствует величине энергии 4500 кгс · м, указанной в [1]. Ударная плита маятника моделировалась 208 объёмными элементами, стержни навески маятника – 4 балочными элементами. Материал маятника – линейно упругий. Для задания свойств материала кабины (листовая сталь толщиной 0.9–2.0 мм) использовалась билинейная аппроксимация диаграммы деформирования (рис. 5). Опыт показывает, что для большинства металлических конструкционных материалов (сталь, алюминиевые

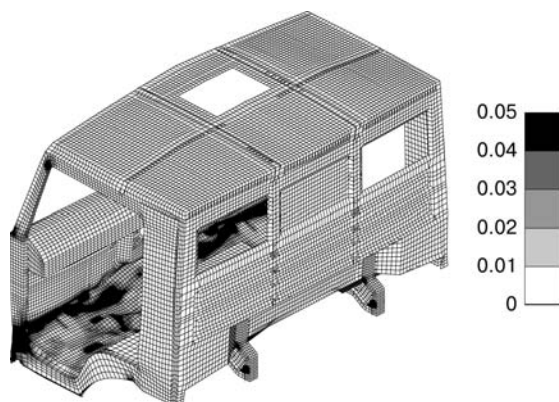


Рис. 6. Зоны остаточных пластических деформаций.

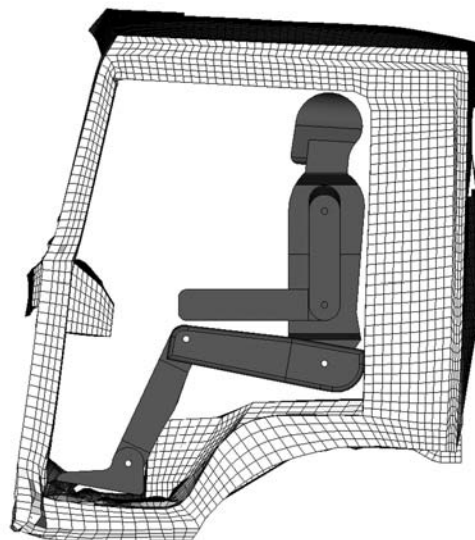


Рис. 7. Оценка остаточного пространства при помощи антропоморфного манекена.

сплавы и т.п.) такого вида аппроксимации вполне достаточно.

Динамика процесса деформирования рассчитывалась на временном отрезке 140 мс. Из них 60 мс занял прямой ход маятника. Общее число шагов по времени – 650000, т.е. средняя величина шага составила 0.215 мкс. О вычислительной сложности задачи можно судить также по общему времени решения – 14 ч 50 мин на машине с процессором AMD Dual Core Opteron 270 (2.0 ГГц) и 2 Гб оперативной памяти.

Компьютерное моделирование даёт инженерам-проектировщикам возможности по углублённому анализу поведения конструкций. Например, по показанным на рис. 6 зонам пластических деформаций можно судить о наиболее нагруженных элементах конструкции и рационально выбирать способ её усиления в случае недостаточной прочности. В частности, в данном случае наиболее нагружены нижняя передняя часть кабины и передние стойки, на концах которых в процессе деформирования чётко прослеживается образование пластических шарниров. При этом нижняя часть стоек в процессе деформирования сместилась на 170 мм, верхняя – на 84 мм. Впрочем, как видно на рис. 7, остаточные деформации кабины не превышают допустимых пределов, позволяя поместить манекен в заданном положении.

Литература

- ГОСТ Р 41.29-99 (Правила ЕЭК ООН № 29): Единообразные предписания, касающиеся официального утверждения транспортных средств в отношении защиты лиц, находящихся в кабине грузового транспортного средства. Введ. 2000-07-01. М.: Изд-во стандартов 2000. III, 20 с.
- ГОСТ Р 41.58-2001: Единообразные предписания, касающиеся официального утверждения: I. задних защитных устройств; II. транспортных средств в отношении установки задних защитных устройств.

- роЙств официально утверждённого типа; III. транспортных средств в отношении их задней защиты. Введ. 2002-01-01. М.: Изд-во стандартов 2002. III, 20 с.
3. ГОСТ Р 41.73-99: Единообразные предписания, касающиеся официального утверждения грузовых транспортных средств, прицепов и полуприцепов в отношении их боковой защиты. Введ. 2000-07-01. М.: Изд-во стандартов 2000. III, 12 с.
 4. Черников С.К., Файзуллин А.М.: Использование пакета LS-DYNA при анализе пассивной безопасности автомобилей на вычислительных кластерах. Сб. тр. Шестой конф. пользователей программного обеспечения CAD-FEM GmbH (Москва, 20–21 апреля 2006), с. 161–171. М.: Полигон-пресс 2006.
 5. Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н.: Обзор контактных алгоритмов. Изв. РАН. Механика твёрдого тела № 1, 45–87 (2005)
 6. Zhong Z.-H., Nilsson L.: Computers and Structures **33**, no. 1, 197–209 (1989)
 7. Benson D.J., Hallquist J.O.: Computer Meth. Appl. Mech. Engng. **78**, no. 2, 141–163 (1990)
 8. Fjällström P.-O., Petersson J., Nilsson L., Zhong Z.-H.: Int. J. Comput. Geometry & Applications **8**, no. 1, 67–83 (1998)
 9. Черников С.К., Ашихмин А.Н., Файзуллин А.М.: Материалы V Междун. науч.-практ. семинара “Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах” (Нижний Новгород, 22–25 ноября 2005), с. 232–239. Нижний Новгород: ННГУ 2005.
 10. Hallquist J.O.: LS-DYNA Theoretical Manual. Livermore Software Technology Corporation 1998.

Программно-аппаратный комплекс для моделирования механических процессов в сложных технических объектах

С. К. Черников, А. Н. Ашихмин, Т. П. Баскевич

Лаборатория моделирования физико-механических процессов и систем

В работе приведены некоторые результаты разработки программно-аппаратного комплекса для моделирования механических процессов на базе вычислительных кластеров, построенных на процессорах AMD Athlon и Opteron и недорогой коммуникационной аппаратуре Gigabit Ethernet.

Введение

Стремительный рост быстродействия процессоров последних поколений одновременно с повышением производительности и снижением стоимости Ethernet-сетей сделали привлекательным создание высокопроизводительных вычислительных систем с распределённой памятью (кластеров) на базе компонент высокой степени готовности. Эффективность применения таких кластеров может быть достигнута только при использовании на них программ, допускающих распараллеливание вычислений и учитывающих конструктивные особенности кластера. В предлагаемой работе приведены некоторые результаты разработки комплекса программ для моделирования механических процессов методом конечных элементов (МКЭ) и семейства кластеров, построенных на процессорах AMD Athlon/Opteron и недорогой коммуникационной аппаратуре Gigabit Ethernet. Программно реализованный класс задач представляет собой удачный пример MPM-модели вычислений, эффективность работы которой обус-

ловлена естественным распределением данных и сравнительно низкой интенсивностью обменов между узлами кластера.

Аппаратная часть

Для эффективного решения задач механики в рамках небольшого научно-исследовательского института или учебного учреждения было разработано семейство кластеров на базе одно- и двухъядерных процессоров AMD. Все модели семейства представляли собой классический Beowulf-кластер и включали по 8 вычислительных узлов, коммутирующую аппаратуру, переключатель консоли и источник бесперебойного питания, смонтированные в открытой стойке (рис. 1 и 2). Особенности конструктивного исполнения кластеров и их технические характеристики приведены в таблице 1. В кластерах моде-

Таблица 1. Технические характеристики кластеров.

Модель	9A2200	8A64X2	16O246	16O270
Узел	7 одно- и 1 двухпроцессорный	Однопроцессорный	Двухпроцессорный	Двухпроцессорный
Процессор	Athlon XP/MP 2800	Athlon 64X2	Opteron 246	Opteron 270
Количество ядер	9	16	16	32
Сетевой адаптер	Gigabit Ethernet HardLink HA-32G	Gigabit Ethernet Marvell 88E1116	2 Gigabit Ethernet Broadcom BCM-5704	2 Gigabit Ethernet Broadcom BCM-5704
Сетевой коммутатор	Gigabit Ethernet HardLink HS-8G	Gigabit Ethernet HardLink HS-8G	Gigabit Ethernet D-Link DGS-1016D	Gigabit Ethernet D-Link DGS-1016D
Переключатель консоли	Edimax EK-16RO	Edimax EK-16RO	PCT MPC8701	PCT MPC8701
Источник бесперебойного питания	APC Smart-UPS 3000 RMI 5U	APC Smart-UPS 3000 RMI 5U	APC Smart-UPS 5000 RMI 5U	APC Smart-UPS 5000 RMI 5U
Производительность (пиковая) (Гфлопе)	7.5 (9.6)	46 (63)	42 (52)	80* (104)
Производительность сети: скорость передачи (Мбит/с) (латентность, мс)	360 (170)	840 (68)	900 (38)	900 (38)

* Характеристика определена на основании тестирования 2 узлов.



Рис. 1. Внешний вид кластеров 9A2200 и 8A64X2.



Рис. 2. Внешний вид кластеров 16O246 и 16O270.

лей 9A2200 [1] и 8A64X2 передача информации между вычислительными узлами осуществлялась по одному каналу. В моделях 16O246 и 16O270 использовался двух-канальный сетевой адаптер Broadcom BCM-5704, который позволил организовать две шины для передачи информации. Это обеспечило возможность организации сетевых обменов системы управления и прикладных программ по независимым каналам, что повысило отказоустойчивость кластеров.

Кластеры моделей 9A2200 и 8A64X2 работают под управлением ОС Windows, при этом в качестве коммуникационной среды используется библиотека MPICH 1.2.5, свободно распространяемая RWTH (Технический университет г. Аахена, Германия). Управление заданиями осуществляется системой управления кластером, разработанной в Нижегородском государственном университете им. Н. И. Лобачевского. В моделях кластеров 16O246 и 16O270 на узлах установлена свободно распространяемая операционная система Linux RedHat и коммуникационная библиотека MPICH 1.2.7. Управление кластером осуществляется с помощью пакета программ Torque в сочетании с системой планирования исполнения заданий Maui. Эти пакеты программ обладают открытым исходным кодом и свободно распространяются согласно условиям Универсальной общественной лицензии GNU (GNU GPL).

Производительность вычислительного узла всех кластеров определялась при решении системы линейных алгебраических уравнений заданной размерности с помощью модуля High Performance Linpack (HPL) пакета NPCC. При компиляции и сборке модуля HPL производилась оптимизация вычислений под тип процессора с дополнительным набором команд (SSE, SSE2) и использования библиотеки подпрограмм базовых операций линейной алгебры (BLAS), предназначенных для векторных арифметических операций. Коммуникации между процессами обеспечивались при помощи пакета программ MPICH. Производительность коммуникационной среды, основными параметрами которой являются латентность (время пересылки сообщения нулевой длины) и максимальная пропускная способность (максимальное количество информации, которое можно переслать за единицу времени), измерялась утилитой NetPipe. Интегральная производительность кластера определялась путём решения системы уравнений утилитой Linpack пакета NPCC.

Уравнения движения механической системы

При численном моделировании механических процессов МКЭ исследуемая структура рассматривается как сово-

купность большого количества конечных элементов. В сложных объектах (рис. 3) число элементов может достигать одного миллиона и более. Трудоёмкость задач обуславливается ещё и тем, что для явных схем интегрирования уравнений движения, допускающих эффективное распараллеливание, процессы приходится исследовать с достаточно мелким шагом по времени. При наличии необходимых параллельных программ это делает естественным решение таких задач на вычислительных кластерах. В предлагаемой работе речь идёт о разработке комплекса программ, реализующих решение задач динамики сложных структур МКЭ на параллельных вычислительных системах с распределённой памятью.

В разрабатываемом комплексе программ предусматривается моделирование структур конечными элементами балки [1], мембраны, пластины и оболочки. Кроме этого, возможно использование элементов вязкого трения и осевых пружин. Элементы мембраны, пластины и оболочки могут быть как треугольными, так и четырёхугольными. Элементы треугольной мембраны с постоянными напряжениями и треугольной пластины Зенкевича строились в соответствии с [1]. В качестве треугольных элементов оболочки использовалась композиция изгибаемой треугольной пластины Зенкевича и треугольного элемента мембраны. Для использования этой композиции в компланарных системах в элемент вводилась жесткость фиктивного поворота в плоскости согласно [3]. Четырёхугольный элемент мембраны был реализован в соответствии с работой [4]. Элемент произвольной четырёхугольной пластины реализован в соответствии с [5]. Четырёхугольный элемент плоской оболочки построен как композиция четырёхугольной мембраны и плас-

тины по методике, изложенной в работе [6]. Для всех типов элементов разработаны методики выбора шага интегрирования, обеспечивающего устойчивость вычислительного процесса.

Уравнение движения системы конечных элементов имеет вид:

$$M\ddot{u}(t) + C\dot{u}(t) + Ku(t) = R(t), \quad (1)$$

где M , C и K соответственно матрицы масс, демпфирования и жесткости; R – вектор внешней узловой нагрузки; u , $\dot{u}$ и $\ddot{u}$ – векторы узловых перемещений, скоростей и ускорений ансамбля конечных элементов. Для адекватного моделирования сложных объектов требуется использовать достаточно мелкую сетку, что ведёт к очень большому размеру участвующих в решении матриц. Отсюда очевидны высокие требования к эффективности используемой схемы интегрирования. В настоящее время с этой стороны наилучшим образом зарекомендовала себя схема прямого явного интегрирования по времени методом центральных разностей. Для дискретного момента времени t система (1) разрешается относительно ускорений:

$$\ddot{u}_t = M^{-1} [R_t - C\dot{u}_t - Ku_t].$$

Скорости и перемещения для следующего шага определяются по формулам:

$$\dot{u}_{t+\Delta t/2} = \dot{u}_{t-\Delta t/2} + \ddot{u}_t \Delta t,$$

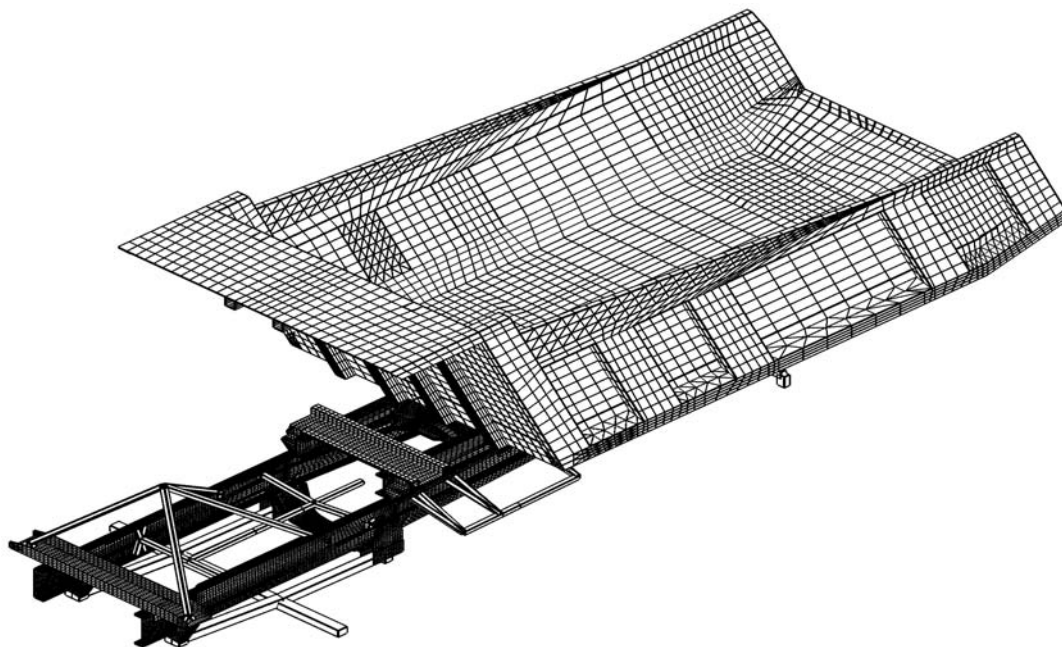


Рис. 3. Конечно-элементная модель несущей системы автомобиля-самосвала.

$$\mathbf{u}_{t+\Delta t} = \mathbf{u}_t + \dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t/2} \Delta t.$$

Обновление скоростей в моменты, сдвинутые на половину шага по времени, улучшает точность и сходимость решения. Необходимые для вычисления ускорений $\ddot{\mathbf{u}}_t$ скорости $\dot{\mathbf{u}}_t$ в момент времени t можно найти либо с использованием разного вида экстраполяций, либо, в простейшем случае, считать, что $\dot{\mathbf{u}}_t = \dot{\mathbf{u}}_{t-\Delta t/2}$.

Выбор шага интегрирования

Главным недостатком метода центральных разностей является его условная устойчивость. Шаг интегрирования Δt должен быть меньше критического значения Δt_{cr} , вычисляемого исходя из инерционных и жёсткостных свойств ансамбля элементов. Далее в качестве Δt_{cr} используется наименьшее значение критического шага $\Delta t_{cr}^e = T_{min}^e / \pi$, где T_{min}^e – минимальный период колебаний элемента, зависящий от его размеров и типа.

Для балочных элементов длиной L с сечением площадью F и моментом инерции J из материала с плотностью ρ и модулем упругости E значение критического шага Δt_{cr}^e может определяться как продольными, так и изгибными колебаниями элемента. Считая элемент защемлённым по концам и имея в виду, что $T_{min}^e = 2\pi/p_1$, а собственные значения частот продольных и изгибных колебаний элемента определяются соотношениями

$$p_1^{прод.} = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad \text{и} \quad p_1^{изг.} = \frac{22.37}{L^2} \sqrt{\frac{EJ}{\rho F}}$$

[4, 5], найдём соответствующие периоды колебаний по соотношениям

$$p_1^{изг.} = \frac{22.37}{L^2} \sqrt{\frac{EJ}{\rho F}} \quad \text{и} \quad T_{изг.}^e = \frac{2\pi}{p_1^{изг.}} = 0.28 L^2 \sqrt{\frac{\rho F}{EJ}}.$$

Величиной критического шага Δt_{cr}^e для элемента балки, таким образом, будет наименьшее из значений

$$\Delta t_{прод.}^e = T_{прод.}^e / \pi = 0.67 L \sqrt{\frac{\rho}{E}},$$

$$\Delta t_{изг.}^e = T_{изг.}^e / \pi = 0.089 L^2 \sqrt{\frac{\rho F}{EJ}}.$$

Для элемента квадратной пластины с размером стороны L и толщиной h из материала с плотностью ρ , модулем упругости E и коэффициентом Пуассона ν значение критического шага Δt_{cr}^e определяется изгибными колебаниями. Считая элемент защемлённым по контуру, определим частоту колебаний по соотношению

$$p_1 = \frac{35.999}{L^2} \sqrt{\frac{\rho h}{D}}$$

[4], где $D = Eh^3 / 12(1 - \nu^2)$ – цилиндрическая жёсткость. Период колебаний элемента найдём по формуле

$$T = \frac{2\pi}{p_1} = \frac{\pi\sqrt{3}}{9} \frac{L^2}{h} \sqrt{\frac{E}{\rho(1 - \nu^2)}},$$

а критический шаг для квадратного элемента пластины определится соотношением

$$\Delta t_{cr}^e = \frac{\sqrt{3}}{9} \frac{L^2}{h} \sqrt{\frac{E}{\rho(1 - \nu^2)}} = 0.19 \frac{L^2}{h} \sqrt{\frac{E}{\rho(1 - \nu^2)}}.$$

Для элементов произвольной четырёхугольной и треугольной пластины можно пользоваться этим же соотношением, используя в качестве L характерный линейный размер элемента. В наших исследованиях для трёхугольных элементов за L принималась наименьшая высота элемента, для четырёхугольных – отношение площади элемента либо к длине наибольшей стороны, либо к длине наибольшей диагонали.

Для элемента оболочки значение критического шага Δt_{cr}^e определяется как наименьшее из величин, определяемых по соотношениям

$$\Delta t_{cr}^e = L \sqrt{\frac{E}{\rho(1 - \nu^2)}},$$

$$\Delta t_{cr}^e = 0.19 \frac{L^2}{h} \sqrt{\frac{E}{\rho(1 - \nu^2)}}.$$

Здесь L – характерный линейный размер элемента, определяемый как в предыдущем случае.

Оценка точности и сходимости элементов

Для оценки точности и сходимости элемента балки рассмотрим двухопорную балку (рис. 4) с характеристиками: $L = 100$ см, $H = 1$ см, $B = 1$ см, $E = 2000000$ кгс/см², $\rho = 0.78 \cdot 10^{-5}$ тем/см³.

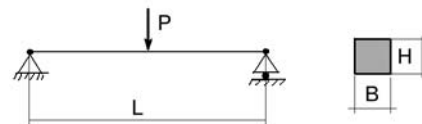


Рис. 4. Двухопорная балка.

В центре пролёта к балке прикладывалась сосредоточенная сила величиной 1 кгс. Прогиб в центре балки в момент времени 0.01 секунды сравнивался со значением, полученным аналитически по формуле

$$v\left(\frac{L}{2},t\right)=\frac{2P}{mLp_1^2}(1-\cos(p_1t)),$$

заимствованной из [7]. В ней $m = \rho HB$ – погонная масса,

$$p_1=\frac{\pi^2}{L^2}\sqrt{\frac{EJ}{m}}$$

– собственная частота первого тона балки. При увеличении числа элементов с 2 до 100 оценка прогиба в центре находилась в пределах 0.1078–0.1074 см. Аналитическое решение даёт оценку 0.1074 см.

Исследование точности и сходимости элементов мембраны проводилось на примере, заимствованном из работы [8]. В нём рассматривалась консольная балка с характеристиками: $L = 10\text{ in}$, $H = 1\text{ in}$, $B = 1\text{ in}$, $E = 12000\text{ psi}$, $\nu = 0.2$, $\rho = 0.1024 \cdot 10^{-5}\text{ lb} \cdot \text{sec}^2/\text{in}^4$. К балке прикладывалась нагрузка, равномерно распределённая по длине. Расчётная схема балки приведена на рис. 5.

Максимальный прогиб на конце балки, полученный для различных сеток треугольных элементов мембраны, приведён в таблице 2.

Исследование точности и сходимости элементов треугольной и четырёхугольной пластины проводилось на примере балки, показанной на рис. 6, с характеристиками, аналогичными описанным в предыдущем примере. Максимальные прогибы на конце балки, полученные для различных сеток трёх- и четырёхугольных элементов пластины и оболочки, приведены в таблице 3.

Для исследования точности и сходимости элементов пружины, линейного демпфера вязкого трения и сосре-

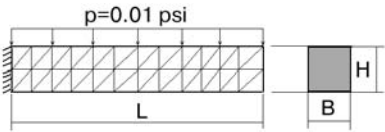


Рис. 5. Консольная балка-мембрана.

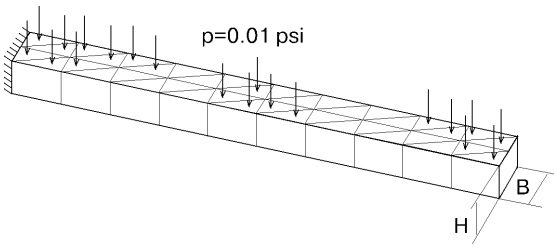


Рис. 6. Консольная балка, моделируемая элементами пластины и оболочки.

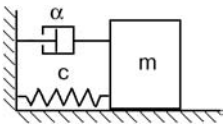


Рис. 7. Колебательная система с демпфированием.

доточенной массы рассмотрим систему, состоящую из тела массой m , удерживаемого упругой связью жёсткостью c , и демпфера вязкого трения с коэффициентом демпфирования α , находящуюся под действием внешней силы $P(t)$ (рис. 7).

Если к неподвижной и недеформированной системе приложить нагрузку, изменяющуюся по линейному закону $P(t) = kt$, то без учёта демпфирования ($\alpha = 0$) при $t \geq 0$ положение тела определится выражением $x = k(pt - \sin pt) / mp^3$ [9], в котором $p = \sqrt{c/m}$ – уг-

Таблица 2. Максимальный прогиб на конце балки-мембраны (рис. 5).

Сетка	2×10	4×20	8×40	16×80	Аналитическое решение [8]
Прогиб (×10 ⁻³ in)	9.31	17.74	23.00	24.86	25.00

Таблица 3. Максимальный прогиб на конце балки, показанной на рис. 6.

Сетка	Прогиб (×10 ⁻³ in)		
	Треугольные элементы пластины	Четырёхугольные элементы пластины	Треугольные элементы оболочки
1×5	25.04	25.21	25.06
2×10	25.05	25.11	25.04
4×20	25.05	25.08	25.03
Аналитическое решение [8]	25.00	25.00	25.00

ловая частота собственных колебаний системы. Положим $m = 1$ кг, $c = 16$ Н/м, и, выбрав $k = 1000$ для $t = 0.01$ с, получим $x = 1.6499 \cdot 10^{-4}$ м. Численное решение даёт оценку $x = 1.6665 \cdot 10^{-4}$ м.

Для тестирования элемента линейного демпфера вязкого трения рассмотрим свободные колебания системы. Уравнение движения системы описывается уравнением $m\ddot{x} - \alpha\dot{x} + cx = 0$. Аналитическое решение этого уравнения при начальных условиях $x_{t=0} = x_0$, $\dot{x}_{t=0} = \dot{x}_0$ имеет вид:

$$x = \exp(-nt) \left[x_0 \cos p_1 t + \left(\dot{x}_0 + nx_0 \right) \frac{1}{p_1} \sin p_1 t \right],$$

где $n = \alpha/2m$, $p_1 = \sqrt{p^2 - n^2}$, а $p = \sqrt{c/m}$ [8]. Выберем $m = 1$ кг, $c = 16$ Н/м, $\alpha = 1$ Нс/м, $x_0 = 0$, $\dot{x}_0 = 1$ м/с, тогда для $t = 1.0$ с получим $x = -0.1147$ м. Численное решение даёт оценку $x = -0.11$ м.

Распараллеливание алгоритма решения

При распараллеливании алгоритма решения системы (1) учитывалось, что матрицы жёсткости K и демпфирования C конструкции представляют собой суммы матриц жёсткости и демпфирования элементов

$$K = \sum_{i=1}^{n_e} K_i^e, C = \sum_{i=1}^{n_c} C_i^e.$$

Если разделить вектора $\ddot{u}$, $\dot{u}$ и u на равные блоки по количеству доступных параллельных процессов и рассортировать матрицы жёсткости и матрицы демпфирования элементов в соответствии со степенями свободы, входящими в каждый из блоков, то в каждом процессе параллельно могут выполняться действия

$$\ddot{u}_t^j = M^{-1} \left[R_t^j - \sum_{i=1}^{n_c^j} C_i^e \dot{u}_{t-\Delta t/2}^j - \sum_{i=1}^{n_e^j} K_i^e u_t^j \right],$$

$$\dot{u}_{t+\Delta t/2}^j = \dot{u}_{t-\Delta t/2}^j + \ddot{u}_t^j \Delta t,$$

$$u_{t+\Delta t}^j = u_t^j + \dot{u}_{t+\Delta t/2}^j \Delta t.$$

После завершения этих вычислений процессы должны обменяться результатами для формирования в каждом из них векторов $\dot{u}_{t+\Delta t/2}$ и $u_{t+\Delta t}$.

При реализации описанного алгоритма использовалась технология MPI. Программа написана на языках FORTRAN и C++. Для обеспечения расширения библиотеки элементов в процессе эксплуатации программы предусмотрена возможность встраивания элементов без

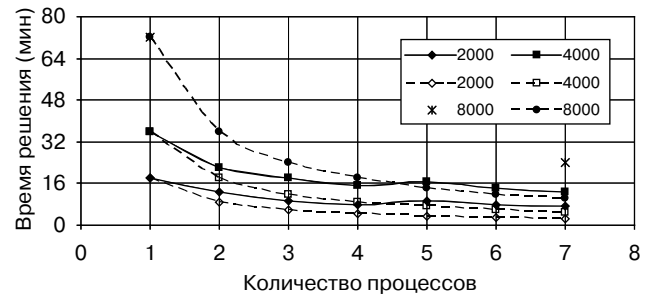


Рис. 8. Время решения задач различной размерности в зависимости от числа процессов. Штриховые линии соответствуют линейному ускорению.

компиляции и сборки текстов программы. При этом процедуры, соответствующие добавляемым элементам, помещаются в отдельную динамически присоединяемую библиотеку и описываются в конфигурационном файле.

Масштабируемость алгоритма при использовании различного числа узлов кластера исследовалась на примере анализа динамического отклика консольной балки, свободный конец которой нагружался синусоидально изменяющейся во времени нагрузкой. Балка моделировалась конечными элементами треугольной оболочки. Рассматривались три задачи, включающие 2, 4 и 8 тысяч конечных элементов. Для сохранения постоянного шага интегрирования по времени размеры конечных элементов при этом не изменялись, а корректировались размеры балки. Время выполнения 31400 шагов приведено на рис. 8. На этом же рисунке приведены графики, соответствующие линейному ускорению.

Авторы выражают глубокую благодарность Фонду содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере и Фонду НИОКР РТ за финансовую поддержку работы.

Литература

1. Черников С.К., Ашихмин А.Н.: Высокопроизводительный кластер на базе процессоров Athlon XP. Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2003. Ежегодник, с. 162–166. Казань: ФизтехПресс 2004.
2. Шапошников Н.Н., Тарабасов Н.Д., Петров В.Б., Мяченков В.И.: Расчёты машиностроительных конструкций на прочность и жёсткость. М.: Машиностроение 1981. 334 с.
3. Зенкевич О.: Метод конечных элементов в технике. Пер. с англ. М.: Мир 1975. 541с.
4. Образцов И.Ф., Савельев Л.Н., Хазанов Х.С.: Метод конечных элементов в задачах строительной механики летательных аппаратов. М.: Высшая школа 1985. 392 с.
5. Hing P.G., Fa L.S.: Int. J. Num. Meth. Engng., **24**, 1031–1042 (1987)
6. Черников С.К., Садчиков Ю.В.: Труды III Междунар. конф. "Автомобиль и техносфера", с. 269–278. Казань: Изд-во КГТУ им. Туполева 2003.
7. Биргер И.А., Пановко Я.Г.: Прочность, устойчивость, колебания. Справочник, т. 3. М.: Машиностроение 1968. 567 с.
8. Belytschko T., Lin J.I.: Explicit algorithms for the nonlinear dynamics of shells. Comp. Meth. Appl. Mech. and Engrg., vol. 42, 225–251 (1984)
9. Бидерман В.Л.: Прикладная теория механических колебаний. М.: Высшая школа 1972. 416 с.

Механизмы формирования, сохранения и реконсолидации долговременной памяти

Т. Х. Гайнутдинова, Р. Р. Тагирова, А. И. Исмаилова, Л. Н. Муранова, Х. Л. Гайнутдинов

Отдел медицинской физики, лаборатория биофизики

В работе исследовано влияние блокатора белкового синтеза аннотационина (АН) на контекстуальную память виноградной улитки *Helix lucorum*. Тестирование долговременной контекстуальной памяти показывает, что только инъекция АН разрушает контекстуальное обусловливание. В контрольной серии, где улитки были инъецированы АН, либо физиологическим раствором без напоминания, не наблюдалось нарушения долговременной контекстуальной памяти, в то время как инъекция АН во время сессии обучения (тренировки) полностью нарушала (тормозила) долговременную память. В проведённых экспериментах по формированию обстановочного условного рефлекса у виноградной улитки впервые на моллюсках показано, что процесс реактивации долговременной обстановочной памяти зависит от белкового синтеза. Таким образом, показано, что в определённых случаях блокада синтеза белка при реактивации долговременной памяти (воспоминании) может привести к нарушению памяти.

Введение

Память — самая долговечная из наших способностей. Когда мы говорим о механизмах памяти, то мы говорим о процессах, через которые должен пройти любой человек, чтобы запомнить нужную информацию, а впоследствии ее воспроизвести. Основными процессами памяти являются запоминание, сохранение, воспроизведение и забывание [1].

Одним из характерных свойств долговременной памяти является ее чувствительность к блокаде белкового синтеза. Это проявляется в том, что она неустойчива сразу после получения новой информации, но становится стабильной со временем, этот феномен известен как консолидация памяти [2–4]. Нестабильное состояние памяти характерно для фазы долговременной памяти, предшествующей ее консолидации или переходу из кратковременной памяти в долговременную. Двумя группами авторов была показана возможность амнезии памяти при реактивации результатов обучения у крыс [5, 6]. Было показано, что локальное введение ингибитора биосинтеза белка аннотационина (АН) быстро, после 24-часового теста на память, разрушала память, которая тестировалась на следующий день и через 48 часов. Эти результаты предполагают, что после реактивации долговременная память, основанная на этом обучении, становится чувствительной к ингибиторам белкового синтеза после начального обучения.

Таким образом, экспериментальные данные подтверждают неустойчивость памяти в определённые фазы и делают актуальным детальный анализ процессов, проходящих при реактивации долговременной памяти [7]. Поэтому нами было предпринято исследование влияния блокады синтеза белка АН при повторном напоминании на реконсолидацию памяти после выработки обстановочного условного рефлекса.

Методика эксперимента

В представленных сериях экспериментов была использована 161 виноградная улитка *Helix lucorum* (крымская популяция). До эксперимента улитки не менее двух недель находились в активном состоянии во влажной атмосфере, и их кормили морковкой. Было выполнено 6 серий экспериментов с улитками (наивные, экспериментальные и контрольные) по 4–16 улиток в каждой группе. Процедура выработки обстановочного условного рефлекса (УР) проводилась в экспериментальной системе, когда улитки за раковину жёстко крепились к штативу так, чтобы улитка могла свободно ползать по шару, плавающему в воде, содержащей 0.01% NaCl [8]. До первого тестирования все улитки 1–2 дня приучались к экспериментальной обстановке. Процедуру обучения начинали после тестирования, при этом улитки ($n = 10$) в течение 5 дней получали по 5 электрических раздражений в день (1–4 мА, 1 с, 50 Гц) через прикосновение двух макроэлектродов к передней части ноги и к хвосту.

Во время тестирования оборонительного поведения животных измеряли амплитуду втягивания омматофоров в ответ на тактильную стимуляцию передней части ноги и визуально оценивали сокращение омматофоров (в процентах). При этом за 100% принимали максимальную длину омматофоров и записывали, как сильно улитка втягивала омматофоры (на 0, 25, 50, 75 или 100%). Тестирование проводили на шаре (т.е. в стандартных условиях, когда всех животных опытных групп подвергали воздействию электрическим током) и на плоской поверхности крышки террариума (т.е. в условиях, отличных от стандартных).

Всегда производилось по 4 теста.

На следующий день после тестирования, подтверждающего выработку обстановочного условного рефлекса.

са, улиток помещали на 20 мин на шар, что служило напоминанием обстановочного УР, а затем блокировали биосинтез белка инъекцией АН по 0.4 мг на улитку, который был растворён в 0.2 мл физиологического раствора (ФР) для виноградной улитки. Другой группе ($n = 10$), для сравнения, после напоминания вводили такое же количество ФР. В качестве контроля ($n = 10$) использовались интактные улитки, содержащиеся вместе с экспериментальными группами в тех же условиях.

Анизомидин (Sigma) растворялся в ФР с добавлением эквимольного количества 1Н HCl, затем раствор доводился до pH 7.6.

Все эксперименты проводились с применением метода двойного слепого контроля. Результаты статистически обрабатывались с применением t-критерия Стьюдента, для каждого случая получали среднее значение измеряемой величины и стандартную ошибку среднего ($M \pm SEM$).

Результаты

Контекстуальная память у улиток

Во время предварительного тестирования не наблюдалось значительных отличий в амплитуде отдергивания омматофоров в ответ на тестовую тактильную стимуляцию во всех группах животных как на пластиковых шарах, так и на плоской поверхности (см. первые две колонки на рис. 1–4).

После тестирования контрольные и экспериментальные группы улиток были подвергнуты электрическим шокам – им наносились электрические стимулы в течение 5 дней и затем через 2 дня отдыха животные тестировались в обеих ситуациях. Усреднение результатов показывает, что во всех случаях ответы в контексте, в котором улитки подвергались электрическим стимулам, были значительно сильнее, чем те, которые были в нейтральном контексте ($p < 0.001$, по критерию Манна-Уитни) (n для каждой группы показано на рис. 1 и 2). Отличие в выбранных (параллельных) группах наивных улиток во всех контекстах были незначительными (рис. 1, 2, 4). Видно, что улитки демонстрируют увеличение амплитуды оборонительной реакции только в том окружении, где производились электрические стимулы. Этот вывод находится в соответствии с предположением, что улитки могут дифференцировать (узнавать) то окружение, в котором были предъявлены электрошоки. Контекстуальная специфичность окружения чрезвычайно важна, т.к. позволяет нам исходить из того, что сенситизирующий эффект шоков является результатом тренировки. Эти результаты предполагают существование долговременных изменений в поведении (появление контекстуально зависимой памяти) после неслучайной сильной стимуляции, что может появиться только в том контексте, в котором появилась электрическая стимуляция.

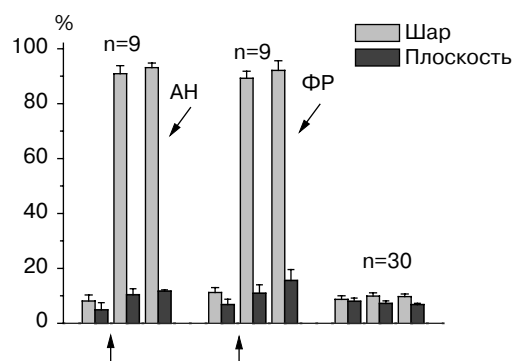


Рис. 1. Средние изменения величины оборонительной реакции улитки на тестовое тактильное раздражение улиток, уколотых АН и ФР без подкрепления. Третья группа – интактные улитки (без воздействий). n – количество животных. Стрелкой показан момент электрораздражения.

Эффекты инъекции блокатора биосинтеза белка на контекстуальную память

Введение АН наивным улиткам не вызывало никаких достоверных изменений в реакциях на оборонительные стимулы.

Несколько групп животных одновременно обучали в следующей последовательности.

Протокол № 1: Первые два дня – приучение к установке, тестирование; следующие 5 дней – электрошоки по 1–4 мА, 1 с, 50 Гц; следующие 2 дня – отдых, кормление, тестирование; следующий день – напоминание (улиток помещали на 20 мин на шар, что служило напоминанием обстановочного УР), инъекции АН 0.4 мг на улитку или ФР по 0.2 мл сразу после напоминания; последний день – тестирование.

Тестирование оборонительных реакций – сокращения омматофоров в ответ на тактильную стимуляцию передней части ноги – показывает достоверное возрастание оборонительных реакций, когда виноградная улитка находится на шаре (в 5–7 раз, $p < 0.001$, $n = 10$ в каждой группе), в то же время число оборонительных реак-

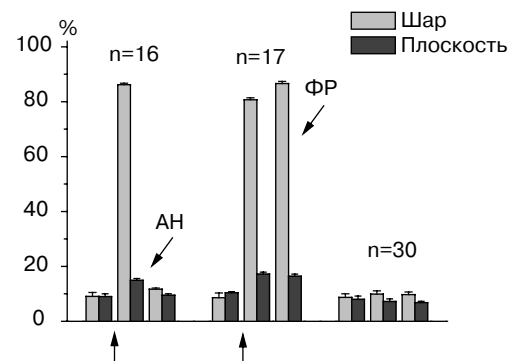


Рис. 2. Средние изменения величины оборонительной реакции улитки на тестовое тактильное раздражение улиток, уколотых АН и ФР сразу после подкрепления. Третья группа – интактные улитки (без воздействий). n – количество животных.

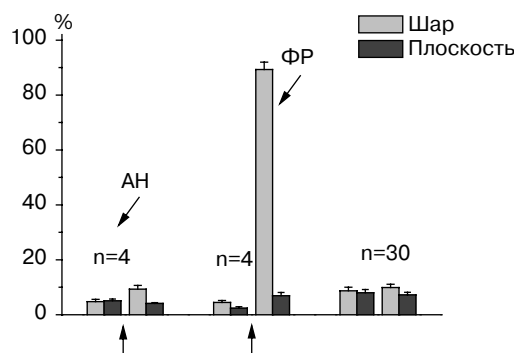


Рис. 3. Средние изменения величины оборонительной реакции улитки на тестовое тактильное раздражение улиток, уколотых АН и ФР сразу после каждого электрошока. Третья группа – интактные улитки (без воздействий). n – количество животных. Стрелкой показан момент электрораздражения.

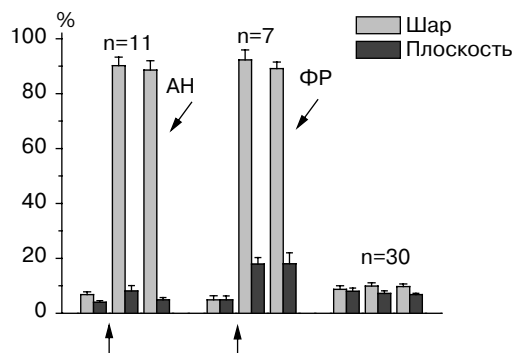


Рис. 4. Средние изменения величины оборонительной реакции улитки на тестовое тактильное раздражение улиток, уколотых АН и ФР сразу после совместного применения подкрепления и напоминания. Третья группа – интактные улитки (без воздействий). n – количество животных. Стрелкой показан момент электрораздражения.

ций при тестировании на плоской поверхности достоверно не увеличивается (рис. 1). Этот результат демонстрирует выработку у улитки обстановочного УР. На следующий день после тестирования проводили сеанс “напоминания”, который заключался в помещении улиток на 20 мин на шар, на котором при обучении им предъявляли электрический ток, что служило напоминанием обстановочного УР. Затем, сразу после напоминания, улиткам производили инъекцию АН (контрольным улиткам вводился ФР). Повторное тестирование показало, что инъекция АН после первого тестирования приводила к полному забыванию обстановочного УР (рис. 2), отличия ответов на шаре до и после АН достоверны, $p < 0.001$; отличия ответов на шаре и стекле после АН недостоверны. В то же время улитки, получившие инъекцию ФР, демонстрируют обстановочный УР (есть достоверная разница между тестированием на шаре и на стекле). Таким образом, проявления обстановочного УР могут быть заблокированы применением блокатора биосинтеза (в нашем случае АН) во время напоминания.

Кроме того, была проведена дополнительная серия экспериментов, которая показала, что если после каждой сессии обучения улиткам инъецировать АН, то выработки обстановочного условного рефлекса не происходит (рис. 3).

Протокол № 2: Первые два дня – приучение к установке, тестирование; следующие 5 дней – электрошоки по 1–4 мА, 1 с, 50 Гц; следующие 2 дня – отдых, кормление, тестирование; следующие 4 дня – электрошоки по 1–4 мА, 1 с, 50 Гц; следующие 2 дня – отдых, кормление, тестирование; следующий день – напоминание с подкреплением двумя электрошоками, инъекции АН 0.4 мг на улитку или ФР по 0.2 мл сразу после напоминания; последний день – тестирование.

Эта серия экспериментов отличалась от предыдущего протокола тем, что выработка УР проводилась в два этапа и напоминание сопровождалось применением подкрепления двумя электрошоками. Тестирование оборонительных реакций сокращения омматофоров в ответ на

тактильную стимуляцию ноги показывает достоверное постепенное возрастание оборонительных реакций, когда виноградная улитка находится на шаре, однако и число оборонительных реакций при тестировании на плоской поверхности также возрастает после второй сессии электрошоков (примерно в 3 раза, рис. 4). Этот результат демонстрирует формирование у улитки как обстановочного обучения, так и сенситизации. Сразу, после напоминания с применением электрошока (т.е. фактически сессии обучения), улиткам вводили АН. Повторное тестирование показало, что инъекция АН при таком протоколе эксперимента (рис. 2, $n = 5$ в группе) не приводила к полному забыванию полученного навыка, наблюдалось только частичное недостоверное уменьшение оборонительных реакций, хотя разница между ответами в двух обстановках сохранилась и даже увеличилась. Таким образом, эти результаты показывают, что в зависимости от условий обучения влияние блокатора синтеза может не проявляться.

Обсуждение

Одним из характерных свойств долговременной памяти является её чувствительность к блокаде белкового синтеза. Это проявляется в том, что она неустойчива сразу после получения новой информации, но становится стабильной со временем. Этот феномен известен как консолидация памяти. Так как эта структурная реорганизация нуждается в новых белках и экспрессии генов, то это объясняет, почему долговременная память восприимчива к торможению синтеза белка и РНК сразу после обучения. Кроме периода чувствительности к блокаторам синтеза белка сразу после обучения, было убедительно показано, что напоминание (обращение к памяти, реактивация памяти) также связано с появлением периода чувствительности к блокаторам синтеза белка [1]. Имеются результаты, которые показывают, что в определённых случаях после реактивации долговременная память

или способность к воспроизведению памяти, становится чувствительной к ингибиторам белкового синтеза после начального обучения. Было выдвинуто предположение, что при действии напоминания память реактивируется, в процессе чего запускается каскад молекулярных событий, аналогичный протекающему при изначальном формировании памяти и долговременно консолидированная память может быть разрушена теми же факторами, которые разрушают вновь формируемую память вскоре после её выработки, если их применять одновременно (совместно) с напоминанием, представляющим часть ситуации обучения [5, 7]. Не ясно полностью, обусловлено ли это разрушение реконсолидацией существовавшей предыдущей памяти *de novo* или дефицитом воспоминания [9, 10].

В данном исследовании полученные нами данные показывают, что напоминание (реактивация памяти) через два дня после успешного обучения вызывает процесс, чувствительный к блокаде синтеза белка. Это позволяет сделать вывод о наличии у виноградной улитки процесса реконсолидации. Важно отметить, что, если напоминание сопровождается подкреплением, т.е. если блокада синтеза белка будет проводиться сразу после обучения (протокол № 2), то наблюдаются иные поведенческие изменения. Полученные результаты интересны еще и по той причине, что у улитки хорошо изучена сеть нейронов, лежащая в основе условной оборонительной реакции, описаны также нейроны, модулирующие синаптический вход командных нейронов оборонительного поведения и установлено, что локус пластичности обстановочной памяти отличен от локуса пластичности оборонительной реакции [11]. Полученные нами результаты демонстрируют зависимость формирования долго-

временной памяти от протокола эксперимента. Наши эксперименты также показывают явление зависимого от белкового синтеза процесса реактивации долговременной памяти обстановочного УР. В нашем случае для стабилизации памяти после напоминания (реконсолидации) требуется новый синтез белка как раз после напоминания.

Таким образом, в экспериментах по формированию обстановочного УР у виноградной улитки впервые на моллюсках показано явление зависимого от белкового синтеза процесса реактивации долговременной обстановочной памяти.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований (№ 04-04-48817, № 07-04-00224).

Литература

1. Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х.: Проблемы памяти: курс лекций. Учеб. пособие. Казань: ТГТУ 2006. 76 с.
2. Bourchouladze R., Abel T., Berman N., Gordon R., Lapidus K., Kandel E.R.: *Learning and Memory* **5**, 365–374 (1998)
3. Quevedo J., Vianna M.R.M., Roesler R., de-Paris F., Izquierdo I., Rose S.P.R.: *Learning and Memory* **6**, 600–607 (1999)
4. Sutton M.A., Carew T.J.: *Neuron* **26**, 219–231 (2000)
5. Nader K., Schafe G.E., Le Douarin J.E.: *Nature* **406**(6797), 722–726 (2000)
6. Taubenfeld S.M., Milekic M.H., Monti B., Alberini C.M.: *Nature (Neuroscience)* **4**(8), 813–818 (2001)
7. Sara S.J.: *Learning and Memory* **7**, 73–84 (2000)
8. Balaban P.M.: *Prog. Neurobiol.* **41**, 1–19 (1993)
9. Anokhin K.V., Tiunova A.A., Rose S.P.: *Eur. J. Neurosci.* **15**, 1759–1765 (2002)
10. Duvarci S., Nader K.: *J. Neurosci.* **24**, 9269–9275 (2004)
11. Balaban P.M., Korshunova T.A., Bravarenko N.I.: *Eur. J. Neurosci.* **19**, 227–233 (2004)

Эффекты антител к кальций-связывающему белку S100 на ионные токи идентифицированных нейронов улитки *Helix lucorum*

В. В. Андрианов, Д. И. Силантьева, Х. Л. Гайнутдинов

Отдел медицинской физики, лаборатория биофизики

Представленная работа является продолжением наших многолетних исследований роли Ca^{2+} -связывающего белка S100 с использованием антител (AS100) к этому белку. На идентифицированных спонтанно активных нейронах виноградной улитки *Helix lucorum* исследованы эффекты совместного применения этих антител с хинином, блокатором Ca^{2+} -зависимых K^{+} -каналов. Найдено, что хинин приводит к двухкратному уменьшению частоты генерации потенциала действия (ПД) и более чем шестикратному увеличению продолжительности ПД. Инкубация нейрона в AS100 сопровождалась деполяризацией мембранного потенциала в нейронах В4 и В6 и снижением порогового потенциала. AS100 в его базовой концентрации предотвращает развитие этих изменений ПД, возвращая его параметры к исходному уровню. Это означает, что AS100 препятствует увеличению продолжительности ПД после блокады Ca^{2+} -зависимых K^{+} -каналов. Показано, что эффект антител к Ca^{2+} -связывающему белку S100 на уровне ионных токов выражается в уменьшении максимальной величины входящего тока в среднем на 20% и выходящего тока в среднем на 12%.

Введение

Ионы кальция играют чрезвычайно важную роль в регуляции разнообразных нейрональных процессов, что обусловлено их специфическими физико-химическими характеристиками, благодаря которым они являются наиболее универсальным внутриклеточным посредником [1, 2]. Ионы кальция, поступающие внутрь клетки во время её возбуждения, с одной стороны, приводят к изменению свойств ионных каналов мембраны, а с другой стороны, служат сигналами для активации различных биохимических реакций. Исключительно высокая способность внутриклеточной среды связывать ионы кальция определяется наличием в ней эффективных буферных систем. Они состоят, главным образом, из Ca^{2+} -связывающих белков, таких как парвальбумин, кальмодулин, тропонин-С, кальретинин, белок S100 и др. [3, 4].

S100 – это группа Ca^{2+} -связывающих белков относительно небольшого молекулярного веса, характеризующихся наличием Ca^{2+} -связывающих доменов. Известно, что Ca^{2+} -связывающие белки S100 могут принимать участие в регуляции как внутриклеточной концентрации ионизированного Ca^{2+} , так и в регуляции фосфорилирования белков. Одной из важных функций белков S100 является регуляция Ca^{2+} -гомеостаза. Было обнаружено, что некоторые представители этого семейства могут воздействовать на электрические характеристики нервных клеток, например, белок S100В увеличивает мембранный потенциал, укорачивает продолжительность потенциала действия (ПД), и уменьшает спонтанную активность нейронов париетального и висцерального ганглиев виноградной улитки [5]. Было показано, что результатом эффектов влияния антител к S100 (AS100) являются противоположные изменения электрических характеристик ней-

рональной мембраны: снижение амплитуды ПД, сопровождаемое деполяризацией мембраны, а также нарушение функционирования Ca^{2+} -каналов [6–8]. Кроме того, оказалось, что AS100 блокирует развитие посттетаической потенциации в срезах гиппокампа [9]. Наконец, удалось показать, что белок S100 принимает участие в механизмах обучения и памяти у животных, а AS100 вызывает нарушения этих процессов [6, 10, 11]. Недавно опубликована статья, в которой показано, что белок S100 может модулировать свойства К-каналов идентифицированных нейронов виноградной улитки, включая Ca^{2+} -зависимые K^{+} -каналы [5], что мотивировало постановку экспериментов по анализу действия антител к S100 на ионные каналы.

Методика эксперимента

Объект

В экспериментах использовали взрослых особей виноградной улитки *Helix lucorum* одинакового веса и размера, находящихся до эксперимента не менее 2-х недель в активном состоянии. Перед процедурой препаровки улитки были анестезированы помещением их на 20–30 мин в холодную воду со льдом. Эксперименты проведены на идентифицированных нейронах [12]. Измерения осуществлялись при комнатной температуре (20–22°C) с использованием стеклянных внутриклеточных микроэлектродов, имеющих сопротивление 5–40 МОм и заполненных 2.5 М KCl. Электрическая активность нейронов наблюдалась на экране монитора, регистрация биопотенциалов производилась посредством прямого ввода в персональный компьютер.

Использованные вещества

Для исследования функционирования Ca^{2+} -зависимых K^+ -каналов нами был выбран препарат хинин (фирмы Sigma [13, 14]). Исходя из данных литературы, мы выбрали оптимальную концентрацию хинина, равную 0.2 мМ.

Использованные антитела

Использовали моноспецифическую иммунную сыворотку к Ca^{2+} -связывающему белку S100, предоставленную к.б.н. С. М. Свиридовым (Институт цитологии и генетики СО РАН, г. Новосибирск). Иммунная сыворотка диализировалась в дистиллированной воде, затем лиофилировала и в таком виде хранилась до эксперимента. Для проведения экспериментов иммунная сыворотка разводилась физиологическим (солевым) раствором для виноградной улитки в соотношении 1:5. Количество лиофилизированного продукта (белка) составляло 12 мг на 1 мл раствора. В качестве контроля была использована неиммунная сыворотка кролика.

Эффекты AS100 и хинина на электрические характеристики нейрональной мембраны

В этой серии экспериментов в ходе микроэлектродного эксперимента регистрировали следующие параметры электрической активности нейронов: частоту генерации ПД (N – число импульсов в минуту), мембранный потенциал покоя (V_m) и порог генерации ПД (пороговый потенциал – $V_{\text{п}}$). Для оценки частоты вычисляли отношение её величины после аппликации растворов (N_e) к частоте генерации ПД до начала аппликации (N_i), получали отношение N_e/N_i в процентах, т.е. изменение частоты в процентах. Аналогичное соотношение использовали для характеристики мембранного потенциала и порога ге-

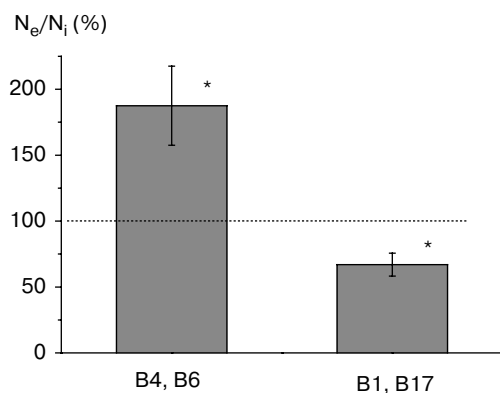


Рис. 1. Изменение частоты генерации ПД нейронов B1, B17 и B4, B6 после аппликации AS100. По оси вертикали отложено процентное соотношение N_e/N_i , по оси горизонтали приведены номера исследованных нейронов.

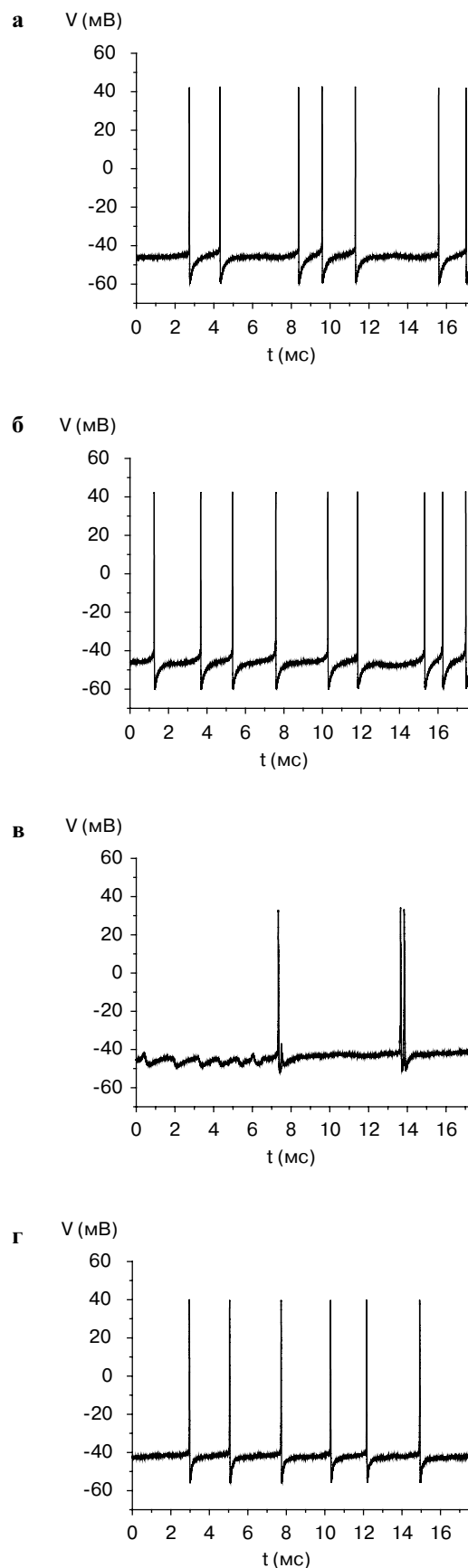


Рис. 2. Электрические характеристики нейронов B4 и B6 после аппликации: AS100 (б) и хинина (в) и AS100 с хинином (г); а – ФР.

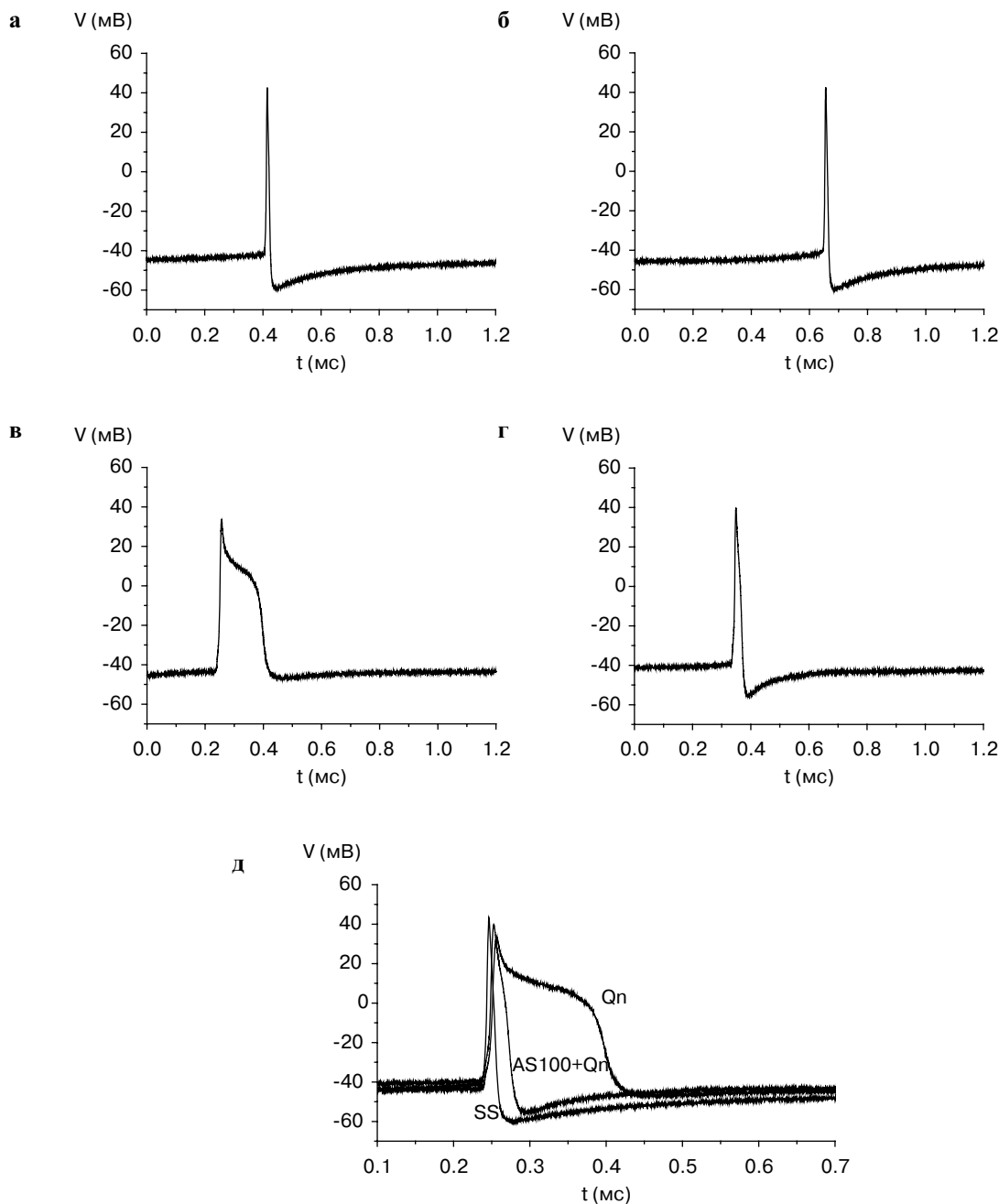


Рис. 3. Продолжительность ПД нейронов В4 и В6 после аппликации: АS100 (б), хинина (в), АS100 с хинином (г). Их эффекты суммированы на д. а – ФР. На д для сравнения показаны ПД, приведённые к началу их генерации.

нерации ПД. В работе приведены средние значения измеряемой величины и стандартные ошибки среднего $M \pm SEM$. С применением критерия Манна-Уитни для сопряжённых пар проверяли достоверность отличия средних значений параметров нейронов в разных сериях экспериментов.

В ходе проведённых экспериментов было найдено два типа нейронов висцерального и правого париетального ганглиев, реагирующих различным способом на аппликацию АS100. В спонтанно-активных клетках В1, В3, В17 и ППа6 (идентификация по Д. А. Сахарову, 1974 [12])

под влиянием антител к S100 частота генерации ПД снижается, а в клетках В4, В6, В11 и ряде других происходит увеличение частоты (рис. 1). При инкубации нейрона в АS100 частота генерации ПД в нейронах В4 и В6 увеличивалась ($p < 0.01$) в 1.5 раза (рис. 2б, 4). Продолжительность ПД при этом не изменялась (рис. 3б, 4). При добавлении хинина в омывающий раствор частота снижалась более чем в 2 раза (рис. 2в, 4), в то время как t_s увеличивалась в 6.4 раза (рис. 3в, 4). Аппликация АS100 предотвращала эффекты хинина и возвращала параметры к начальному уровню: частота генерации ПД в этом

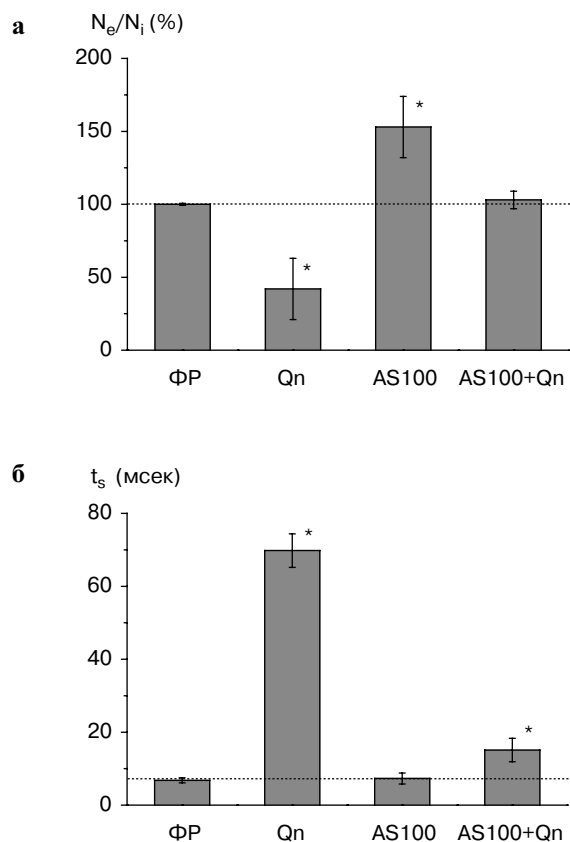


Рис. 4. **а** Изменение частоты генерации ПД нейронов В4, В6 после аппликации растворов с хинином (Qn), антител к белку S100 (AS100) и совместном применении антител к белку S100 и хинина (AS100 + Qn) относительно уровня частоты в ФР. По оси вертикали отложено процентное соотношение N_e/N_i , по оси горизонтали приведены серии экспериментов. * – достоверное отличие ($p < 0.05$) от ФР. **б** Изменение длительности потенциалов действия (t_s) нейронов В4, В6 при действии хинина (Qn), антител к белку S100 (AS100) и совместном применении антител к белку S100 и хинина (AS100 + Qn); (ФР) длительность потенциалов действия в ФР. По оси вертикали приведена величина продолжительности ПД (в милливольтах).

случае не менялась и оставалась на начальном уровне (рис. 2г, 4). В то же время величина продолжительности ПД увеличивалась в 1.6 раза, что менее выражено в сравнении с увеличением этого же параметра (более чем в 6 раз) при изолированном применении хинина в физиологическом растворе (ФР) (рис. 3г, 4). Этот эффект хорошо виден на рис. 3д.

Инкубация нейрона в AS100 сопровождалась деполяризацией мембранного потенциала в нейронах В4 и В6 и снижением порогового потенциала (рис. 5). Аппликация хинина в омывающий раствор приводила к снижению более чем в 2 раза частоты генерации ПД, что сопровождалось значительным увеличением порогового потенциала (на 13 мВ) при деполяризационном смещении мембранного потенциала (рис. 5). Совместное применение хинина и AS100 не вело к суммированию их эффектов на мембранный и пороговый потенциалы. Деполяризационный сдвиг мембранного потенциала оставался на том же уровне, как и при действии хинина, а

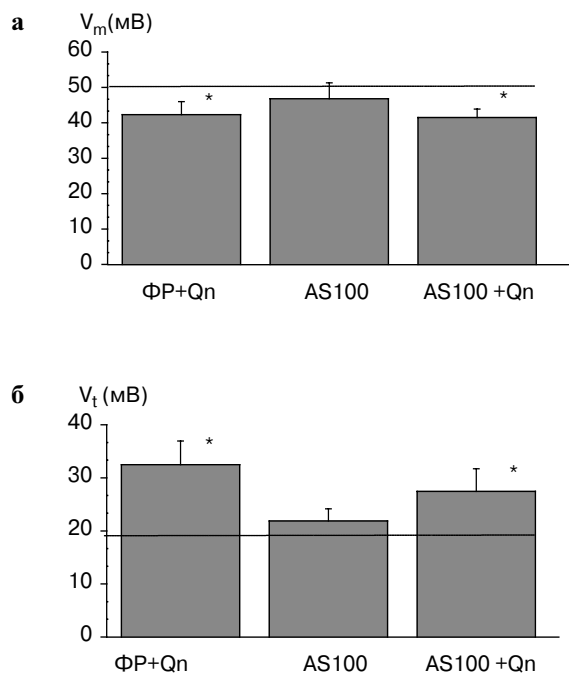


Рис. 5. Мембранный (**а**) и пороговый (**б**) потенциалы после аппликации: хинина (ФР + Qn), AS100 (AS100), AS100 с хинином (AS100 + Qn). Пунктирная линия показывает уровень для ФР.

увеличение порогового потенциала было даже меньшим (рис. 5).

Эффекты AS100 на ионные токи

Регистрацию параметров входящих и выходящих ионных токов в этой серии экспериментов проводили с использованием методики двухэлектродной фиксации потенциала. Один из микроэлектродов служил для регистрации мембранного потенциала, а через другой в клетку подавался стимулирующий ток. Поддерживаемый потенциал (V_b) обычно был на уровне мембранного потенциала покоя, тестирующие потенциалы (V_{test}) подавались в широком диапазоне. В ходе эксперимента регистрировали входящие и выходящие ионные токи идентифицированных спонтанно-активных нейронов виноградной улитки, возникающие в ответ на ступенчатое изменение мембранного потенциала. По максимальным величинам входящего и выходящего тока при данном значении тестирующего потенциала строилась вольт-амперная характеристика – один из основных показателей деятельности ионных каналов.

Измерения ионных токов в следующей серии экспериментов были произведены у нейронов висцерального ганглия В4 и В6, рис. 6 демонстрирует эффект действия AS100 ($n = 17$) на входящие и выходящие токи, а рис. 7 – эффект действия AS100 на вольт-амперные характеристики, полученные измерением максимальных величин входящих и выходящих ионных токов данного се-

мейства. Из этих результатов следует, что аппликация AS100 вызывает уменьшение максимальной величины входящего тока в среднем на 20%. Кроме того, найдено снижение максимальной величины выходящего тока в среднем на 12%.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что белок S100 участвует в функционировании мембранных структур. Об этом свидетельствуют изменения мембранного и порогового потенциалов при действии антител к белку S100. Эксперименты, показывающие, что AS100 в его базовой концентрации предотвращают развитие изменений ПД, вызываемых хинином, свидетельствуют о путях, связанных с модуляцией функций Ca^{2+} -зависимых K^+ -каналов. Результат этот получен с использованием антител к S100, подобный результат описан также другими исследователями с применением аппликации самого белка S100 [5]. Кроме того, ранее нами и другими авторами было найдено снижение Ca^{2+} -тока антителами к белку S100 [8]. Также было найдено, что изменениями внеклеточной концентрации ионов Ca^{2+} можно модулировать эффект AS100 вплоть до полного его ингибирования [6].

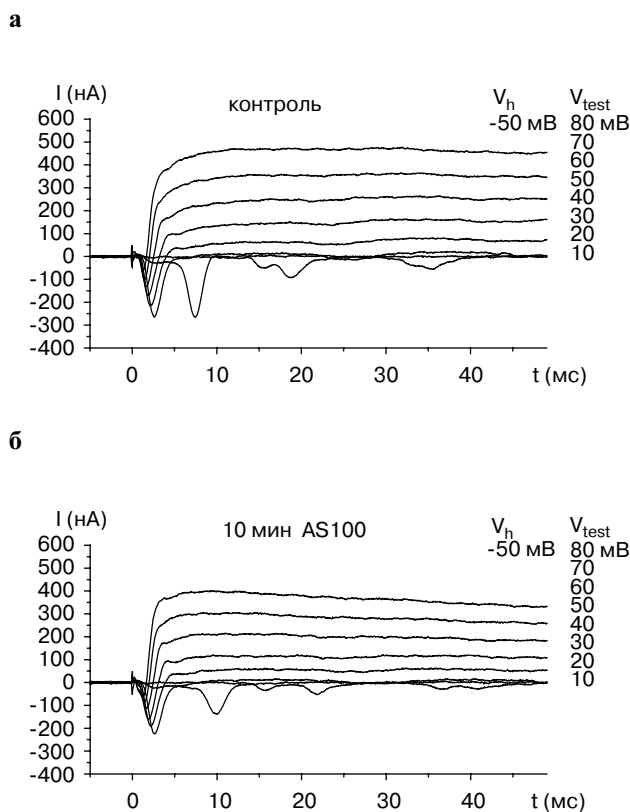


Рис. 6. Входящие и выходящие токи нейрона В4 (клетка, которая отвечает на AS100 учащением спайковой активности). **а** – нейрон до аппликации антител, **б** – эффект AS100. Величина поддерживаемого потенциала V_h в этом эксперименте была равна -50 мВ, величины тестирующих потенциалов V_{test} в этом эксперименте применялись от $+10$ мВ до $+80$ мВ с шагом в 10 мВ. По оси вертикали приведена величина регистрируемого тока, по оси горизонтали приведено время (или длительность) тестирующего потенциала.

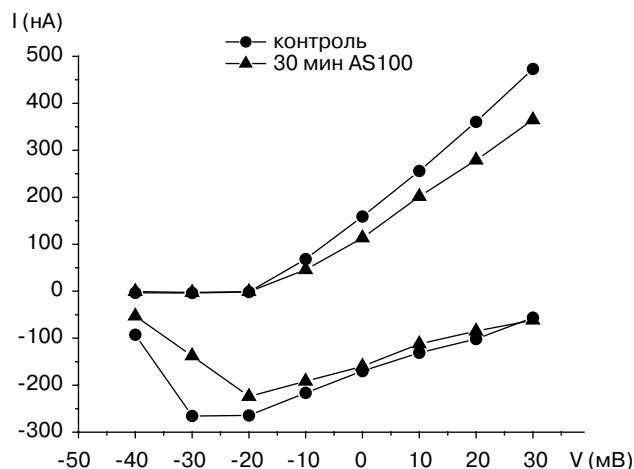


Рис. 7. Вольтамперные характеристики (ВАХ) максимумов входящих и выходящих токов, построенных по вышеприведённым семействам ионных токов. Контроль – ВАХ до аппликации антител, AS100 – эффект AS100. По оси вертикали приведена величина регистрируемого тока, по оси горизонтали приведена величина потенциала (сумма удерживаемого и тестирующего потенциалов).

Разнонаправленное влияние антител к этому белку на разные типы клеток показывает, что эти эффекты зависят от функциональной роли тех элементов мембран, к которым адресовано действие антител. К настоящему времени общепризнано, что кардинальной, с точки зрения целостной биологической функции белков S100, является их способность связывать ионы кальция [15], который, как это хорошо известно, является одним из основных регуляторов физиологического “статуса” клетки, её мембранных процессов [1, 16]. Эти данные согласуются с представлениями о том, что одна из основных функций белков семейства S100 – трансдукция внеклеточного сигнала в внутриклеточный [15, 17]. Не являясь ферментом, S100, осуществляет модуляцию значительного количества внутриклеточных процессов через связывание EF-доменами Ca^{2+} -зависимым способом [18].

Изучение влияния антител к Ca^{2+} -связывающему белку S100 на ионные токи показало, что их аппликация уменьшает максимальную амплитуду входящих и выходящих токов. Это может определяться связью S100 с кальциевым ионным каналом. Эффект же снижения амплитуды выходящих токов, вероятнее всего, связан с Ca^{2+} -зависимыми K^+ -каналами, механизм чего пока недостаточно ясен. Об этом же механизме свидетельствуют эксперименты по совместному действию хинина и AS100. Найдено, что хинин приводит к двукратному уменьшению частоты генерации ПД и более чем шестикратному увеличению продолжительности ПД. AS100 в его базовой концентрации предотвращает развитие этих изменений ПД, возвращая его параметры к исходному уровню. Изложенные выше результаты подчеркивают прямое действие AS100 на систему регуляции ионами кальция Ca^{2+} -зависимых K^+ -каналов. Исходя из

структуры этих каналов [19], можно полагать, что белок S100 локализован трансмембранно, участвуя таким способом в регуляции функционирования Ca^{2+} -зависимых K^{+} - и Ca^{2+} -каналов.

Очень интересные данные были получены проф. А. Германом и его сотрудниками. Оказалось, что антитела к S100 проявляют иммунореактивность только в спонтанно активных нейронах улитки [20] и этот результат подтолкнул их к исследованию роли белков S100 в функционировании Ca^{2+} -зависимых K^{+} -каналов в нейронах улитки. Ими было найдено уменьшение частоты ПД действия и гиперполяризация мембраны при аппликации белка S100 в омывающий раствор, что находится в соответствии с обратными эффектами при применении антител в наших экспериментах. Они также нашли снижение Ca^{2+} -зависимых K^{+} -токов и увеличение потенциалзависимых K^{+} -токов при действии белка S100. Так как в наших экспериментах было показано, что антитела к S100 предотвращают уменьшение частоты генерации ПД хинином, то мы сделали вывод, что в этих нейронах хинин действует в основном на Ca^{2+} -зависимые K^{+} -каналы. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют, что AS100 действуют на Ca^{2+} -зависимых K^{+} - и Ca^{2+} -каналы.

Работа поддержана грантами РФФИ (№ 04-04-48817, № 07-04-00224).

Литература

1. Berridge M.J.: *Neuron* **21**, 13–26 (1998)
2. Rizzuto R., Pozzan T., Carafoli E.: *Trends Pharmacol. Sci.* **23**(8), 348–350 (2002)
3. Костюк П.Г.: Кальций и клеточная возбудимость. М.: Наука 1986. 255 с.
4. Brini M., Carafoli E.: *Cell. Mol. Life Sci.* **57**, 354–370 (2000)
5. Kubista H., Donato R., Hermann A.: *Neurosci.* **90**, 493–508 (1999)
6. Shtark M.B., Gainutdinov Kh.L., Khichenko V.I., Shevchuk E.V., Starostina M.V.: *Annals N.Y. Acad. Sci.* **496**, 405–415 (1987)
7. Jankovic B.D.: *Int. Rev. Neurobiol.* **26**, 249–314 (1985)
8. Гайнутдинов Х.Л., Заблочкин Д.П., Пономарёв В.Н.: Докл. РАН **350**(4), 554–556 (1996)
9. Melani R., Rebaudo R., Balestrino M., Cupello A., Haglid K., Hyden H.: *Brain Res.* **840**(1–2), 171–177 (1999)
10. Штарк М.Б.: Мозгоспецифические белки (антигены) и функции нейрона. М.: Медицина 1985. 310 с.
11. Никитин В.П., Козырев С.А., Щевелкин А.В., Шерстнёв В.В.: Журн. высш. нервн. деят. **51**(1), 73–80 (2001)
12. Сахаров Д.А.: Генеалогия нейронов. М.: Наука 1974. 183 с.
13. Сахаров Д.А., Дьяконова Т.Л.: Докл. АН СССР **291**(1), 246–249 (1986)
14. Hermann A., Hartung K.: *Exp. Brain Res.* **14** (Proc. Symp. “Calcium electrogenesis and neuronal functions”), 124–138 (1986)
15. Heizmann C.W., Fritz G., Schafer B.W.: *Front. Biosci.* **7**, d1356–d1368 (2002)
16. Гайнутдинов Х.Л., Силантьева Д.И., Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В., Исмаилова А.И.: Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского 2005. Ежегодник, с. 167–172. Казань: ФизтехПресс 2006.
17. Donato R.: *Microsc. Res. Tech.* **60**, 540–551 (2003)
18. Zimmer D.B., Cornwall E.H., Landar A., Song W.: *Brain Res. Bull.* **37**, 417–429 (1995)
19. Weiger T.M., Hermann A., Levitan I.B.: *J. Comp. Physiol. A* **188**, 79–87 (2002)
20. Kubista H., Kerschbaum H.H., Hermann A.: *Brain Res.* **716**, 53–58 (1996)



Коллектив нашего института отпраздновал в начале февраля 2006 года 60 лет со дня образования физтеха. С какого дня отсчитывать возраст института – вопрос не однозначный. Мы за точку отсчёта взяли январь 1946 года, когда были изданы первые приказы по институту, и началась его реальная жизнь. К празднику готовились основательно и с вдохновением. К такому значительному событию было решено создать гимн, и был объявлен конкурс. Юбилей – это всегда подведение итогов. Прежде всего, было решено отметить сотрудников, внесших заметный вклад в развитие института. Дирекция и Учёный совет по этому поводу учредили Благодарственное письмо, и по решению Учёного совета оно было вручено

В. А. Голенищеву-Кутузову, М. М. Зарипову, С. Ф. Короткову, И. И. Пироговой и Т. А. Хлебниковой, Н. Р. Яфаеву. Кроме того, 34 сотрудника института были награждены Дипломом КФТИ. К юбилею физтеха был выпущен памятный значок.

Празднование было назначено на 8 и 9 февраля 2006 года. В эти дни состоялись следующие мероприятия: заседание выездной научной сессии Отделения физических наук, посвящённое 60-летию Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН; выездная сессия секции “Магнетизм” Научного совета РАН по физике конденсированных сред; торжественное заседание и праздничный фуршет.

Выездные научные сессии ОФН и секции “Магнетизм” Научного совета РАН по физике конденсированных сред

8 февраля в 14-00 состоялась выездная сессия секции “Магнетизм” Научного совета РАН по физике конденсированных сред, на двух заседаниях которой председательствовали учёный секретарь секции Александр Иванович Смирнов и Александр Алексеевич Маненков. Были представлены доклады:

- Валиев К.А. (Физико-технологический институт РАН, Москва): Квантовые компьютеры и квантовые вычисления.
- Маненков А.А. (Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва): Роль ЭПР в становлении и развитии квантовой электроники.
- Смирнов А.И. (Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва): Коллективные моды магнитного резонанса в спин-щелевых магнетиках.
- Кочелаев Б.И. (Казанский государственный университет, Казань): Эволюция антиферромагнитных купратов в высокотемпературные сверхпроводники.
- Гарифуллин И.А. (Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, Казань):



Проф., д.ф.-м.н. И. А. Гарифуллин рассказывает о своих научных результатах.



Академик В. Б. Тимофеев (ИФТТ РАН, Черноголовка) с большим воодушевлением представил новые, еще неопубликованные результаты.

Эффект близости сверхпроводник/ферромагнетик и его возможное использование в спинтронике.

- Тагиров М.С. (Казанский государственный университет, Казань), Жихарев В.А. (Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, Казань): Ежегодная Международная научная школа по магнитному резонансу (краткое сообщение). Все доклады вызвали большой интерес.

9 февраля в 9-00 состоялось заседание выездной научной сессии ОФН, посвящённой 60-летию Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН.

Были заслушаны доклады академика О. Н. Крохина (ФИАН, Москва) “50 лет квантовой электронике”, академика В. Б. Тимофеева (ИФТТ РАН, Черноголовка) “О бозе-конденсации межъямных экситонов в двойных квантовых ямах”, д.ф.-м.н. С. В. Чекалина (ИСАН, Троицк) “Уникальный фемтосекундный спектрометрический комплекс как инструмент для спектроскопии, фемтохимии и нанооптики” и члена-корр. РАН К. М. Салихова (КФТИ КазНЦ РАН, Казань) “Времяразрешенная ЭПР спектроскопия сильно неравновесных состояний, создаваемых в ходе спин-зависимых фотофизических и фотохимических процессов в конденсированных средах”.

Кроме докладчиков от ОФН, в Казань для участия в заседании приехали учёный секретарь ОФН РАН Виктор Анатольевич Заяц, главный специалист аппарата ОФН Марина Евгеньевна Швецова и директор отделения ФТТ Физического института им. П. Н. Лебедева Юрий Васильевич Копаев. Представители журнала “Успехи физических наук” приняли решение опубликовать все доклады, представленные на двух сессиях, в журнале УФН.

Торжественное заседание, посвящённое 60-летию КФТИ

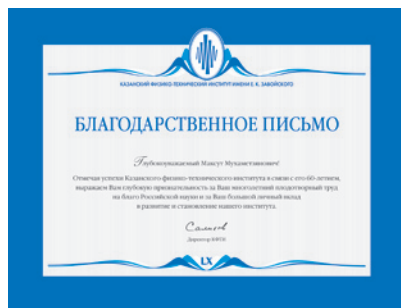
9 февраля в Национальном культурном центре “Казань” состоялось торжественное заседание, посвящённое 60-летию КФТИ. В зале присутствовали сотрудники и ветераны института, и наши гости из различных университетов, вузов, научно-исследовательских институтов и организаций. Среди них: первый заместитель Премьер-министра Республики Татарстан Равиль Фатыхович Муратов, министр образования и науки РТ Раис Фалихович Шайхелисламов, министр здравоохранения РТ Камилль Шагарович Зыятдинов, заместитель руководителя Исполнительного комитета муниципального образования г. Казани Зухра Нурулловна Нигматуллина. Наши гости из Москвы: член Бюро ОФН РАН, академик Олег Николаевич Крохин; член Бюро ОФН РАН, академик Владислав Борисович Тимофеев; академик Камилль Ахметович Валиев; первый заместитель директора Агентства по управлению имуществом РАН, член-корреспондент РАН Аркадий Владимирович Алексеев; член-корреспондент РАН Юрий Васильевич Копаев; учёный секретарь ОФН РАН Виктор Анатольевич Заяц, главный специалист аппарата ОФН РАН Марина Евгеньевна Швецова; профессор Александр Алексеевич Маненков; профессор Александр Иванович

Смирнов; профессор Сергей Васильевич Чекалин; генеральный директор Внешнеэкономического объединения “Внештехника” Павел Владимирович Забеднов и заместитель генерального директора ООО “Брукер” Сергей Валентинович Петров.

Сотрудникам института, Ляйле Васильевне Мосиной и Валерию Федоровичу Тарасову, выпала честь вести это торжественное заседание. В начале заседания директор института, член-корреспондент РАН Кев Минуллинович Салихов выступил с кратким докладом “60-летие КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН” (доклад приведен ниже). После доклада директор от имени администрации института вручил Благодарственные письма ветеранам физтеха.

Памятный значок к юбилею КФТИ, который получили все участники праздничных мероприятий.





Благодарственное письмо получили ветераны физтеха. Слева направо: Н. Р. Яфаев, В. А. Голенищев-Кутузов, М. М. Зарипов.

Благодарственное письмо ветерану института С. Ф. Короткову (справа) вручил К. М. Салихов (слева) 8 февраля.



От имени Президента и Правительства Республики Татарстан физтех поздравил первый заместитель Премьер-министра Республики Татарстан Равиль Фатыхович Муратов.

Академик Олег Николаевич Крохин поздравил сотрудников института от имени Российской академии наук и вручил грамоту РАН.

Зухра Нурулловна Нигматуллина, вице-мэр, поздравила институт от имени администрации г. Казани; председатель Казанского научного центра Российской академии наук, академик Александр Иванович Коновалов и директора институтов горячо поздравили физтеховцев от имени Президиума и институтов Казанского научного центра Российской академии наук.

Для поздравления от имени Академии наук Республики Татарстан и Отделения физики, астрономии и наук о земле Академии наук Республики Татарстан на сцену были приглашены Президент Академии наук Республики Татарстан, академик АН РТ Ахмед Мазгарович Мазгаров и академик-секретарь Отделения, академик АН РТ Наиль Абдуллович Сахибуллин.

Физтеховцы практически все – питомцы Казанского государственного университета, и особенно незабываемыми были поздравления от alma mater – декана физфака, профессора Альберта Варгановича Аганова.

Ректоры практически всех вузов Казани пришли, чтобы поздравить КФТИ и его сотрудников с юбилеем.



Р. Ф. Муратов (справа) вручает К. М. Салихову (слева) ключи от автомашины "Газель" в подарок физтеху от Правительства РТ.



Поздравление от имени Президиума и институтов КазНЦ РАН. Слева направо: Г. Стинский, К. М. Салихов, А. И. Коновалов.



К. М. Салихов (слева) принимает поздравления от А. В. Аганова (справа).



Звучит старинный русский романс “В лунном сиянии” в исполнении Зили Сунгатуллиной.



Поёт Марьям Фаттахова, дочь сотрудника института Я. В. Фаттахова.

Пришла поздравить КФТИ Зили Сунгатуллина, народная артистка Российской Федерации и Республики Татарстан, лауреат Государственной премии, заведующая кафедрой Казанской консерватории, профессор. Сотрудники института – давние поклонники её чарующего голоса.

Музыкальные поздравления прозвучали также в исполнении струнного ансамбля “Кантилена”, с которым наш институт связывает многолетняя дружба, профессора КГУ Фариды Каратаевой и Марьям Фаттаховой – лауреата первой премии московского международного кон-

курса “Открытая Европа” в номинации “академический вокал”.

В заключение торжественного заседания сотрудниками института и студентами кафедры химической физики был исполнен гимн физтеха, написанный специально к этому празднику (гимн приводится в разделе “Важнейшие события года”) и при этом все присутствующие встали.

Это было незабываемым событием!

Праздник был продолжен в менее формальной обстановке, где всем была предоставлена возможность высказать свои чувства и эмоции.



Звучит гимн физтеха.



Автор слов гимна КФТИ
Л. В. Мосина.



60-летие КФТИ им. Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН

Доклад директора института К. М. Салихова на торжественном заседании 9 февраля 2006 года

Добрый день, уважаемые коллеги и дорогие гости!
Добрый день, физтеховцы!

Шестьдесят лет Казанского физико-технического института – это самоотверженная работа нескольких поколений сотрудников института: научный поиск и его результаты, достижения и неудачи, радость открытия и горечь разочарования. Сегодня самое время обо всем этом говорить. Но, к сожалению, отведенное для выступления время не позволяет хотя бы упомянуть всё и всех достойных. Прошу простить, что я не смогу сделать это.

План моего выступления:

- С чего начинался КФТИ?
- 60 лет КФТИ с высоты птичьего полета.
- КФТИ в настоящее время.
- Что ждет КФТИ впереди?

Итак, начнем с начала.

Во время войны в 1943 году начали формулировать, как сказали бы сейчас, концепцию Казанского филиала Академии наук СССР. 13 апреля 1945 года Совет Народных Комиссаров СССР постановил создать Казанский филиал академии, состав которого был определен Постановлением Президиума АН СССР от 28 августа 1945 года. Среди других институтов был и ФТИ. В части ФТИ этим Постановлением был назначен и.о. директора член-корр. АН СССР Н. Г. Чеботарев и была утверждена структура КФТИ из четырех секторов.

В январе-феврале 1946 года были сформированы структура ФТИ и первое штатное расписание.



Директор-организатор КФТИ, член-корр. АН СССР Н. Г. Чеботарев.

Приказом по Казанскому филиалу АН СССР от 24 января 1946 года с 1 января 1946 года директором ФТИ был назначен Х. М. Муштари. Он был директором до 1972 г. Этим же приказом были назначены заведующие секторами ФТИ.

Приказом от 4 февраля 1946 года с 16 января 1946 года были сформированы штаты секторов: сектор математики (зав.: Н. Г. Чеботарев), сектор астрономии и геофизики (зав.: А. Д. Дубяго), сектор физики (зав.: Е. К. Завойский), сектор механики (зав.: Х. М. Муштари).

В 1991 году из КФТИ выделились в качестве самостоятельных Отдел энергетики и Институт механики и машиностроения.

Стартовый состав сектора физики:

1. Зав. сектором: проф. Е. К. Завойский.
2. С.н.с.: к.ф.-м.н. И. Г. Шапошников.
3. М.н.с.: к.х.н. Б. М. Козырев.
4. М.н.с.: к.ф.-м.н. С. Г. Салихов.
5. Ст. лаборант: В. К. Труфанова.

На 21 мая 1947 года сектор состоял из одного старшего научного сотрудника, трёх младших научных сотрудников, двух лаборантов и двух аспирантов.

В архиве института есть первый отчет Е. К. Завойского о работе сектора физики за январь-май 1946 года.* Позвольте зачитать часть этого отчета.

За отчетный период работа сектора проходила в очень трудных условиях: нет помещения и недостаточно оборудования и литературы... Несмотря на это, сектор провел значительную работу...

1. Выполнена работа "Измерение магнитной восприимчивости парамагнетиков на дециметровом диапазоне" (Е. Завойский), которая сдана в журнал *J. of Physics* и *ЖЭТФ*.
2. С.н.с. И. Шапошников, м.н.с. Б. Козырев и ст. лаборант В. Труфанова закончили перевод с английского книги Казимира по парамагнетизму.
3. И. Шапошниковым подготовлена к печати работа по термодинамической теории парамагнитной релаксации.
4. М.н.с. С. Салихов заканчивает работу по измерению магнитноспинового резонанса в области волн от 30 см до 500 см.
5. М.н.с. Б. Козырев ведет работу по измерению абсорбции в параллельных полях. Работа не закончена и продолжается.

* Архив КФТИ, ф. 4, оп. 1, д. 2, л. 21 об.



Директор КФТИ проф. Х. М. Мушгари, член-корр. АН СССР Б. М. Козырев, проф. С. Г. Салихов, проф. М. С. Корнишин, проф. Н. С. Гарифьянов.

6. Сектором ведется важная работа на одном из местных авиационных заводов. В работе участвуют Е. Завойский, С. Салихов, И. Шапошников, С.-Х. Кашаев и доцент КХТИ Н. Залесский.
7. Сектором совместно с кафедрами физики КГУ систематически 1 раз в неделю проводится научный семинар по общим проблемам физики и вопросам парамагнетизма. В работе участвуют сотрудники других вузов г. Казани (КАИ, КХТИ, и др.)."

8.06.46.

Зав. сектором проф. Е. К. Завойский.

Добавлю от себя, что сотрудники физтеха параллельно преподавали в КГУ.

Я думаю, это замечательный и поучительный отчет.

С таким отчетом сектор физики очень хорошо смотрелся бы и сегодня. Действительно, мы видим, с самого начала Е. К. Завойский организовал работу сектора физики так, что в ней сочетались фундаментальные исследования, решение практических задач, ориентированных на регион (хотя это слово тогда еще не употребляли) и самое тесное взаимодействие с вузами.

Вся последующая история физтеха – это гармоничное поступательное движение по этим трем степеням свободы: фундаментальное исследование, применение научных знаний для решения практических задач и образовательная деятельность (связь с вузами).

Я считаю важным это подчеркнуть, так как сегодняшние призывы реформирования академической науки на мой взгляд, по сути то же самое, что ломиться в открытую дверь. Свою ответственность перед обществом учёные осознавали тогда и осознают сейчас.

Посмотрим на 60 лет физтеха с высоты птичьего полета.

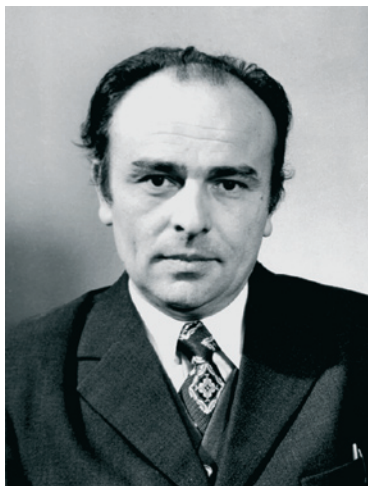
В 1947 году Е. К. Завойский переехал в Москву. Но он никогда не терял связи с Казанью, с физтехом.

В 1947 году пришлось уехать из Казани И. Г. Шапошникову в Пермь, где он создал известную школу ЯКР.

Работы по радиоспектроскопии в КФТИ возглавил Б. М. Козырев (член-корр. АН СССР, зав. лаб. радиоспектроскопии (1947–1979 гг.)).



Академик АН СССР Е. К. Завойский



Директор КФТИ (1972–1988 гг.)
член-корр. АНТ М. М. Зарипов



Проф., д.ф.-м.н. У. Х. Копвиллем



Член-корр. АНТ И. А. Сафин

В кратком выступлении можно отметить следующие важнейшие результаты и имена учёных института.

С участием Б. М. Козырева:

- в 1947 г. впервые наблюден спектр ЭПР свободных радикалов (соавтор – С. Г. Салихов);
- в 1957 г. измерен магнитный момент ядра ^{57}Fe (соавторы – Н. С. Гарифьянов, М. М. Зарипов);
- в 1960 г. сделано первое наблюдение ЭПР в щелочных металлах (соавторы – Н. С. Гарифьянов, А. В. Ильясов).

Я слышал такую историю. В 50-60-е годы в США перепроверяли спектры ЭПР, опубликованные в СССР. Но спектры ЭПР Н. С. Гарифьянова не подвергались сомнению.

С 1948 по 1953 гг. в КФТИ по совместительству работал член-корр. АН СССР С. А. Альтшулер. Большинство физиков в Казани – либо прямые ученики, либо внучатые ученики Семёна, как мы его называли за глаза. В 1948 г. он предложил провести в ФТИ исследование

спектров ЭПР в растворах солей Mn^{2+} . В том же году в работе С. А. Альтшулера, Б. М. Козырева и С. Г. Салихова сообщалось о наблюдении эффекта сверхтонкого взаимодействия в этих спектрах.

В 50-е годы прошлого века сотрудником ФТИ был академик К. А. Валиев. В это время был предложен механизм Альтшулера-Валиева релаксации парамагнитных комплексов.

Проф. У. Х. Копвиллем создал отдел квантовой акустики. В 1962 году проф. У. Х. Копвиллем и проф. В. Р. Нагибаров теоретически предсказали фотонное эхо. Сейчас оптическая эхо-спектроскопия – целое направление в науке. В этой области больших успехов добились академик РАЕН В. В. Самарцев и дважды лауреат Государственной премии СССР Е. И. Штырков.

Д.ф.-м.н. И. А. Сафин заведовал лабораторией ядерного магнетизма в период с 1973 по 1988 гг. Он впервые в мире осуществил эксперимент по импульсному ЯКР.



Академик РАЕН А. Р. Кессель



Д.ф.-м.н. Э. Г. Харахашьян



Проф., д.ф.-м.н. Р. З. Бариев



Проф., д.ф.-м.н. Ю. В. Яблоков

Зав. отделом и лаб., член-корр. РАН,
ак. АН РТ И. Б. Хайбуллин

Проф., д.ф.-м.н. В. А. Голенищев-Кутузов

Проф. А. Р. Кессель был зав. отделом физики магнитных явлений (1983–1993 гг.), зав. лабораторией резонансных явлений (1993–2003 гг.). Создал теорию ядерного акустического резонанса.

И. А. Сафин и проф. А. Р. Кессель вместе с коллегами из физтеха им. А. Ф. Иоффе (Ленинград) открыли явление электроакустического эха (1970 г.).

Получение жидкого гелия в ФТИ в 1963 году сыграло важнейшую роль в развитии научных исследований в КФТИ. В этом огромная заслуга д.ф.-м.н. Э. Г. Харахашьяна, зав. лабораторией физики металлов в 1973–1982 гг. Под его руководством впервые наблюден спектр ЭПР в сверхпроводниках, электронное спиновое эхо в металлах.

Яркой звездой в науке был д.ф.-м.н. Р. З. Бариев. Его достижения связаны с анализом точно решаемых моделей.

Заметный след в истории физтеха оставили д.ф.-м.н. А. И. Ривкинд (1947–1973), зав. лабораторией ядерного

магнетизма в 1965–1973 гг.; проф. Г. С. Салехов, зав. отделом математики в 1947–1971 гг.; проф. М. С. Корнишин, зав. отделом теории оболочек в 1976–1987 гг.

Крупные научные достижения связаны с именами проф. В. А. Голенищева-Кутузова (акустический парамагнитный резонанс) и проф. Ю. В. Яблокова (спиновые кластеры, эффект Яна-Теллера).

По инициативе Е. К. Завойского в КФТИ были начаты работы по ионной имплантации. Итог – открытие явления лазерного отжига имплантированных поверхностей. За эту работу совместно с коллегами из Новосибирского Академгородка И. Б. Хайбуллин, Е. И. Штырков, Р. М. Баязитов, М. Ф. Галяутдинов и М. М. Зарипов были удостоены Государственной премии СССР в 1988 году.

Можно продолжать галерею физтеховцев за 60 лет. Я хочу ограничиться еще только тремя предложениями. В разные годы в КФТИ работали 11 членов АН СССР и РАН: акад. АН СССР Е. К. Завойский (1946–1947); член-корр. АН СССР Н. Г. Чеботарев (1945–1947); член-

К.ф.-м.н. С. Ф. Коротков, заместитель директора КФТИ по науке
(с 1964 по 1989 гг.)К.ф.-м.н. Н. Р. Яфаев, учёный секретарь КФТИ
(с 1968 по 1988 гг.)

корр. АН СССР Б. М. Козырев (1946–1979); член-корр. АН СССР С. А. Альшулер (1947–1953); акад. АН СССР К. А. Валиев (1954–1957); акад. РАН В. Е. Алемасов (1987–1991); член-корр. РАН М. А. Ильгамов (1962–1991); член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин (с 1966); член-корр. РАН К. М. Салихов (с 1988); член-корр. РАН А. В. Алексеев (1966–1973); член-корр. РАН Д. А. Губайдуллин (1989–1991) [В скобках указаны годы работы в КФТИ].

В КФТИ с большим уважением помнят С. Ф. Короткова, который был и учёным секретарем (с 1962 по 1964 гг.) и зам. директора по науке (с 1964 по 1989 гг.). Почти 20 лет учёным секретарем института работал Н. Р. Яфаев (с 1968 по 1988 гг.).

Сегодняшний физтех – это в основном то, во что развился сектор физики Е. К. Завойского. Мы можем считать Евгения Константиновича Завойского основателем сегодняшнего физтеха.

Казанский физтех – лидер российской науки в области электронного парамагнитного резонанса, признанный в мире научный центр.

У нас в институте создан и работает единственный в мире ЭПР спектрометр субмиллиметрового диапазона с перестраиваемой частотой, разработанный В. Ф. Тарасовым и Г. С. Шакуровым. С помощью этой установки наши сотрудники получают уникальную информацию о новых лазерных материалах.

Одна из двух действующих в России установок время-разрешенного ЭПР создана и работает в КФТИ. Впервые экспериментально наблюден предложенный нами новый механизм поляризации электронных спинов триплетных экситонов в смешанных молекулярных кристаллах за счёт их взаимной аннигиляции (К. М. Салихов, В. К. Воронкова). Реализована новая методика определения энергии обменного и диполь-дипольного взаимодействий ионов группы железа с редкоземельными ионами.

Недавно мы получили замечательный импульсный спектрометр ЭПР EleXsys E580 производства фирмы Брукер. Пока в России такой прибор есть только у нас и в МГУ. Перед нами открылись совершенно новые горизонты. С помощью этого спектрометра мы планируем осуществить в ближайшие годы квантовую телепортацию на электронных спинах.

В нашем институте впервые в мире разработан алгоритм ЭПР томографии в проводящих материалах, впервые ЭПР томографией визуализирован скин-слой в графите (К. Л. Аминов, М. П. Цейтлин, К. М. Салихов).

В КФТИ 12 спектрометров ЭПР в настоящее время в полном рабочем состоянии и на них ведутся исследования по физике конденсированного состояния, спиновой химии, материаловедению, медицинской физике.



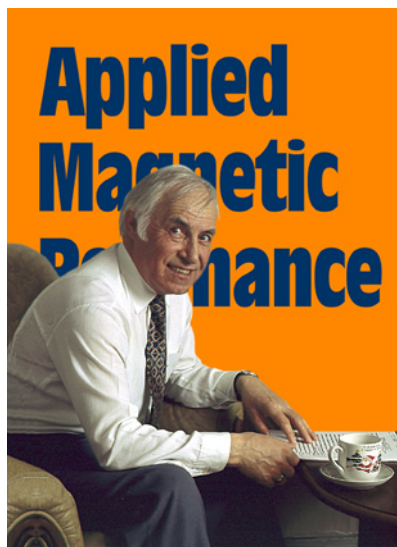
Зам. директора, зав. лабораторией радиоспектроскопии диэлектриков В. Ф. Тарасов (слева) и аспирант А. А. Коновалов (справа).



В. К. Воронкова, к.ф.-м.н., учёный секретарь.



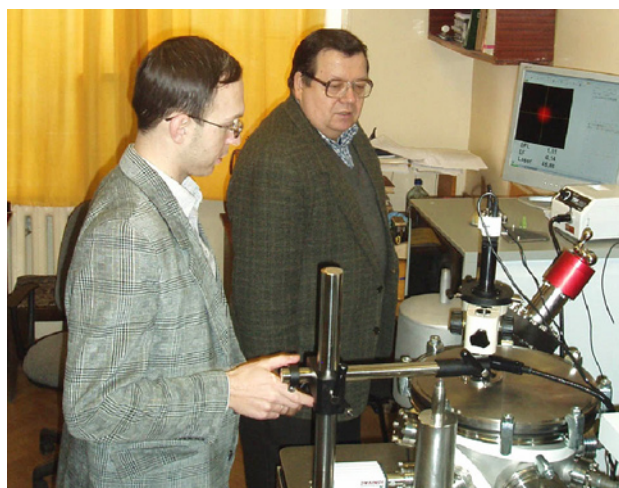
Осваиваем EleXsys E580. Слева направо: аспирант Р. Б. Зарипов, дипломник А. А. Суханов, м.н.с. Л. В. Мингалиева.



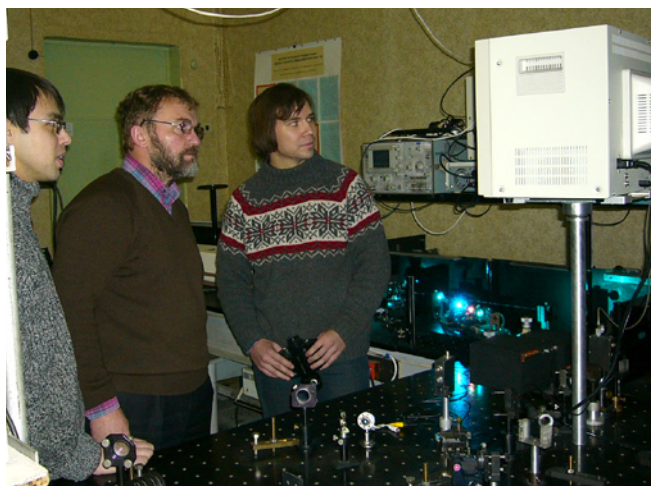
Член-корр. РАН К. М. Салихов, главный редактор журнала “Applied Magnetic Resonance”.



Проф., д.х.н. Ю. Г. Галяметдинов



Д.ф.-м.н., заведующий лабораторией физики и химии поверхности А. А. Бухараев (справа) и м.н.с. П. А. Бородин.



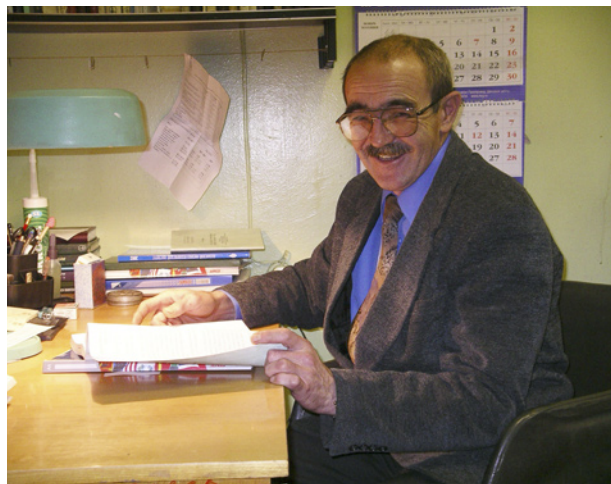
К.ф.-м.н. В. С. Лобков (второй слева), руководитель группы фемтосекундной спектроскопии с сотрудниками.

Свидетельством лидирующей роли КФТИ в области ЭПР может служить и то, что с 1990 года институт издает международный журнал “Applied Magnetic Resonance”. В мире немало журналов по магнитному резонансу. Наш журнал отличается от всех тем, что в нем вес работ по ЭПР выше, чем в других журналах. Само собой получается, что нам шлют свои работы представители ЭПР сообщества. И это можно понять. Ведь наш журнал издается институтом имени Е. К. Завойского, первооткрывателя ЭПР. С 1990 года уже вышло 112 выпусков журнала. Среди авторов опубликованных работ учёные 39 стран мира. Меня вдохновляет, что учёные из Новой Зеландии, Южной Африки, Германии, США, других стран мира посылают рукопись своей работы именно в Казань, в физтех! Пусть все рукописи будут в гости к нам!

В физтехе впервые были синтезированы магнитные жидкие кристаллы, была получена рекордная анизотропия магнитной восприимчивости (И. В. Овчинников, Ю. Г. Га-



Проф., д.ф.-м.н. И. А. Гарифуллин



Д.ф.-м.н. М. М. Шакирзянов, заведующий лабораторией магнитоакустики.

ляметдинов). Если говорить о последних достижениях в этом направлении, надо отметить первый синтез жидких кристаллов со спин-переменными свойствами.

Очень успешно развивается в физтехе атомно-силовая микроскопия, нанометрология. Атомно-силовая микроскопия позволяет нам получить пространственное разрешение в масштабе молекул, т.е. миллиардной доли метра. Отмечу только один результат последних двух лет – в группе А. А. Бухараева впервые в России получен наноконтакт с гигантским эффектом магнитосопротивления 1000%.

Фемтосекундная спектроскопия позволяет нам в реальном времени наблюдать колебания атомов в молекулах. Отмечу, что фемтосекунда – это одна миллиардная доля микросекунды! В прошлом году мы впервые наблюдали фотонное эхо в полимерных композитах при комнатной температуре (В. С. Лобков). Это важный результат с точки зрения создания элементов оптической памяти.



Проф., д.ф.-м.н. В. В. Самарцев, заведующий лабораторией нелинейной оптики.



Проф., д.ф.-м.н. И. В. Овчинников, заведующий лабораторией молекулярной радиоспектроскопии.

Весьма амбициозный проект реализует физтех по созданию спинового клапана на многослойных системах ферромагнетик-сверхпроводник-ферромагнетик (И. А. Гарифуллин). Эта работа ведется в кооперации с немецкими учёными и проф. Л. Р. Тагировым из КГУ.

Заведующие лабораториями – это ведущие учёные института. О работе каждой лаборатории можно было бы рассказать немало интересного. Об этом свидетельствует краткий перечень проблем, которые изучают наши учёные:

Синтез и исследование новых перспективных материалов. Наноструктуры.

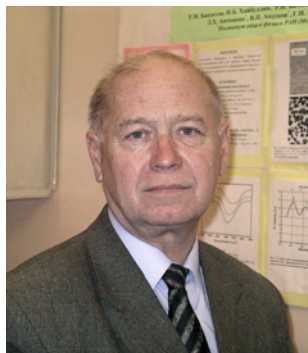
- Спин-переменные жидкие кристаллы.
- Полимерные композиты для оптоэлектроники.
- Модификация полупроводниковых и полимерных материалов ионной имплантацией.
- Углеродные нанотрубки.
- Низкоразмерные системы.



Проф., д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум, заведующий лабораторией физики перспективных материалов.



К.т.н. С. К. Черников,
заведующий лабораторией
моделирования физико-
химических процессов
и систем.



Д.ф.-м.н. Р. М. Баязитов,
заведующий лабораторией
интенсивных радиационных
воздействий.



Проф., д.б.н.
Х. Л. Гайнутдинов,
заведующий лабораторией
биофизики.

- Никелевые наноконтакты, обладающие магнеторезистивными свойствами.

Исследование свойств перспективных материалов. Спинтроника.

- ВТСП-соединения с фазовым расслоением (страйп-фазой).
- Мультислойные системы.
- Спиновые кластеры.
- Спин-зависимые фотоиндуцированные процессы.

Динамика. Квантовая когерентность.

- Быстропротекающие молекулярные процессы с разрешением во времени от наносекунд до фемтосекундного диапазона.
- Спиновая динамика короткоживущих активных парамагнитных частиц.
- Когерентное распространение фононов.

Суммируя, можно сказать, что в физтехе ведутся актуальные исследования по перспективным материалам, по спинтронике, по молекулярной и спиновой когерентности. Эти работы имеют общий вектор развития. Ориентиром для нас является молекулярная электроника. Это то, к

чему мы стремимся. Довести свои исследования до практического выхода – вот задача учёных физтеха.

Знания и опыт, полученный в работе по ионной имплантации, позволил нашим учёным (И. Б. Хайбуллин) внедрить в ГИПО новую технологию при изготовлении дифракционных решёток.

Опыт по магнитному резонансу помог нам разработать магнитно-резонансный томограф. Томограф получил



Медицинский томограф ТМР-0.06-КФТИ.



Д.ф.-м.н. В. Ю. Петухов, заведующий лабораторией
радиационной химии и радиобиологии.



Зав. отделом медицинской физики Я. В. Фаттахов (второй слева) с аспирантом Э. Ф. Биктимировым (слева) и м.н.с. Д. Ю. Талановым (справа).



На кафедре химической физики.



Д.ф.-м.н. Х. Г. Богданова с учениками.

сертификат Минздрава России и уже используется в медицинской практике.

Весьма важные работы ведутся по компьютерному моделированию в машиностроении.

Достижения физтеха не остались незамеченными. За последние годы четырежды работы, выполненные в КФТИ были удостоены Государственной премии Республики Татарстан в области науки:

- Разработка научных основ технологии изготовления голограммных дифракционных решёток и внедрение её в серийное производство в ГИПО (1998, И. Б. Хайбуллин, И. А. Файзрахманов и сотрудники ГИПО).
- Спиновая динамика элементарных физико-химических процессов (1998, К. М. Салихов).
- Создание магнитных жидких кристаллов (2001, И. В. Овчинников, Ю. Г. Галяметдинов, И. Г. Бикчантаев, Г. И. Иванова).
- Создание магнитно-резонансного томографа в поле 60 мТл (2005, Я. В. Фаттахов, К. Л. Аминов, В. Н. Анашкин, А. Р. Фахрутдинов, В. А. Шагалов и наши партнеры).

Первостепенное внимание мы уделяем образовательной деятельности и подготовке молодых учёных. При КФТИ работает базовая кафедра химической физики физфака КГУ. У нас создан филиал кафедры Казанского технологического университета. С моей точки зрения, физтех весьма активно взаимодействует с вузами. На этом заседании присутствуют руководители вузов Казани, и было бы интересно услышать, как они оценивают наше взаимодействие.

В юбилей принято пытаться заглянуть в завтрашний день. Конечно, это нелегко сделать, так как очень и очень многое зависит не от Казанского физтеха. Но я думаю, что мы можем с оптимизмом смотреть в завтрашний день физтеха. Мой оптимизм основан на следующем:

Во-первых, у нас есть высококвалифицированные учёные, которые имеют перспективный научный задел.

Во-вторых, у нас есть немало современного научного оборудования, и ситуация развивается в этом отношении в нужном направлении.

В-третьих, у нас есть молодые сотрудники, которые умеют и хотят работать.

И наконец, у нас есть поддержка. Об этом убедительно свидетельствует присутствие на нашем празднике и руководства Республики Татарстан, и руководства ОФН РАН, Президента АН РТ, директоров академических институтов и ректоров университетов, всех гостей.

Большое спасибо всем, кто сегодня пришёл сюда, чтобы порадоваться вместе с физтехом.

Хочу закончить своё выступление словами из гимна КФТИ:

*Живи и процветай, физтех!
Гордимся мы тобой всегда!
Мы преумножим твой успех,
Сил не жалея и труда!*

Казанский физтех не хочет испытывать судьбу. Но мы готовы к вызовам судьбы. Мы верим в наш успех.

Спасибо за внимание.

Поздравления, поступившие в адрес института в связи с 60-летием

Приветствие Президента Республики Татарстан М. Ш. Шаймиева в адрес участников торжественного собрания, посвящённого 60-летию Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН

Уважаемые сотрудники Казанского физико-технического института имени Е. К. Завойского!

Сердечно поздравляю вас со знаменательной датой – 60-летием образования института.

Созданный в трудные послевоенные годы, ваш институт вырос сегодня в многопрофильное исследовательское предприятие, эффективно сочетающее лучшие традиции казанской физической школы с современными технологиями, способное решать самые серьёзные задачи в области магнитной радиоспектроскопии.

На протяжении всего периода деятельности казанского физтеха в нём создавали и сегодня трудятся талантливейшие люди, уровень научных открытий которых обеспечивает быстрый рост авторитета института в мировом научном сообществе. Коллектив учёных-физиков поддерживает контакты с десятками крупнейших научных учреждений мира, вносит достойный вклад в развитие мировой научной мысли. Непрерывный научный поиск и внедрение новейших методов исследований, а также высокий профессионализм и компетентность руководителей и каждого специалиста института стали основой успеха вашего коллектива.

Искренне благодарю вас за ваши достижения, имеющие важнейшее прикладное значение, за реальный вклад в формирование имиджа Татарстана как центра большой науки и высоких технологий. От всей души желаю институту развития и процветания, коллективу – благополучия и новых научных свершений.

*Президент Республики Татарстан М. Ш. Шаймиев
7 февраля 2006 г.*

Правительственная телеграмма

Уважаемый Кев Минуллинович!

Искренне рад тепло и сердечно поздравить Вас и в Вашем лице весь преданный любимому делу коллектив высококлассных специалистов Физико-технического института со знаменательной датой в истории признанного мирового научного центра магнитной радиоспектроскопии.

Прошедшие шестьдесят лет в жизни Казанского физтеха – это трудная дорога поиска и смелых разработок, счастливая пора настоящего технического прорыва, выдающихся открытий и достижений, плодотворный период рождения новых имён блестящих физиков. Неслучайно сегодня институт остаётся ведущим центром отечествен-

ной и мировой физической науки с широким спектром исследовательских проблем и направлений работы.

Гордость института – вы, его сотрудники, обладающие мощным интеллектуальным потенциалом и заслужившие высокое признание в российском и международном научном сообществе. Ваши успешные теоретические и прикладные исследования существенно обогащают отечественную науку, имеют огромное практическое значение для развития современных технологий, передовых отраслей производства. Так держать, уважаемые физики! И пусть по-прежнему в Казанском физтехе царит особая атмосфера творчества и научного поиска. Доброго всем вам здоровья, семейного благополучия и новых открытий.

*Председатель Государственного совета
Республики Татарстан Ф. Х. Мухаметшин
7 февраля 2006 г.*

Поздравление директора Института прикладной физики РАН, члена-корреспондента РАН А. Г. Литвака, научного руководителя Института прикладной физики РАН, академика А. В. Гапонова-Грехова (г. Нижний Новгород)

Глубокоуважаемый Кев Минуллинович!

Примите самые искренние и тёплые поздравления от имени сотрудников Института прикладной физики РАН со славным юбилеем Казанского физико-технического института и Казанского научного центра РАН.

Начиная с основополагающих работ Е. К. Завойского, Ваш институт является признанным мировым лидером в области электронного парамагнитного резонанса и других методов магнитной радиоспектроскопии. Вашим сотрудникам принадлежат фундаментальные достижения в физике конденсированного состояния и химической физике. Ваш институт был создан на базе одного из наиболее известных и заслуженных вузов России – Казанского государственного университета. Выпускники КГУ и сотрудники Вашего института хорошо известны в стране и за рубежом. Издаваемые вами международные научные журналы также пользуются признанием и авторитетом в мировой науке.

Поздравляя Ваш коллектив с юбилеем, мы рады отметить наметившееся в последнее время научное сотрудничество наших институтов, которые могут удачно дополнять друг друга в ряде перспективных направлений физики.

В день юбилея желаем всем сотрудникам института и Вам лично крепкого здоровья, счастья и новых творческих успехов.

*Член-корреспондент РАН А. Г. Литвак,
академик А. В. Гапонов-Грехов
6 февраля 2006 г.*

*Поздравление от имени физического факультета
Казанского государственного университета декана
физфака, профессора А. В. Аганова*

Дорогие друзья!

Услышав слова “60 лет Физтеху” улыбнётся улыбкой Джоконды старый физтеховец, смахнет набежавшую слезу умиления. Вспомнятся старые добрые времена: обмен идеями, клистродами, украденными программами и прочими нужными для науки вещами. Вспомнятся новогодние вечера, когда, не догуляв в университете, душа и ноги сами стремились в Физтех на настоящие гуляния с танцами, симпатичными молодыми людьми и спиртом, разбавленным на 50% яблочным соком (рецепт Семёна Александровича Альтшулера).

А девушки Физтеха! Комсомолки, спортсменки, отличницы, красавицы наконец! Умны не по полу!

Где вы, былые времена, когда на конференциях единым строем физфаковцы и физтеховцы выступали и гуляли как былинные герои Запорожской Сечи. Гремела Казань на необъятных просторах Советского Союза от Черновицкого университета до Института океанологии во Владивостоке!

Невидимыми душевными нитями переплетены физфак и Физтех. Выходит с физфака молодой юноша с румяными щеками, обученный питомцами Альтшулера и Завойского, исчезает за дверями Физтеха и – посмотри на него через пару-тройку лет! Блеск интеллекта с энергией в несколько КЕВов, шляхетская уверенность во взоре, обучен и вооружён по самому последнему научному слову! Ноутбук на боку, загранпаспорт в кармане!

Оперился птенец и нет для него тайн ни в магнитном резонансе, ни в лазерной спектроскопии, готов он лететь на конференцию и в Сингапур, и в Швейцарию, готов достойно представить Физтех, что в Англии, что во Франции, не говоря уже о Германии и США. Везде примут питомца Физтеха!

Радует нас юбилей друзей, тем более, что различия-то между нами всего “на три буквы”. Цифра “три” магическая для нашего Отечества. “Троица” Андрея Рублёва, в нашем славном обычае – делить 0,5 на три. Короче, цифра “три” для нас, что-то вроде “золотого сечения” в математике и искусстве! Взяв словосочетание “ректор Салахов”, используя три буквы, получим “директор Салихов”, да и слова “физфак” и “физтех” отличаются тоже на три буквы!

Дорогой Физтех и дорогие физтеховцы!

Мы Вас любим, желаем здоровья, счастья и удачи!

*Ваш физфак
9 февраля 2006 г.*

*Поздравление директора фирмы Брукер БиоСпин,
доктора Т. Келлера; директора отделения ЯМР,
доктора Г.-Й. Вольфа; директора отделения ЭПР,
доктора Д. Шмальбайна (Райнштеттен, Германия)*

Глубокоуважаемый Кев Минуллинович, мы сердечно поздравляем Вас и всех сотрудников КФТИ с 60-летием Вашего Института, который носит имя выдающегося учёного, открывателя электронного парамагнитного резонанса, Евгения Константиновича Завойского.

60 лет – это хороший, солидный возраст для Института, а для нас большая честь и радость, что мы прошли с вами больше половины этого пути.

История фирмы Брукер в Советском Союзе начинается в Казани. Ведь в Вашем Институте в 1969 году после юбилейной конференции, посвящённой 25-летию открытия ЭПР, остался, а позднее был куплен первый спектрометр (тогда ещё совсем молодой) фирмы Брукер. Это был наш первый ЭПР спектрометр ER 420. Дальше были поставлены ЯМР спектрометры для твёрдого тела CXR и Avance.

Особенно радует нас, что именно Ваш Институт первым в России недавно получил самый современный импульсный спектрометр EleXsys E580. Мы надеемся, что он в опытных руках Ваших специалистов поднимет ЭПР на новые высоты и позволит Вам решить фундаментальные задачи физики и спиновой химии.

Мы восхищаемся Вашей энергией, с которой Вы создали международный журнал “Applied Magnetic Resonance” и который стал одним из признанных журналов в научном мире. Вы взялись за издание “EPR newsletter”, официального журнала Международного общества ЭПР – и он под опытным и талантливым руководством главного редактора стал ещё более информативным, живым, прекрасным местом общения для всех, кто занимается и любит ЭПР.

Ежегодное присуждение премии им. Е. К. Завойского является настоящим праздником для мирового общества ЭПР.

Вы утвердили и развили значение Казани как одного из мировых центров магнитного резонанса.

От всей души мы желаем Вам и Казанскому физико-техническому институту продолжения этих славных традиций и дальнейших творческих успехов в духе великого Е. К. Завойского.

Лично Вас, глубокоуважаемый Кев Минуллинович, мы благодарим за Ваше многолетнее доверие к нам. Мы желаем Вам и Вашим сотрудникам крепкого здоровья, удачи, счастья и много радости в личной жизни и при встречах с красотой и очарованием науки.

*Директор фирмы Брукер БиоСпин,
доктор Т. Келлер;
директор отделения ЯМР, доктор Г.-Й. Вольф;
директор отделения ЭПР, доктор Д. Шмальбайн
6 февраля 2006 г.*

Коллектив института с юбилеем поздравили также:

- Первый заместитель Премьер-министра, министр экономики и промышленности Республики Татарстан Б. П. Павлов.
- Заместитель Премьер-министра, министр культуры Республики Татарстан З. Р. Валеева.
- Министр образования и науки Республики Татарстан Р. Ф. Шайхелисламов.
- Министр здравоохранения Республики Татарстан К. Ш. Зыятдинов.
- Президент Академии наук Республики Татарстан, акад. АН РТ А. М. Мазгаров; главный учёный секретарь, акад. АН РТ И. Б. Хайбуллин.
- Руководитель исполнительного комитета г. Казани И. Р. Метшин.
- Директор Института общей физики им. А. М. Прохорова РАН, член-корр. РАН И. А. Щербаков (Москва).
- Директор Института кристаллографии РАН, член-корр. РАН М. В. Ковальчук (Москва).
- Директор Института спектроскопии РАН, проф. Е. А. Виноградов (Троицк).
- Директор Института физики твёрдого тела РАН, проф. В. В. Кведер; научный руководитель института, акад. Ю. А. Осипьян; акад. В. Б. Тимофеев; член-корр. РАН В. Ф. Гантмахер (Черноголовка).
- Директор Института физики полупроводников СО РАН, член-корр. РАН А. Л. Асеев; зам. директора, проф. А. В. Двуреченский; зам. директора, проф. Н. А. Овсяк (Новосибирск).
- Директор Института физики микроструктур РАН, член-корр. РАН С. В. Гапонов (Нижний Новгород).
- Директор Института физики металлов УрО РАН, член-корр. РАН В. В. Устинов (Екатеринбург).
- Председатель Президиума и директор Института физики ДНЦ РАН, член-корр. РАН И. К. Камилов (Махачкала).
- Директор Института физики молекул и кристаллов УрО РАН, проф. В. А. Мазунов (Уфа).
- Завойская Наталья Евгеньевна, дочь Е. К. Завойского, научный сотрудник РНЦ “Курчатовский институт” (Москва).
- Председатель Президиума КазНЦ РАН, акад. А. И. Коновалов; главный учёный секретарь Г. В. Стинский.
- От имени коллектива Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН: акад. А. И. Коновалов; директор, член-корр. РАН О. Г. Синяшин; зам. директора, д.х.н., проф. В. С. Резник; зам. директора, д.х.н., проф. А. А. Бредихин;
- зам. директора, к.х.н. Ю. Б. Михайлов; учёный секретарь, к.х.н. И. П. Романова.
- Директор Казанского института биохимии и биофизики КазНЦ РАН, член-корр. РАН А. Н. Гречкин; акад. И. А. Тарчевский; зам. директора, д.б.н. В. М. Чернов; учёный секретарь, к.б.н. И. Ю. Карпилова.
- Директор Института механики и машиностроения КазНЦ РАН, член-корр. РАН Д. А. Губайдуллин.
- Директор Исследовательского центра проблем энергетики КазНЦ РАН, акад. В. Е. Алемасов; член-корр. РАН Ю. Г. Назмиев.
- Директор Института языка, литературы и искусства им. Г. Ибрагимова АН РТ, проф. Н. Ш. Хисамов.
- Председатель Совета ректоров вузов РТ, ректор Казанского государственного университета, акад. АН РТ М. Х. Салахов.
- Ректор Казанской государственной медицинской академии, академик-секретарь Отделения медицинских и биологических наук АН РТ, проф. М. К. Михайлов.
- Ректор Казанского государственного энергетического университета, проф. Ю. Я. Петрушенко.
- Ректор Казанского государственного технологического университета, акад. АН РТ С. Г. Дьяконов.
- Генеральный директор ФГУП “НПО ГИПО”, проф., действ. член Российской академии инженерных наук им. А. М. Прохорова В. П. Иванов.
- Начальник коллектива группы ядерно-магнитного резонанса НТУ ООО “ТНГ-Групп” В. М. Мурзакаев (Бугульма).
- Директор Казанского Дома учёных И. С. Донская.
- Учащиеся и педагоги Академического лицея им. Н. И. Лобачевского.

АСПИРАНТЫ И МОЛОДЫЕ УЧЁНЫЕ

Аспирантура

В 2006 году аспирантуру закончили 3 человека:

1. Арсланов Наркис Мусавинович
2. Ириняков Евгений Николаевич
3. Хусаинов Марат Мансурович

В 2006 году в аспирантуру поступили 6 человек:

1. Галявиев Ильнар Гарафетдинович
01.04.17 “Химическая физика, в т.ч. физика горения и взрыва”,
руководители д.ф.-м.н. Салихов К.М.,
к.ф.-м.н. Лобков В.С.
2. Июдин Василий Сергеевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель д.ф.-м.н. Салихов К.М.
3. Калашников Дмитрий Андреевич
01.04.05 “Оптика”,
руководитель д.ф.-м.н. Самарцев В.В.
4. Леонтьев Андрей Владимирович
01.04.05 “Оптика”,
руководитель к.ф.-м.н. Лобков В.С.
5. Салихов Руслан Ильгизович
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководитель д.ф.-м.н. Гарифуллин И.А.
6. Суханов Андрей Анатольевич
01.04.11 “Физика магнитных явлений”,
руководители д.ф.-м.н. Салихов К.М.,
к.ф.-м.н. Воронкова В.К.

На 31.12.06 число аспирантов института с очной формой обучения составило 15 человек (аспирантов заочного обучения нет).

Премии и награждения

- Р. Г. Гатиятову, студенту кафедры химической физики КГУ, лаборанту лаборатории физики и химии поверхности КФТИ КазНЦ РАН, присуждена медаль и премия по итогам конкурса 2006 года “На соискание медалей Российской академии наук с премиями для молодых учёных РАН, других учреждений, организаций России и для студентов высших учебных заведений России за лучшие научные работы” в области разработки или создания приборов, методик, технологий и новой научно-технической продукции научного и прикладного значения за работу “Прецизионные измерения магнитострикции в никелевых структурах, используемых для получения магниторезистивных наноконтактов”.
- Калинин А.А., Баталов Р.И., Петрушкин С.В. стали победителями Программы “Выдающиеся учёные РАН” (Фонд содействия отечественной науке) в номинации “Кандидаты наук РАН” на 2006 год.
- Житейцев Е.Р. стал лауреатом стипендии КФТИ им. Б. М. Козырева среди молодых учёных 2006 года.
- Яцык И.В. стал лауреатом стипендии КФТИ им. Н. С. Гарифьянова среди аспирантов 2006 года.
- Гатиятова Ю.И. награждена Дипломом от Оргкомитета I Всероссийской конференции “Физические и физико-химические основы ионной имплантации” за доклад “Исследование магнитных свойств корунда (Al_2O_3), имплантированного ионами кобальта”.



Медаль Российской академии наук (аверс и реверс) “За лучшую научную работу конкурса РАН для студентов вузов России”.

Гранты

Победители конкурса на соискание грантов

Президента РФ для поддержки молодых российских учёных – кандидатов наук и их научных руководителей на 2006–2007 гг.

1. Баталов Р.И.: Формирование светоизлучающих в области 1.5 мкм кремниевых тонкоплёночных структур и исследование их электрических и люминесцентных свойств (МК-3048.2006.2)
2. Герасимов К.И.: Магнитооптическая спектроскопия диэлектрических кристаллов, активированных редкоземельными ионами (МК-3475.2006.2)

Победители конкурса на соискание грантов для государственной поддержки молодых учёных Республики Татарстан

1. Хантимеров С.М., аспирант: Применение топливных элементов в качестве резервных источников питания особо ответственных механизмов собственных нужд электрических станций (№ 09-8)

Победители конкурса для молодых учёных и аспирантов “Гранты КФТИ”

1. Власова Д.Д.: Кодовое разделение каналов в оптической памяти на основе долгоживущего фотонного эха
2. Никифоров В.Г.: Исследование вращательной динамики молекул в жидкости методами фемтосекундной спектроскопии

Победители конкурса молодёжных грантов НОЦ КГУ “Материалы и технологии XXI века” 2005–2006 гг.

1. Арсланов Н.М.: Моделирование эванесцентного светового поля в ближней зоне зонда и поверхности в технике ближнеполевой оптической микроскопии
2. Баталов Р.И.: Формирование гетероструктур на основе соединений кремния и исследование их люминесцентных свойств в видимой и ближней инфракрасной области

Кев Минуллинвич Салихов. К 70-летию со дня рождения*

3 ноября 2006 г. исполняется 70 лет члену-корреспонденту Российской академии наук Кеву Минуллинвичу Салихову – директору Казанского физико-технического института имени Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН, известному специалисту в области химической физики.

К. М. Салихов окончил физико-математический факультет Казанского государственного университета и как аспирант КГУ был прикомандирован в Институт высокомолекулярных соединений (ИВС) АН СССР в Ленинграде. В 1963 г. в ИВС АН СССР он защитил кандидатскую диссертацию “Некоторые вопросы молекулярной теории диэлектрических и механических релаксационных свойств полимеров” (научные руководители: М. В. Волькенштейн и Ю. Я. Готлиб). В конце 1963 г. он переехал в Новосибирский Академгородок и был принят на работу в Институт химической кинетики и горения Сибирского отделения АН СССР в лабораторию В. В. Воеводского. В 1988 г. К. М. Салихов был избран директором Казанского физико-технического института имени Е. К. Завойского (КФТИ) КазНЦ РАН и переехал в Казань. В 1997 г. он был избран членом-корреспондентом РАН по отделению физических наук.

К. М. Салихов внёс крупный вклад в изучение спинового обмена, в развитие электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), в создание и развитие спиновой химии и в исследование первичных стадий ассимиляции солнечной энергии при фотосинтезе.

К. М. Салихов внёс основополагающий вклад в теорию гейзенберговского спинового обмена в разбавленных парамагнетиках. Он предложил кинетические уравнения для описания спинового обмена при столкновении парамагнитных частиц в растворах и с их помощью рассчитал сечения спинового обмена с участием свободных радикалов, парамагнитных комплексов, триплетных экситонов, а также сечение обменной конверсии позитрония парамагнитными



Кев Минуллинвич Салихов

частицами, предсказал новый механизм сдвига линий ЭПР за счёт обменного взаимодействия. Эти результаты в основном были изложены в монографии К. И. Замараев, Ю. Н. Молин, К. М. Салихов: *Спиновый обмен* (М: Наука, 1977), а также вскоре были переведены на английский язык Yu. N. Molin, K. M. Salikhov, K. I. Zamaraev *Spin Exchange. Principles and Applications in Chemistry and Biology* (Heidelberg, Berlin: Springer-Verlag 1980).

К. М. Салихов заложил основы теории импульсных методов ЭПР. Теоретически показал возможность наблюдения модуляции сигнала электронного спинового эха в аморфных и поликристаллических веществах. Впервые изучил роль селективности возбуждения спиновой системы СВЧ импульсами, формирующими сигналы электронного спинового эха. Разработал теорию фазовой релаксации электронных спинов в твёрдых парамагнетиках за счёт диполь-дипольного взаимодействия между парамагнитными центрами: установил предельные законы спада сигналов эха по механизму спектральной диффузии, развил теорию спада сигналов эха по механизму так называемой “мгновенной диффузии”. Эти исследования были суммированы в монографии, написанной в соавторстве с А. Г. Семеновым и Ю. Д. Цветковым, *Электронное спиновое эхо и его применение* (М.: Наука 1976).

* Статья опубликована в журнале УФН 176, № 11, 1243–1244 (2006) и приводится с любезного разрешения редакции журнала.

К. М. Салихов дал интерпретацию первых экспериментальных наблюдений влияния внешнего магнитного поля на радикальные реакции и магнитного изотопного эффекта в радикальных реакциях. Он сформулировал общий формализм теории магнитно-спиновых эффектов в радикальных реакциях и с его помощью разработал теорию влияния внешних магнитных полей на радикальные реакции, теорию магнитного изотопного эффекта, теорию химической поляризации ядерных и электронных спинов в ходе химических реакций; теоретически предсказал экстремальный характер полевой зависимости вероятности рекомбинации радикальных пар, электрон-дырочных пар в области слабых магнитных полей, сравнимых с локальными полями, создаваемыми сверхтонкими взаимодействиями с магнитными ядрами; предсказал особенности в вероятности рекомбинации радикальных пар в точках пересечения их диабатических термов; установил основные закономерности химической поляризации ядерных спинов в слабых магнитных полях, теоретически предсказал эффект взаимного влияния ядер на их поляризацию; предсказал и заложил основы теории стимулированной поляризации ядерных спинов; дал теоретическую оценку максимально возможного вклада сверхтонкого взаимодействия в вероятность рекомбинации радикальных пар. Рассчитал вероятность рекомбинации радикальных пар с произвольным числом магнитных ядер в земном магнитном поле; внёс заметный вклад в теорию оптически детектируемых спектров ЭПР спин-коррелированных радикальных пар. Им предложен теоретически новый механизм поляризации электронных спинов триплетных состояний, вызванной спин-селективной взаимной аннигиляцией триплетных возбуждённых состояний. Рассмотрение вышеперечисленных вопросов было опубликовано в следующих изданиях: А. Л. Бучаченко, Р. З. Сагдеев, К. М. Салихов *Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях* (М.: Наука, 1978); К. М. Salikhov, Yu. N. Molin, R. Z. Sagdeev, A. L. Buchachenko *Spin Polarization and Magnetic Effects in Radical Reactions* (Budapest: Academic Kiado, 1984; Amsterdam: Elsevier, 1984); К. М. Salikhov *Magnetic Isotope Effect in Radical Reactions* (Wien, New York: Springer-Verlag, 1996); К. М. Салихов: 10 лекций по спиновой химии (Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000).

К. М. Салихов развил теорию времяразрешенных спектров ЭПР и теорию электронного спинового эха электрон-дырочных пар, которые образуются в реакционном центре фотосинтеза в синглетном состоянии. Для этой ситуации им предсказаны квантовые биения интенсивности линий ЭПР, аномальная фаза сигнала первичного спинового эха.

На посту директора Казанского физико-технического института К. М. Салихов проявил талант организатора науки. Благодаря неиссякаемой жизненной энергии юбиляра и его преданности науке, Казанский физико-технический институт сегодня, несмотря на трудные для российской науки годы, не только сохранил, но и существенно укрепил свои позиции как одного из ведущих центров по радиоспектроскопии. По инициативе К. М. Салихова и

при его непосредственном участии в КФТИ успешно развиваются исследования спин-зависимых фотохимических и фотофизических процессов, исследования по атомно-силовой микроскопии и по ЭПР томографии, фемтосекундной лазерной спектроскопии.

Под руководством К. М. Салихова реализуется программа развития магнитно-резонансной томографии. Опытные образцы томографа сертифицированы Министерством здравоохранения РФ и используются в медицинских учреждениях Татарстана.

К. М. Салихов уделяет большое внимание подготовке кадров. В 1989 г. он создал кафедру химической физики в КГУ. Он подготовил 19 кандидатов наук, среди его учеников 8 докторов наук.

К. М. Салихов является создателем и главным редактором международного журнала *Applied Magnetic Resonance*, членом редколлегии международного журнала *Molecular Physics Reports*.

Отличительной особенностью творчества К. М. Салихова является тесное взаимодействие с экспериментаторами. Полученные им результаты нередко стимулировали постановку новых экспериментов.

Написанные с его участием книги стали настольными для многих специалистов в нашей стране и за рубежом. За работы по магнитно-спиновым эффектам в химических реакциях в 1986 г. К. М. Салихов в коллективе авторов с Ю. Н. Молиным, Р. З. Сагдеевым, А. Л. Бучаченко, Е. Л. Франкевичем был удостоен Ленинской премии. В 1991 г. его избрали действительным членом Академии наук Республики Татарстан. В 1992 г. он был избран феллоу Института проблемных исследований в Берлине (Wissenschaftskolleg zu Berlin). К. М. Салихова в 1996 г. наградили Золотой медалью Международного общества ЭПР, присвоено почетное звание “Знаменитого учёного” в государственном исследовательском центре RIKEN в Японии, в 1998 г. он был удостоен Государственной премии в области науки и техники Республики Татарстан, в 2000 г. ему была присуждена премия Общества магнитного резонанса Австралии и Новой Зеландии. В 2001 г. ему присуждена премия фонда Александра фон Гумбольдта (Германия). К. М. Салихову присуждена Международная премия имени Е. К. Завойского 2004 года в области электронного парамагнитного резонанса.

К. М. Салихов активно участвует в научной жизни Татарстана. Он является заместителем председателя Казанского научного центра РАН, вице-президентом Академии наук Республики Татарстан, председателем секции по физике редакционной коллегии Татарской энциклопедии.

Коллеги, ученики и друзья поздравляют Кева Минулиновича с юбилеем и желают ему крепкого здоровья и новых творческих успехов.

Л. К. Аминов, А. Ф. Андреев, С. Н. Багаев,
К. А. Валиев, В. К. Воронкова, А. В. Ильясов,
Ю. Н. Молин, И. В. Овчинников, Р. З. Сагдеев,
В. Ф. Тарасов, И. Б. Хайбуллин, Ю. Д. Цветков

Репортаж с торжественного заседания, посвящённого 70-летию К. М. Салихова

3 ноября в Национальном культурном центре “Казань” состоялось торжественное заседание, посвящённое 70-летию Кева Минуллиновича Салихова.

В зале присутствовали сотрудники института, гости из различных университетов, вузов, научно-исследовательских институтов и организаций Казани, Москвы, Новосибирска, а также Австрии, Германии, Италии, Канады, Польши и Франции. Среди гостей были: член Бюро Отделения физических наук Российской академии наук, акад. С. Н. Багаев; акад. К. А. Валиев; советник Президента РТ, ректор Казанского технологического университета, проф. С. Г. Дьяконов; председатель Казанского научного центра РАН, акад. А. И. Коновалов; президент АН РТ А. М. Мазгаров; ректора вузов; министр экологии и природных ресурсов РТ И. А. Ларочкина; министр образования и науки РТ Р. Ф. Шайхелисламов; председатель комитета по науке, культуре, образованию и национальным вопросам Госсовета РТ Р. И. Валеев; председатель Торгово-промышленной палаты РТ Ш. Р. Агеев;



Кев Минуллинович Салихов

руководитель Управления по технологическому, экологическому и атомному надзору Ростехнадзора по РТ Б. Г. Петров; глава администрации Советского района г. Казани Д. Ш. Сулейманов; глава администрации Вахитовского района г. Казани Р. Р. Шакиров; депутат Госсовета РТ И. В. Терентьева; генеральный директор Казанского производственного комбината программных средств В. А. Александров; директор Института экологии природных систем АН РТ Р. А. Шагиморданов; генеральный директор ОАО “Радиоприбор”, депутат Госсовета Р. У. Апаков.

Вступительное слово произнёс академик К. А. Валиев (текст с небольшим сокращением приведён ниже).

С поздравлением от имени Президента Республики Татарстан и правительства Республики Татарстан выступил министр образования и науки Р. Ф. Шайхелисламов.



Сотрудники института,
Ляйля Мосина и Валерий Тарасов,
ведущие собрания.



В зале заседаний Национального
Культурного центра “Казань”.



Поздравление от имени правительства РТ зачитывает Р. Ф. Шайхелисламов (справа).



К. Мёбиус (справа) вручает поздравление К. М. Салихову (слева).

Академик С. Н. Багаев поздравил от имени Российской академии наук. Затем на сцену для краткого выступления пригласили юбиляра, Кева Минуллиновича Салихова (текст выступления приводится ниже).

От имени Президиума Казанского научного центра Российской академии наук юбиляра поздравил председатель Казанского научного центра Российской академии наук, акад. А. И. Коновалов; от имени Академии наук Республики Татарстан – Президент Академии наук Республики Татарстан, академик А. М. Мазгаров; от Сибирского отделения Российской академии наук – академик Р. З. Сагдеев, от Казанского государственного университета – проректор Н. К. Замов.

От имени Международного общества ЭПР выступил президент общества, проф. В. Любитц (Германия), от Международного комитета AMPERE – президент комитета в 2002–2006 гг., проф.

Х. В. Шписс (Германия), от Международного общества по магнитному резонансу – проф. К. Мёбиус (Германия). И в заключение торжественного заседания прозвучало музыкальное поздравление У. Айххофа, представителя фирмы Брукер БиоСпин (Германия), который для юбиляра исполнил опус 41 для флейты, виолончели и фортепиано Луизы Фарренц.

Праздник продолжался в менее формальной обстановке на фуршете, где всем желающим была предоставлена возможность высказать свои чувства и эмоции.



Флейта – доктор Уве Айххофф, виолончель – Народная артистка Республики Татарстан Лариса Маслова, фортепиано – Антон Семикин, лауреат международного конкурса.

К семидесятилетию Кева Минуллиновича Салихова

Доклад академика К. А. Валиева на торжественном заседании 3 ноября 2006 года

Уважаемые коллеги, друзья!

Сегодняшнее наше собрание посвящено 70-летию юбилею замечательного учёного-физика, действительного члена Академии наук Республики Татарстан, члена-корреспондента Российской Академии наук, доктора физико-математических наук, профессора, директора Казанского физико-технического института КазНЦ РАН Кева Минуллиновича Салихова.

Наш сегодняшний юбиляр является ярким представителем казанской школы физиков, основанной Евгением Константиновичем Завойским, работавшим в Казанском университете и Казанском физико-техническом институте. Юбилей такого крупного учёного, как Кев Минуллинович, уместно рассматривать на фоне научных событий в Казани, поскольку научные труды юбиляра составляют отныне неотъемлемую часть этой истории. Колыбелью науки в Казани явился Казанский университет, прославленный математической школой Николая Ивановича Лобачевского, химической школой Николая Николаевича Зинина (1812–1880) и Александра Михайловича Бутлерова (1828–1886), астрономической школой (М. А. Ковальский, Д. И. Дубяго), школами в области медицины (К. Ф. Фукс, В. М. Бехтерев, А. В. Вишневский), лингвистики (И. А. Бодуэн де Куртенэ), востоковедения (И. Н. Березин, В. П. Васильев).

Физические исследования в XIX веке велись в Казани в области метеорологии и климатологии, геофизики (И. И. Запольский, И. М. Симонов), теории относительности и гравитации (А. П. Котельников, А. З. Петров), электромагнитных явлений (А. С. Савельев, Д. А. Гольдгаммер, В. А. Ульянин).

Взрывное развитие физических исследований в Казани было инициировано открытием Евгением Константиновичем Завойским в 1944 году в Казанском университете явления электронного парамагнитного резонанса, т.е. спектроскопии конденсированных сред в радиочастотном диапазоне или радиоспектроскопии. Это открытие, а также вскоре сделанное в США открытие ядерного магнитного резонанса дало в руки исследователей новый универсальный метод исследования атомной структуры и кинетических процессов во всех материальных средах – твёрдых телах, жидкостях и газах. Казанскую школу радиоспектроскопии возглавляли после отъезда Е. К. Завойского в Москву (1947 г.) С. А. Альтшулер в Казанском университете и Б. М. Козырев в Физико-техническом институте. Наш юбиляр Кев Минуллинович Салихов окончил физмат КГУ и является прямым учеником С. А. Альтшулера. К. М. Салихов в течение 25 лет работал в Институте химической кинетики и горения СО АН



Выступает академик К. А. Валиев.

СССР. Его результаты в теории магнитных и спиновых эффектов в химических реакциях оказали существенное влияние на становление и развитие нового направления науки – спиновой химии. За эти работы К. М. Салихову и его коллегам была присуждена Ленинская премия 1986 года – высшее отличие для авторов научных достижений в СССР. Как я понимаю, спиновая химия является частью квантовой химии, т.е. теории, объясняющей химические процессы на основе квантовой физики. Носителями квантовых свойств в атомах и молекулах являются электроны. Они обладают спиновым моментом количества движения, равным половине постоянной Планка. Это обстоятельство делает электрон фермионом, т.е. частицей, подчиняющейся принципу запрета Паули: два электрона не могут быть в атоме или молекуле в одинаковых состояниях. Эти результаты объясняют заполнение электронных оболочек в атомах. Чудесным результатом квантовой теории атома является “естественное” получение периодической системы Менделеева.

Электронные орбиты в атомах в квантовой химии называются молекулярными орбитами, их заполнение также подчиняется принципу запрета Паули. Таким образом, развитая в работах юбиляра в 1963–1988 годах теория магнитно-спиновых эффектов в химических процессах относится к фундаментальным проблемам современной науки.

Вернувшись в 1988 году в Казань для работы в Казанском физтехе, Кев Минуллинович занялся теоретическими и фундаментальными исследованиями фотохимических процессов в фотосинтезе, этом фундаментальном процессе, лежащем в основе процессов жизни растений. Работа в этой области требует фемтосекундной шкалы времени, т.е. наблюдения процессов, происходящих за одну миллионную долю миллиардной доли секунды. Как ни удивительно, лазеры с фемтосекундной длительностью импульсов позволяют иметь такую шкалу времени в эксперименте. Кев Минуллинович прилагает

гигантские усилия, чтобы иметь такую технику в Казанском физтехе.

Я немного занял Ваше время, чтобы показать, что юбиляр ставит планку научных проблем на самом высоком мыслимом сегодня уровне. Он неоднократно и успешно выступал с докладами на эту тему на симпозиумах по квантовым вычислениям и информатике, которые мы проводим каждые два года в Москве (и, конечно, ещё много где). Придёт время, и история науки в Казани впишет результаты Кева Минуллиновича на свои скрижали.

Далее К. А. Валиев отметил научные достижения Кева Минуллиновича, его научно-организационные должности и награды.

Среди работ Казанского физтеха, носящих прикладной характер, отмечу работу по созданию низкополевого ЯМР-томографа для медицинских применений. По сложности как технического исполнения, так и информационного (программного) обеспечения разработка относится к самым сложным техническим системам. Прибор сканирует исследуемое тело, наблюдая менее одного кубического миллиметра во многих миллионах точек, и затем синтезирует детальное объёмное изображение органа тела. Эта работа Кева Минуллиновича и других членов коллектива разработчиков имела бы счастливый исход, если бы удалось серийно тиражировать прибор и занять свою нишу на рынке медицинских томографов.

Какие качества характерны для Кева Минуллиновича как учёного?

Прежде всего – глубина научных знаний. Ему свойственно не удовлетворяться приблизительным знанием научного предмета, а стремиться к пониманию до конца, до деталей. Часто, при обсуждении научных проблем на Учёном совете или семинарах участникам кажется, что всё понятно, но Кев Минуллинович задаёт вопрос – и становится ясно, что далеко не всё понятно. Лишь преодоление научного лабиринта до глубин основополагающих принципов удовлетворяет Кева Минуллиновича.

Глубина научного знания по узкой проблеме – качество многих настоящих учёных. Кев Минуллиновича отличает от них ширина глубоких научных познаний во многих далеко отстоящих разделах физики и физикохимии. Проблемы биологии, медицины и, даже, картографии также находятся в поле его интересов.

Замечательные качества глубины и широты научных знаний могут, в принципе, оставаться личным достоинством человека-интраверта. Но у Кева Минуллиновича деятельная инициативность – научная и организационная, сочетается с этими качествами. Инициативность Кева Минуллиновича в организационных вопросах выглядит порою элементом здравого авантюризма. Действительно, создать один из первых в России международный журнал, учредить международную премию, казалось бы, на пустом месте и целый ряд других инициатив многого стоят. Причём, опять чрезвычайно важно, что

эти инициативы доводятся до конца, являясь результатом большой активной работы.

Трудолюбие – следующее качество, позволяющее реализовать перечисленные выше достоинства. Для обсуждения любой научной проблемы у Кева Минуллиновича, при всей его занятости, отсутствует понятие лимита времени. Особенно это заметно при общении с молодёжью.

Как Прекрасный Учитель, Кев Минуллинович обладает способностью легко и просто объяснить студентам (да и не только им) самые сложные научные разделы, а своим энтузиазмом возбудить интерес к науке у молодёжи, в которую он верит, в которой видит будущее науки.

Наконец, я хочу отметить замечательное качество Кева Минуллиновича, которое, по-видимому, наиболее адекватно определяется как харизма. Это свойство означает, что люди испытывают к человеку необъяснимую симпатию (вообще объяснимую как раз поведением харизматика). Приведу пример из жизни Кева Минуллиновича. В 1997 году я стал Лауреатом премии им. Е. К. Завойского и в этом качестве был официально принят на малой Родине, в Мамадышском районе. В большом зале новой школы собрали районную общественность. Выступления идут, как обычно это принято. Но вот очередь Кева Минуллиновича. Он выходит к трибуне и говорит: “А я вам спою “Кара-урман”. И поёт. Встречают его замечательно. Тут выходит человек из зала и говорит: “Вы спели не тот мотив”, – и поёт на свой мотив. В результате всё мероприятие приобрело стихийно-демократический характер, и это было замечательно.

Разрешите мне, дорогие товарищи, завершить характеристику юбиляра Кева Минуллиновича, пожеланиями ему долгих лет творческой жизни, новых научных и научно-организационных успехов, во славу науки в г. Казани, в Республике Татарстан, в Российской Федерации и во всём мире тоже.

Благодарю за внимание.

Мне семьдесят?! Не могу поверить!

Выступление К. М. Салихова на торжественном заседании 3 ноября 2006 года

Дорогие гости, уважаемые коллеги, добрый день!

Я очень благодарен всем вам за то, что вы пришли сегодня сюда. Я всем вам желаю здоровья и удач в работе, в жизни. Жаль, что время не позволяет мне сказать слова благодарности всем, кому я бы хотел их сказать. Необъятное – не объять. Но я бы хотел назвать имена моих учителей и поприветствовать тех, кто приехал из других городов нашей страны и из других стран.

Спасибо моим родителям и замечательным школьным учителям. Я очень рад, что сегодня здесь мои сестра Галя, брат Риф и племянник Борис.

Конечно, с особой теплотой я думаю о своих однокурсниках. Я очень рад встретиться сегодня с Арнольдом Морочей, Ахатом Ильясовым, Германом Тептиным, Долей Гайнуллиной, Линаром Аминовым, Тамарой Каганович и Толей Леушиным. Я очень счастлив, что наша дружба с Линаром,

КГУ, физмат, группа 44-1. Первый ряд: крайний слева – Линар Аминов. Второй ряд: крайний слева – Герман Тептин, вторая справа – Доля Гайнуллина, крайний справа Кев Салихов. Четвёртый ряд: третий слева – Ахат Ильясов (1954–1959 гг.).



Ахатом и Долей никогда не прерывалась. Мы дружим семьями.

С глубокой благодарностью я вспоминаю одного из своих учителей в Казанском университете – Семена Александровича Альтшулера.

Следующая веха в моей жизни – аспирантура в Ленинграде. Там я выполнил и защитил кандидатскую диссертацию под руководством Михаила Владимировича Волькенштейна и Юлия Яковлевича Готлиба. Спасибо им!

25 лет я жил и работал в Новосибирском Академгородке. Мне опять повезло – я был принят на работу в лабораторию Владислава Владиславовича Воеводского. И я очень рад, что сегодня сюда приехала его дочь Марьяна. Сибирский период я мог бы обозначить очень кратко – это



Академик
В. В. Воеводский



Член-корр. АН СССР
М. В. Волькенштейн



Член-корр. АН СССР
С. А. Альтшулер



К. М. Салихов, М. Боуман (США) и Ю. Д. Цветков (слева направо).



Слева направо: К. М. Салихов, дочь Ася, жена Зоя Васильевна, сын Аким, теща Наталья Ивановна.

был один полет длиною в четверть века. Мне посчастливилось жить и работать со многими замечательными людьми. С благодарностью я думаю о сотрудничестве и дружбе с Юрием Цветковым. В лаборатории Цветкова стажировался Майкл Боуман. Мне очень приятно, что Майкл сегодня здесь. С особым энтузиазмом я думаю о нашей многолетней дружбе и совместном творчестве с Юрой Молиным и Ренадом Сагдеевым. Я всегда с благодарностью думаю о Жоре Жидомирове, Тане Лешиной, Саше Марьясове, Петре Пуртове, Фариде Сарварове, Саше Круппе, о многих коллегах и друзьях.

В Академгородке сложилась наша семья, мы с Зоей вырастили детей. В этом нам много помогла любимая теща-бабушка.

Давняя подруга нашей семьи Люся Лежейко приехала из С.-Петербурга. Из Новосибирска приехал Толя Гулин, с которым я жил в комнате №75 в общежитии КГУ на Красной позиции 6.

В Академгородок приезжало немало зарубежных коллег. Мы стали друзьями. Многие с радостью приветствовали бы сегодня здесь Роберта Каптейна из Голландии. Он прилетел, хотя был очень занят. Но, к сожалению, виза ошибочно была выдана с более поздней датой въезда в Россию и его не пропустили в аэропорту Казани через паспортный контроль. Не смогли приехать Наталья Евгеньевна Завойская и Барбара Айххофф, но Уве Айххофф прилетел. Спасибо ему и Барбаре за сердечное поздравление.

Если говорить о международном сотрудничестве, то для меня второй малой родиной стал Берлин. Около 25 лет я практически ежегодно бываю в Свободном университете Берлина. Несколько друзей сумели приехать: Дитмар Штелик и его супруга Бригитта, Клаус Мёбиус и его супруга Ута, Вольфганг Любитц, Ханс Мартин Фит, Герд Бунтковский, Арт Ван дер Ест и Ханс Вольфганг Шписс. Их приезд доставил мне огромную радость.

18 с половиной лет я живу и работаю в Казани. Кому-то может показаться, что это очень долго. У меня такое ощущение, что я приехал сюда совсем недавно. У меня появились новые друзья и много единомышленников.

В административной работе меня многие поддерживают, особенно хочу отметить Валерия Федоровича Тарасова, Виолету Константиновну Воронкову и Владимира Сергеевича Лобкова.



Мои коллеги из Академгородка, приехавшие в Казань. Слева направо: Лена Багрянская, Саша Марьясов, Кев Салихов, Сергей Дзюба, Таня Лешина, Пётр Пуртов, Жора Жидомиров.



В. С. и К. А. Валиевы и З. Д. Сунгатуллина (слева направо).



Ханс Мартин Фит (слева) и Арт Ван дер Ест (справа).

Журнал “Applied Magnetic Resonance” мы выпускаем в кооперации с издательством Шпрингер Вена-Нью Йорк. Я сердечно приветствую представителя этой компании Сильвию Шильгериус. Я очень благодарен моим коллегам и соратникам Ляйле Васильевне Мосиной и Сергею Михайловичу Ахмину за их самоотверженную работу в редакции журнала.

Я с удовольствием отмечаю, что с 2001 года мы выпускаем ежегодник КФТИ. Это подробная летопись жизни института, много работы, но результат радует.

Работа в АН РТ привела меня к активному участию в создании атласа Татарстана. Благодаря этой работе я сдружился со многими экологами Казани, многие сегодня пришли сюда. Спасибо, коллеги!

В становлении и развитии нашей базовой кафедры химической физики особенно большую роль играют Роза Мухамедовна Аминова, Сергей Андреевич Моисеев и Сурия Абдулбареевна Абдрахманова.

Отдельная эпопея – работа по созданию магнитно-резонансного томографа. Меня вдохновляет, что сегодня здесь есть и те, кто поддерживает эту работу и участвует в доведении её до практического применения. Я приветствую бывшего и нынешнего главного врача Тукаевской Центральной районной больницы в Набережных Челнах

Зиннура Муртазиновича Закирова и Галима Габбасовича Сабирзянова, соответственно, и главного врача ЦРБ Бугульмы Иршата Рашитовича Измайлова.

Невозможно перечислить, как много замечательных людей поддерживало и поддерживает меня, одаривает дружбой.

С большой благодарностью я думаю о Борисе Петровиче Захарчене. Он был другом всех физиков Казани.

Приехали наши земляки, которые живут и работают в Москве, но всегда и во всем поддерживают своих земляков-казанцев: Александр Алексеевич Маненков, Ренат Ибрагимович Жданов. Многих из нас связывает дружба с Камилем Ахметовичем Валиевым. Камиль Ахметович всегда с нами. Для меня он очень уважаемый старший брат. Спасибо ему и его супруге Венере Салыховне.

С Сергеем Николаевичем Багаевым меня связывает прежде всего Новосибирский Академгородок. Но по-настоящему мы подружились с ним в последние годы. И я очень рад, что он нашёл время приехать сегодня сюда.

Приятно отметить, что на сегодняшнем заседании присутствуют пять лауреатов Международной премии



Ута и Клаус Мёбиус.



Дитмар Штелик и его супруга Бригитта.



Члены клуба тюбетеечников из Берлина и Казани. Первый ряд (слева направо): Х.-М. Фит, В. Лозовая, Х. Куррек, К. Мёбиус. Второй ряд (слева направо): Д. Штелик, Дж. Шлюпман, П. Ягерман, В. Любитц и др.



Одним из первых членов клуба тюбетеечников стал Билл Мимс, первый Лауреат премии им. Е. К. Завойского.

им. Е. К. Завойского: Камиль Ахметович Валиев, Вольфганг Любитц, Клаус Мёбиус, Дитмар Штелик и ваш покорный слуга.

Многолетняя дружба связывает меня и физтех с замечательными артистами Зилей Сунгатуллиной и Ларисой Масловой. Они сегодня с нами, спасибо.

Я люблю удить рыбу. Я не очень часто бываю на рыбалке, но в мыслях, теоретически, я это делаю час-

то. У меня есть замечательный наставник – Владимир Юрьевич Петухов.

Мало кто, я думаю, знает, что я основал клуб тюбетеечников. Правда, рост числа членов клуба замедлился из-за резкого повышения цен на тюбетейки.

Всем и каждому присутствующему в зале – большое спасибо.

Будьте здоровы! Спасибо за внимание.

Поздравления, поступившие в адрес К. М. Салихова в связи с 70-летием

К. М. Салихова с юбилеем поздравили также:

- Первый заместитель Премьер-министра Республики Татарстан Р. Ф. Муратов.
- Председатель Государственного совета Республики Татарстан Ф. Х. Мухаметшин.
- Руководитель аппарата Президента Республики Татарстан Ю. З. Камалтынов.
- Заместитель руководителя аппарата Президента Республики Татарстан, начальник Управления по работе с территориями Б. Х. Зиннуров.
- Министр здравоохранения Республики Татарстан К. Ш. Зыятдинов.
- Министр образования и науки Республики Татарстан Р. Ф. Шайхелисламов.
- Министр экологии и природных ресурсов Республики Татарстан И. А. Ларочкина.
- Президент Академии наук Республики Татарстан, акад. АН РТ М. З. Мазгаров; главный учёный секретарь АН РТ, акад. АН РТ И. Б. Хайбуллин.
- Первый заместитель министра финансов Республики Татарстан, директор Департамента казначейства М. Ф. Шагитов.

- Руководитель Управления по технологическому и экологическому надзору Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору по Республике Татарстан Б. Г. Петров.
- Руководитель Федеральной службы по надзору в сфере здравоохранения и социального развития по Республике Татарстан Р. С. Сафиуллин.
- Член Совета Федерации от Республики Татарстан Э. С. Губайдуллин.
- Мэр г. Казани И. Р. Метшин.
- Руководитель Исполнительного комитета г. Казани М. Ф. Загидуллов.
- Управление здравоохранения Исполнительного комитета муниципального образования г. Казани В. Б. Зыятдинов.
- Глава администрации Советского района г. Казани Д. Ш. Сулейманов.
- Президент Российской академии наук, акад. Ю. С. Осипов; главный учёный секретарь РАН, акад. В. В. Костюк (Москва).
- Президент Российской академии медицинских наук РАН и РАМН, акад. РАН и РАМН М. И. Давыдов (Москва).
- Вице-президент РАН, акад. В. В. Козлов (Москва).
- Вице-президент РАН, директор Физического института им. П. Н. Лебедева РАН, акад. Г. А. Месяц (Москва).

- Академик-секретарь Отделения физических наук РАН, акад. А. Ф. Андреев, учёный секретарь ОФН РАН, к.ф.-м.н. В. А. Заяц (Москва).
- Начальник Финансово-экономического управления РАН А. И. Коношенко (Москва).
- Председатель Совета Российского фонда фундаментальных исследований В. Ю. Хомич (Москва).
- Председатель Президиума и директор Института физики ДНЦ РАН, член-корр. РАН И. К. Камилов (Махачкала).
- Директор Института астрономии РАН, заместитель академика-секретаря ОФН РАН, акад. А. А. Боярчук (Москва).
- Директор Института общей физики им. А. М. Прохорова РАН, член-корр. РАН И. А. Щербаков (Москва).
- Директор Института радиотехники и электроники РАН, акад. Ю. В. Гуляев (Москва).
- Сотрудники Института физических проблем им. П. Л. Капицы РАН (Москва).
- Директор Института спектроскопии РАН, проф. Е. А. Виноградов (Троицк).
- Директор Института физики твёрдого тела РАН, проф. В. В. Кведер; научный руководитель института, акад. Ю. А. Осипьян (Черноголовка).
- Директор Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе, проф. А. Г. Забродский (Санкт-Петербург).
- Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, акад. Е. Б. Александров (Санкт-Петербург).
- От имени сотрудников Института химической кинетики и горения СО РАН: акад. Ю. Д. Цветков; акад. Ю. Н. Молин; директор института, проф. С. А. Дзюба; председатель ПК П. А. Пуртов (Новосибирск).
- Директор Института лазерной физики СО РАН, акад. С. Н. Багаев (Новосибирск).
- Директор Института физики полупроводников СО РАН, акад. А. Л. Асеев (Новосибирск).
- Директор Института физики микроструктур РАН, член-корр. РАН С. В. Гапонов (Нижний Новгород).
- Директор Института прикладной физики РАН, акад. А. Г. Литвак; научный руководитель института, акад. А. В. Гапонов-Грехов (Нижний Новгород).
- Директор Института физики металлов УрО РАН, член-корр. РАН В. В. Устинов (Екатеринбург).
- Директор Института кристаллографии РАН, член-корр. РАН М. В. Ковальчук (Москва).
- Н. Е. Завойская, дочь Е. К. Завойского, научный сотрудник РНЦ "Курчатовский институт" (Москва).
- Проф. В. Любитц, президент (Германия); д-р Ш. А. Фэрхерст, секретарь (Великобритания) Международного общества ЭПР/ЭСР.
- Проф. Э. Бакс (США), президент Международного общества магнитного резонанса (США).
- Проф. Б. Х. Майер (Швейцария), президент Амперовского общества.
- Проф. Г. В. Шписс, один из директоров Макс-Планк Института исследования полимеров (Германия).
- Проф. Д. Фейер, Университет Сан-Диего (США).
- Проф. У. Хаберлен, Макс-Планк Институт медицины (Германия).
- Проф. А. Пайнс, Университет Калифорнии (США).
- Проф. К. Корвайя, Университет Падуи (Италия).
- Д-р Д. Шмальбайн (Германия), директор фирмы Брукер БиоСпин.
- Д-р У. Айххофф и д-р Б. Айххофф (Германия), фирма Брукер БиоСпин.
- Д-р Т. Чеховски, д-р Р. Квин, д-р Х. Сато, проф. Г. Итон, проф. С. Итон, д-р Д. Ульянов, д-р В. Катирвелу, д-р С. Шариф, д-р Р. Уссельман, д-р М. Свонсон, д-р Д. Ринар, исследовательская группа Центра ЭПР Университета Денвера (США).
- Директор Центра метрологии и аналитических методов исследования Академии наук Молдовы, проф. И. И. Жеру (Молдова).
- Члены Президиума Казанского научного центра Российской академии наук во главе с председателем КазНЦ РАН акад. А. И. Коноваловым.
- От имени коллектива Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН: директор, акад. О. Г. Синяшин; зам. директора, д.х.н., проф. В. С. Резник; зам. директора, д.х.н., проф. А. А. Бредихин; зам. директора, к.х.н. Ю. Б. Михайлов; учёный секретарь, к.х.н. И. П. Романова.
- Директор Казанского института биохимии и биофизики КазНЦ РАН, член-корр. РАН А. Н. Гречкин; акад. РАН и АН РТ И. А. Тарчевский; зам. директора по науке, д.б.н. В. М. Чернов; учёный секретарь, к.б.н. И. Ю. Карпилова.
- Директор Института механики и машиностроения КазНЦ РАН, член-корр. РАН Д. А. Губайдуллин.
- Коллектив Исследовательского центра проблем энергетики (Академэнерго) КазНЦ РАН.
- Директор Института языка, литературы и искусства им. Г. Ибрагимова АН РТ, проф. Н. Ш. Хисамов.
- Председатель Совета ректоров вузов РТ, ректор Казанского государственного университета, акад. АН РТ М. Х. Салахов.
- Ректор Казанского государственного технологического университета, акад. АН РТ С. Г. Дьяконов.
- Ректор Нижнекамского муниципального института, проф. Ф. Г. Ялалов (Нижнекамск).

- Ректор Казанского государственного энергетического университета, проф. Ю. Я. Петрушенко.
- Ректор Казанской государственной медицинской академии, академик-секретарь Отделения медицинских и биологических наук АН РТ, проф. М. К. Михайлов.
- Декан физфака Казанского государственного университета, проф. А. В. Аганов.
- Директор ВО “Внештехника” П. В. Забеднов (Москва).
- Директор ООО “Системы для микроскопии и анализа” В. Я. Шкловер (Москва).
- Генеральный директор ОАО “Радиоприбор”, депутат Госсовета РТ Р. У. Апаков.
- Генеральный директор ОАО “Татнефть” Ш. Ф. Тахавудинов (Альметьевск).

- Генеральный директор Казанского научно-исследовательского института авиационной технологии ОАО “КНИАТ”, акад. АН РТ И. М. Закиров.
- И.о. академика-секретаря ОСЭН АН РТ, член-корр. АН РТ, проф. КГУ, генеральный директор ТРМОФ “Сэлэт” Д. Ш. Сулейманов.
- Генеральный директор ОАО “КПК ПС” В. А. Александров.
- Директор Татарского научно-исследовательского института нефти им. В. Д. Шашина ОАО “Татнефть”, д.т.н., акад. АН РТ Р. Р. Ибатуллин (Бугульма).
- Глава компании АБАК Ф. Н. Маркман.
- Благодарные медики города Бугульмы.
- Директор Казанского Дома учёных И. С. Донская.
- Учащиеся и педагоги Академического лицея им. Н. И. Лобачевского.

Кроме этого, К. М. Салихова поздравили сотрудники института, многочисленные друзья и близкие.

Глубокоуважаемый Кев Минуллинович!

Президиум Российской академии наук сердечно поздравляет Вас, известного ученого и организатора науки в нашей стране с юбилеем – семидесятилетием со дня рождения!

Вся Ваша жизнь связана с активным научным творчеством, большой организационной и педагогической деятельностью на благо нашей страны.

Ваши работы по теории магнитных и спиновых эффектов в химических реакциях оказали существенное влияние на формирование и развитие спиновой химии. Эти работы удостоены высшей награды в науке – Ленинской премии 1986 года.

Вы заложили основы теории импульсных методов электронного парамагнитного резонанса, разработали теорию фазовой релаксации электронных спинов в твердых парамагнетиках. Вами созданы физические основы метода электронного спинового эха, развита теория молекулярного процесса спинового обмена в конденсированных средах. Вам принадлежат пионерские исследования магнито-спиновых эффектов и поляризации спинов в химических и фотофизических процессах, включая первичные стадии разделения зарядов в реакционном цикле фотосинтеза.

Под Вашим руководством создан, сертифицирован и внедрен в эксплуатацию низкочастотный магнитно-резонансный томограф для медицинских исследований.

Вы создали и являетесь бессменным редактором международного журнала «Applied Magnetic Resonance», который уже более 15 лет публикует работы российских и зарубежных ученых.

Около двадцати лет Вы возглавляете один из лучших институтов Российской академии наук – Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, продолжающий исследования магнитного резонанса, заложенные академиком Е.К. Завойским.

Вы избраны действительным членом Академии наук Республики Татарстан, многие годы являетесь ее вице-президентом, много сил отдаете работе на посту заместителя председателя Казанского научного центра РАН, активно участвуете в международной научно-организационной деятельности.

Большое внимание Вы уделяете научно-педагогической деятельности. В Казанском государственном университете Вы создали и с 1989 года бессменно возглавляете кафедру химической физики. Вами написаны четыре учебника для студентов университетов. Под Вашим руководством защищено 19 кандидатских и 8 докторских диссертаций.

Ваши научные достижения отмечены Ленинской премией, Государственной премией Республики Татарстан, Золотой медалью Международного общества ЭПР, Гумбольдтовской премией, Международной премией им. Е.К. Завойского, почетными наградами и званиями научных обществ Австралии и Новой Зеландии, Японии. За Ваши заслуги перед страной и наукой Вы награждены орденом Знак Почета.

Желаем Вам, дорогой Кев Мануллинович, дальнейших творческих успехов в науке, плодотворной педагогической и организаторской деятельности, крепкого здоровья и счастья!

Президент
Российской академии наук
академик



Ю.С. Осипов

Главный ученый секретарь
Президиума Российской академии наук
академик



В.В. Костюк

3 ноября 2006 г.

Текст поздравления Президента Российской академии наук, акад. Ю. С. Осипова; главного учёного секретаря РАН, акад. В. В. Костюка (Москва).

Евгений Иванович Штырков. К 70-летию со дня рождения

Евгений Иванович Штырков известен в кругах учёных-физиков как один из основоположников двух крупных направлений научных исследований: резонансная динамическая голография и лазерный отжиг полупроводников.

Е. И. Штырков родился 22 декабря 1936 года в Казани. После окончания средней школы № 4 поступил на физико-математический факультет Казанского государственного университета на отделение радиофизики. В 1959 году после окончания университета начал свою трудовую и научную деятельность в Государственном институте



Евгений Иванович Штырков

прикладной оптики. Здесь он прошёл путь от инженера до начальника физической лаборатории, которая одной из первых в стране стала заниматься лазерами и голографией. Здесь же были проведены первые опыты с применением лазерного излучения и метода голографической интерферометрии для исследования температурного поля пламени, резонансного поглощения в плазме и т.д.

В 1969 году Е. И. Штырков успешно защитил кандидатскую диссертацию. Заложенные в диссертации идеи были в дальнейшем им развиты и нашли своё отражение при изучении резонансных явлений в конденсированных средах. Его пионерская работа (Письма в ЖЭТФ, 1970 г.) по рассеянию света на периодической структуре из возбуждённых и невозбуждённых атомов дала толчок развитию динамической голографии.

В эти годы Е. И. Штырков тесно сотрудничает с учёными Казанского физико-технического института. В результате этого сотрудничества в институте впервые засиял гелий-неоновый лазер. Это послужило началом (1966–1967 гг.) применения в институте оптических квантовых генераторов для исследования фотонного эха и других ре-

зонансных явлений в конденсированных средах и стало одним из приоритетных направлений института. В 1971 году Е. И. Штырков окончательно связал свою судьбу с Казанским физтехом. Под руководством М. М. Зарипова в отделе физики твёрдого тела КФТИ в начале 70-х годов он стал проводить исследования взаимодействия мощного лазерного излучения с кристаллами. Будучи старшим научным сотрудником, а затем уже заведующим лабораторией нестационарной лазерной спектроскопии, Е. И. Штырков со своими коллегами добился больших успехов в области динамической голографии.

При изучении неизвестных закономерностей динамической голографии в полупроводниках, Е. И. Штырковым и М. Ф. Галютдиновым было обнаружено изменение оптических параметров поверхности полупроводника в результате воздействия интенсивных лазерных импульсов. К объяснению этого эффекта были привлечены сотрудники отдела физики твёрдого тела И. Б. Хайбуллин и Р. М. Баязитов, которые предложили использовать имплантированные полупроводники для выяснения физики обнаруженного эффекта. В результате общих исследований было открыто явление лазерного отжига. Проведённые в институте комплексные исследования физики лазерного отжига и его многообразных закономерностей в различных полупроводниках получили широкую известность в стране и за рубежом и способствовали появлению новых лазерных технологий по модификации материалов. Е. И. Штырковым и его коллегами было получено более 20 авторских свидетельств на изобретение по этой теме, разработаны оригинальные технологии по изготовлению полупроводников с заданными свойствами и новые материалы для записи голограмм. Признанием заслуг Е. И. Штыркова и его коллег в открытии и разработке физических основ импульсной ориентированной кристаллизации твёрдых тел (лазерного отжига) явилось присуждение им Государственной премии СССР в области науки в 1988 году.

Большое влияние на работы в области фотонного эха оказало предсказание Евгением Ивановичем задержанной во времени интерференции и четырёхволнового смещения световых полей в средах с фазовой памятью, предсказание и экспериментальное обнаружение обращения волнового фронта в сигналах фотонного эха. Эти новаторские работы заложили основу нового научного направления – эхо-голографии, которая сразу получила широкое распространение и стала активно разрабатываться советскими и зарубежными исследователями в 80-е и 90-е годы XX века. Признанием заслуг Е. И. Штыркова в развитии физических основ резонансной динамической голографии явилось присуждение ему в 1982 году вместе с коллективом известных советских учёных во главе с членом-корр. АН СССР Ю. Н. Денисюком Государственной премии СССР в области науки.

В 1985 году Е. И. Штырков успешно в виде доклада защитил докторскую диссертацию по динамической голографии в Государственном оптическом институте (г. Ленинград). По этой тематике под его руководством вскоре защитились 3 кандидатских диссертации. Сре-



Лауреаты Государственной премии СССР в области науки и техники 1988 года. Слева направо: первый ряд – И. Б. Хайбуллин, М. М. Зарипов, Р. М. Баязитов; второй ряд – Е. И. Штырков, М. Ф. Галяутдинов.

Евгений Иванович принимает активное участие в научно-общественной жизни: является членом специализированного Учёного совета Казанского государственного университета, председателем комиссии по науке Поволжского отделения оптического общества России, членом Американского оптического общества, рецензентом журнала “Оптика и спектроскопия” и “Журнала прикладной спектроскопии”.

ди учеников Е. И. Штыркова 9 кандидатов наук, один из них – доктор физико-математических наук. Решением Высшей аттестационной комиссии при Совете Министров СССР в 1991 году ему присвоено звание профессора по специальности “оптика”.

Работы в области эхо-голографии продолжаются, и в наши дни это направление испытывает новую волну интереса в связи с появлением квантовой информатики и квантовой голографии.

Результаты научных исследований, руководимых Е. И. Штырковым, неоднократно входили в Перечень “Важнейшие достижения Академии наук СССР”, отмечались дипломом и золотой медалью ВДНХ, он и его коллеги были удостоены нагрудного знака “Изобретатель СССР”. Научный авторитет Е. И. Штыркова, его высокая квалификация и заслуги по достоинству оценены научным сообществом и государством. В 1994 г. ему присвоено звание “Заслуженный деятель науки Республики Татарстан” и “Заслуженный деятель науки Российской Федерации” (2000 г.).



Евгений Иванович Штырков всегда в научном поиске.

Е. И. Штырков имеет широкий диапазон научных интересов, он не замыкается на достигнутом, умеет видеть необычное и перспективное в разных областях науки и жизни, с головой окунается в океан нового, еще не исследованного. В юности он был гимнастом-разрядником, и до сих пор Евгений Иванович сохранил увлечение спортом, в частности, бегом, что позволяет сохранять ему прекрасную спортивную форму. Нам приятно проводить время вместе с Евгением Ивановичем за шахматной доской, где он всегда оригинален и быстр в генерации новых идей, так что противнику очень трудно противостоять натиску его атакующих фигур. Мы знаем его постоянное увлечение рыбалкой, с которой он никогда не возвращается без улова даже в самую непогоду на Волге.

Его характеризует высокая гибкость мышления и фантазия, способность убедить слушателя в своей правоте. Физическая интуиция, основанная на знании секретов экспериментальной физики, никогда не покидает его и позволяет находить оригинальные объяснения новым экспериментам и физическим явлениям. Мы, его ближайшие ученики и коллеги, не перестаем восхищаться его самостоятельностью мышления и удивительной смелостью в выборе научных проблем. Эти редкие для современного исследователя качества проявились и в последние два десятилетия научной деятельности Евгения Ивановича.

Будучи главным научным сотрудником, Евгений Иванович стал проводить свои исследования как в области оптики полупроводников так и в космологии, где его интересуют закономерности распространения света в космосе и околоземном пространстве. Им предложена и научно обоснована новая интерпретация физического механизма красного смещения спектров, экспериментально наблюдаемых только у очень отдалённых галактик и квазаров. Он проявил завидное упорство в этих исследо-

ваниях. В результате им не так давно была обнаружена и экспериментально измерена скорость движения Земли в космосе, используя лишь данные в системе “спутник Земли и наблюдатель, находящийся на её поверхности”. То есть экспериментальные данные о движении Земли в космосе получены в системе координат движения Земли, без обращения к координатам неподвижных звезд. Мы надеемся на подтверждение этих результатов в работах других независимых экспериментаторов, что позволит пролить свет на новые фундаментальные закономер-

ности окружающего нас пространства, движущихся в нём материи и света.

Евгений Иванович не только страстный рыболов, но он также и бесстрашный горнолыжник, не боящийся спускаться с самых высоких склонов Эльбруса. Мы, ученики и коллеги Евгения Ивановича от всей души желаем ему дальнейшей плодотворной работы и крепкого здоровья на долгие годы.

*М. Ф. Галяутдинов,
С. А. Мусеев*



Хронология истории Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН (1945–2000)

по материалам архива КФТИ*

1945

13 апреля – принято постановление Совета Народных Комиссаров СССР об открытии Казанского филиала Академии наук в г. Казани.

28 августа – на распорядительном заседании Президиума АН СССР утверждена структура Казанского филиала Академии наук СССР:

- Президиум филиала;
 - Совет при Президиуме филиала;
 - научно-исследовательские институты:
 - Физико-технический институт;
 - Химический институт;
 - Геологический институт;
 - Биологический институт;
 - Институт языка, литературы и истории;
 - сектор водохозяйственных проблем и энергетики;
 - сектор научно-технической информации;
 - редакционно-издательский совет;
 - научная библиотека;
 - административно-хозяйственный отдел;
 - мастерская с цехами: электромеханическим, столярным и стеклодувным.
- И.о. директора Физико-технического института (ФТИ) утверждён член-корр. АН СССР Н. Г. Чеботарёв. Определена структура ФТИ в составе 4 секторов: математики, астрономии и геофизики, физики, механики.

1946

12 января – на заседании Президиума Казанского филиала на должность директора ФТИ и члена Президиума

КФ АН СССР рекомендован д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари. И.о. учёного секретаря утверждён к.ф.-м.н. Г. С. Салехов.

Утверждены заведующие секторами:

- математики – член-корр. АН СССР, д.ф.-м.н., проф. Н. Г. Чеботарёв;
- астрономии и геофизики – д.ф.-м.н., проф. А. Д. Дубяго;
- физики – д.ф.-м.н., проф. Е. К. Завойский;
- механики – д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари.

1–21 января – представители администрации ФТИ, заведующие секторами и сотрудники института приступили к исполнению своих должностных обязанностей.

4 марта – на заседании Президиума Казанского филиала принято решение об организации в секторе механики лаборатории упругости.

11 апреля – на распорядительном заседании Президиума АН СССР д.ф.-м.н. Х. М. Муштари утверждён директором ФТИ.

23 апреля – утверждён первый состав Учёного совета ФТИ:

- Х. М. Муштари, д.ф.-м.н., проф., зав. сектором механики, директор;
- Г. С. Салехов, к.ф.-м.н., учёный секретарь;
- Н. Г. Чеботарёв, член-корр. АН СССР, д.ф.-м.н., проф., зав. сектором математики;
- Е. К. Завойский, д.ф.-м.н., проф., зав. сектором физики;
- А. Д. Дубяго, д.ф.-м.н., проф., зав. сектором астрономии и геофизики;
- А. А. Труфанов, д.т.н., проф., зав. сектором водохозяйственных проблем;
- А. Н. Норден, д.ф.-м.н., проф., с.н.с.;
- П. Т. Смоляков, д.ф.-м.н., проф., с.н.с.;
- Г. Г. Тумашев, к.ф.-м.н., с.н.с.;
- Г. В. Каменков, д.ф.-м.н., проф., с.н.с.

* События за 2001–2006 гг., опубликованные в ежегодниках за эти годы, не приводятся.

11 мая – состоялось первое заседание Учёного совета.
28 июня – утверждён состав комиссии по подбору претендентов в докторскую и кандидатскую аспирантуру Филиала.

Д.ф.-м.н., проф., директор ФТИ Х. М. Муштари награждён орденом “Знак Почёта”.

При секторе физики организованы лаборатория магнитной спектроскопии (заведующий: к.х.н. Б. М. Козырев) и геофизическая группа (руководитель: д.ф.-м.н., проф. П. Т. Смоляков).

1947

15 мая – и.о. зав. сектором механики возложено на д.ф.-м.н. Г. Г. Тумашева.

1 июля – умер член-корр. АН СССР Н. Г. Чеботарёв, зав. сектором математики (1946–1947).

20 августа – на должность вр. и.о. зав. сектором математики переведён д.ф.-м.н. Г. С. Салехов.

М.н.с. М. Г. Одинцов переведён на должность учёного секретаря ФТИ.

1 сентября – зав. сектором физики Е. К. Завойский отчислен из Филиала в связи с переходом на другую работу.

1 октября – на к.х.н. Б. М. Козырева возложено и.о. зав. сектором физики.

29 октября – на заседании Президиума КФ АН утверждён Редакционно-издательский совет по КФ АН СССР (председатель: акад. А. Е. Арбузов).

Б. М. Козырев и С. Г. Салихов открыли явление электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в свободных радикалах.

1948

24 апреля – на к.ф.-м.н., с.н.с. К. З. Галимова возложено и.о. зав. сектором механики после увольнения Г. Г. Тумашева.

1 июня – к.ф.-м.н. С. А. Альтшулер зачислен на должность с.н.с. сектора физики по совместительству.

1 июля – в связи с произошедшими изменениями утверждены зав. секторами ФТИ:

- математики – к.ф.-м.н. Г. С. Салехов;
- астрономии и геофизики – д.ф.-м.н., проф. А. Д. Дубяго;
- физики – к.х.н. Б. М. Козырев;
- водохозяйственных проблем и энергетики – д.т.н. А. А. Труфанов;
- механики – к.ф.-м.н. К. З. Галимов.

С. А. Альтшулер, Б. М. Козырев и С. Г. Салихов обнаружили проявления сверхтонкого взаимодействия в спектрах ЭПР.

1949

3 июня – принято решение о создании на правах самостоятельного структурного подразделения архива Казанского филиала.

17 декабря – утверждена новая структура ФТИ, состоящая из секторов: физики, механики и прикладной математики, водохозяйственных проблем и энергетики. Сектор астрономии и геофизики ликвидирован.

1950

5 апреля – зав. сектором астрономии и геофизики, проф. А. Д. Дубяго освобождён от занимаемой должности.

10 мая – утверждена новая структура института. ФТИ состоит из 3 отделов: физики, механики и математики.

19 мая – спектральная лаборатория, находившаяся в ведении Филиала, передана ФТИ. Она вошла в состав отдела физики (отв. лицом по спектральной лаборатории назначен с.н.с. Ф. А. Маковский).

24 мая – руководитель геофизической группы с.н.с. П. Т. Смоляков освобождён от занимаемой должности по сокращению штатов.

30 декабря – в соответствии с письмом зам. председателя Совета филиалов АН СССР были унифицированы существующие наименования структурных подразделений (отделы вновь стали именоваться секторами).

1951

Июль – принято решение о строительстве 4-этажного лабораторного здания (ул. Лобачевского, д. 2).

Д.ф.-м.н., проф., зав. сектором математики Г. С. Салехов награждён орденом “Знак Почёта”.

1952

1 сентября – руководство экспериментальными работами по прочности и устойчивости оболочек в секторе механики возглавил М. С. Корнишин.

1953

1 января – освобождён от должности учёного секретаря к.ф.-м.н. М. Г. Одинцов, на эту должность утверждён к.т.н. Р. Г. Суркин.

23 февраля – д.ф.-м.н. Х. М. Муштари утверждён в должности зав. сектором механики.

19 сентября – зав. сектором физики, к.х.н. Б. М. Козырев награждён орденом Трудового Красного Знамени.

4 декабря – присуждена премия Президиума АН СССР 1953 года авторскому коллективу сектора физики в составе: к.х.н. Б. М. Козырев, к.ф.-м.н. С. Г. Салихов, к.ф.-м.н. М. Г. Одинцов, к.ф.-м.н. Н. С. Гарифьянов, к.ф.-м.н. А. И. Ривкинд, лаборант Ю. Я. Шамонин, к.ф.-м.н. С. А. Альтшулер за работу по парамагнитному резонансу, выполненную в 1952–1953 гг.

1955

27 мая – в постановлении Президиума Академии наук СССР “О состоянии и дальнейшем развитии научной деятельности Казанского филиала АН СССР” определены основные задачи ФТИ: изучение явления парамагнитного резонанса; решение краевых задач подземной гидромеханики; создание основ нелинейной теории гибких пластин и оболочек.

Определена следующая структура института: лаборатория физики, сектор математики с группой подземной гидродинамики и вычислительным бюро, сектор механики.

Сентябрь – в лаборатории физики создана творческая группа полупроводников под руководством Ф. А. Маковского.

1956

1 января – при секторе математики создано вычислительное бюро.

1 апреля – спектральная лаборатория, ранее входившая в состав лаборатории физики, влилась во вновь организованную при Казанском филиале АН СССР лабораторию физико-химических методов исследования (заведующий: к.х.н., с.н.с. Б. Я. Тейтельбаум).

1 декабря – при секторе математики образована группа подземной гидромеханики.

1957

22 апреля – члену-корр. АН СССР Е. К. Завойскому присуждена Ленинская премия за открытие и изучение парамагнитного резонанса.

Сентябрь – завершено строительство лабораторного здания Казанского филиала АН СССР (ул. Лобачевского, д. 2).

Издана монография Х. М. Муштари и К. З. Галимова “Нелинейная теория упругих оболочек”.

1958

17 января – Комитет по делам изобретений и открытий при Совете Министров СССР зарегистрировал работу под наименованием “О значении спина ядра ^{57}Fe ”

к.х.н. Б. М. Козырева, к.ф.-м.н. Н. С. Гарифьянова, к.ф.-м.н. М. М. Зарипова.

Май-сентябрь – на Всемирной выставке в Брюсселе экспонировалась установка м.н.с. лаборатории физики Ю. Я. Шамонина для демонстрации явления парамагнитного резонанса.

Начато строительство криогенного корпуса.

1959

1 января – организована экспериментальная мастерская.

Ноябрь – приобретена электронная цифровая вычислительная машина (ЭЦВМ) М-3М. С получением М-3М при секторе математики создана группа по обслуживанию ЭВМ.

1960

Май – введена в эксплуатацию азотная станция ЖАК-80.

20 июня – д.ф.-м.н., проф., зав. сектором математики Г. С. Салехову присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки и техники Татарской АССР”.

27 декабря – Комитет совета ВДНХ СССР наградил:

- Дипломом II степени – ФТИ за исследование свободных радикалов методом парамагнитного резонанса;
- большой серебряной медалью – зав. сектором физики Б. М. Козырева за открытие парамагнитного резонанса в свободных радикалах и м.н.с. Ю. Я. Шамонина за создание моделирующей установки парамагнитного резонанса для исследования свободных радикалов;
- бронзовой медалью – с.н.с. Н. С. Гарифьянова за исследование парамагнитного резонанса в каменных углях, нефтях Татарии и в чёрной резине;
- бронзовой медалью – с.н.с. Ф. Г. Валитову за творческое участие в исследованиях дифенилпикрил-гидрозила и пентафенилциклопентадиенила (ДФПГ, ПФЦПД).

1961

Февраль – исполком Казанского городского Совета депутатов трудящихся принял решение об отводе КФ АН СССР земельного участка под строительство здания Физико-технического института по ул. Пионерская Советского района г. Казани.

Апрель – Казанский филиал Академии наук СССР передан в ведение Государственного комитета Совета Министров РСФСР по координации научно-исследовательских работ.

16 мая – организован сектор теоретической физики (заведующий: к.ф.-м.н. У. Х. Копвиллем).

Введена в эксплуатацию водородная ожижительная станция ВОС-3.

Издана монография С. А. Альтшулера и Б. М. Козырева “Электронный парамагнитный резонанс”.

1962

Январь – закончен монтаж гелиевого ожижителя.

9 февраля – освобождён от должности учёного секретаря Р. Г. Суркин, на эту должность утверждён м.н.с. С. Ф. Коротков.

3 марта – в лаборатории физики, на базе группы полупроводников, образована лаборатория полупроводников (заведующий: к.ф.-м.н. Ф. А. Маковский). Лаборатория физики переименована в лабораторию радиоспектроскопии.

Май – магнитное запоминающее устройство МОЗУ-1000 подключено к ЭЦВМ М-3М.

29 июня – при Президиуме Казанского филиала на общественных началах организовано бюро научно-технической информации (председатель: к.ф.-м.н., с.н.с. А. И. Ривкин).

1 октября – зав. сектором математики Г. С. Салехов освобождён от занимаемой должности по состоянию здоровья. На эту должность назначен к.ф.-м.н. В. Д. Чугунов.

Группа сотрудников под руководством к.ф.-м.н. И. А. Сафина создала первый импульсный широкодиапазонный спектрометр ядерного квадрупольного резонанса.

Зав. сектором теоретической физики У. Х. Копвиллем вместе с В. Р. Нагибаровым теоретически предсказали эффект светового (фотонного) эха.

В. А. Голенищев-Кутузов и Э. Г. Харахашьян создали спектрометр для изучения акустического парамагнитного поглощения.

1963

11 апреля – Казанский филиал АН СССР передан из ведения Государственного комитета Совета Министров РСФСР по координации научно-исследовательских работ в ведение Академии наук СССР.

Декабрь – запущена гелиевая установка.

1964

1 января – в связи с прекращением деятельности Казанского филиала АН СССР на самостоятельный баланс переведён ФТИ. На него возложено счётно-финансовое и хозяйственное обслуживание Института языка, литературы и истории. Научная библиотека, группа преподавателей иностранных языков, научный архив, экспериментальные мастерские и гараж переданы ФТИ. С этого времени Физико-технический институт

стал именоваться Казанским физико-техническим институтом Академии наук СССР (КФТИ АН СССР).

15 января – утверждён состав библиотечного совета научной библиотеки КФТИ АН СССР (председатель: д.ф.-м.н., проф. Г. С. Салехов).

9 марта – зам. директора по научной работе утверждён С. Ф. Коротков.

Учёным секретарём института утверждён м.н.с. Ю. В. Яблоков.

1 апреля – ответственным сотрудником за работу криогенной лаборатории назначен м.н.с. Э. Г. Харахашьян.

28 октября – принято постановление Бюро Отделения общей и прикладной физики АН СССР “Об основных направлениях исследований и перспектив развития КФТИ АН СССР”, в котором одобрены основные направления научных исследований и рекомендовано провести ряд структурных изменений в институте.

29 декабря – в институте создана патентная группа.

Монография С. А. Альтшулера и Б. М. Козырева “Парамагнитный резонанс” издана в США на английском языке.

1965

1 июля – произведены структурные изменения в научных подразделениях института:

- лаборатория радиоспектроскопии реорганизована в отдел магнитной радиоспектроскопии (заведующий: д.ф.-м.н. Б. М. Козырев), состоящий из:
 - лаборатории ЭПР (заведующий: д.ф.-м.н. Б. М. Козырев);
 - лаборатории ядерного магнетизма (заведующий: д.ф.-м.н. А. И. Ривкин);
- сектор механики реорганизован в отдел теории оболочек (заведующий: д.ф.-м.н. Х. М. Муштари), состоящий из:
 - лаборатории статики и динамики оболочек (заведующий: к.т.н. М. С. Корнишин);
 - лаборатории механики полимеров (заведующий: д.ф.-м.н. Х. М. Муштари);
- создана лаборатория квантовой акустики (заведующий: к.ф.-м.н. У. Х. Копвиллем).

Д.ф.-м.н., зав. отделом магнитной радиоспектроскопии Б. М. Козыреву присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки и техники Татарской АССР”.

Начато строительство лабораторного корпуса КФТИ (ул. Сибирский тракт, д. 10/7).

1967

Сентябрь – введён в действие ЭПР спектрометр JES-3BSX фирмы Джеол (Япония).

1968

16 мая – к.ф.-м.н. Ю. В. Яблоков освобождён от должности учёного секретаря по личной просьбе. На должность учёного секретаря назначен к.ф.-м.н. Н. Р. Яфаев.

1 сентября – ликвидирована лаборатория полупроводников.

Создана группа по выращиванию монокристаллов при лаборатории квантовой акустики.

Сентябрь – введена в эксплуатацию ЭЦВМ Минск-22.

1 октября – лаборатория квантовой акустики преобразована в отдел квантовой акустики (заведующий: д.ф.-м.н. У. Х. Копвиллем), состоящий из:

- лаборатории электронного акустического парамагнитного резонанса (заведующий: д.ф.-м.н. У. Х. Копвиллем);
- лаборатории ядерного акустического магнитного резонанса (заведующий: к.ф.-м.н. В. А. Голенищев-Кутузов).

В составе отдела магнитной радиоспектроскопии образована лаборатория ЭПР (заведующий: д.ф.-м.н. Н. С. Гарифьянов).

26 ноября – д.ф.-м.н. Б. М. Козырев избран членом-корр. АН СССР.

Издана монография И. П. Бирюкова, М. Г. Воронкова, И. А. Сафина “Таблицы частот ядерного квадрупольного резонанса”.

1969

24–29 июня – Всесоюзная юбилейная конференция по парамагнитному резонансу, посвящённая 25-летию открытия явления ЭПР академиком Е. К. Завойским (КФТИ – соорганизатор).

7 июля – коллектив КФТИ АН СССР и сотрудники института: зам. директора по научной работе, к.ф.-м.н. С. Ф. Коротков; ст. инженер по технике безопасности Л. А. Крюков; общественный инспектор по охране труда В. М. Пименов; член местного комитета профсоюза Ф. И. Чуркин награждены Почётными грамотами АН СССР за успехи, достигнутые в улучшении охраны труда и культуры производства при проведении в 1968 году общественного смотра-конкурса, объявленного в честь 100-летия со дня рождения В. И. Ленина.

Член-корр. АН СССР Б. М. Козырев избран членом Совета Европейского физического общества от Академии наук СССР.

Издана монография А. Р. Кесселя “Ядерный акустический резонанс”.

1970

29 января – Президиум АН СССР премировал В. К. Кайбияйнена, Б. М. Козырева, С. Ф. Короткова, В. Н. Федотова, Ю. В. Яблокова, Н. Р. Яфаева за разработку и изготовление спектрометра двойного электронно-ядерного резонанса ЭЯ-1302.

14 марта – умер д.ф.-м.н. Н. С. Гарифьянов, заведующий лабораторией ЭПР (1968–1970).

28 августа – закончена наладка радиоспектрометра В-ER 418S фирмы Брукер (ФРГ).

Октябрь – приобретён интерферометр Фабри-Перро (ГДР).

19 декабря – м.н.с. Н. А. Шамуков награждён золотой медалью ВДНХ СССР за создание отдельных блоков спектрометра двойного акусто-магнитного резонанса и обнаружение этого эффекта в рубине.

Декабрь – завершено строительство первой очереди лабораторного корпуса КФТИ (ул. Сибирский тракт, д. 10/7).

Директор института, д.ф.-м.н. Х. М. Муштари награждён орденом Ленина.

Зав. лабораторией нелинейной теории оболочек, д.т.н., проф. М. С. Корнишин награждён орденом Трудового Красного Знамени.

А. Р. Кессель и И. А. Сафин открыли явление электроакустического эха в пьезоэлектрических кристаллах.

Приобретены гелиевая оживительная машина Г-3 без водородного цикла, азотная станция АЖК.

1971

15 января – д.ф.-м.н. М. М. Зарипов назначен на должность зав. лабораторией ЭПР отдела радиоспектроскопии.

11 марта – произведены изменения в названиях научных подразделений института:

- лаборатория статики и динамики оболочек переименована в лабораторию нелинейной теории оболочек (заведующий: д.т.н. М. С. Корнишин);
- лаборатория механики полимеров – в лабораторию теории оболочек, взаимодействующих со средой (заведующий: к.ф.-м.н. М. А. Ильгамов).

11 мая – в соответствии с решением исполкома Казанского городского Совета депутатов трудящихся улица, проходящая по южной границе микрорайона № 2, восточнее пос. Горки, между улицами Р. Зорге и Х. Мавлютова, названа улицей проф. Н. С. Гарифьянова.

18 октября – утверждён Совет молодых учёных и специалистов института (председатель: к.ф.-м.н., м.н.с. В. В. Самарцев).

21 октября – умер д.ф.-м.н., проф. Г. С. Салехов, зав. сектором математики (1947–1962).

Декабрь – завершено строительство пристроя к новому лабораторному корпусу института (ул. Сибирский тракт, д. 10/7)

1972

Апрель – запущена новая гелиевая станция Г-3 без водородного цикла.

5 октября – д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари освобождён от занимаемой должности директора института по личной просьбе, при этом он продолжал исполнять обязанности зав. отделом теории оболочек.

Д.ф.-м.н. М. М. Зарипов назначен на должность директора КФТИ.

14 декабря – принято постановление Президиума АН СССР “Об основных направлениях научных исследований институтов Казанского филиала Академии наук СССР, структуре и составе Президиума Филиала”. С 1 января 1973 года восстанавливается деятельность Казанского филиала Академии наук (КФ АН) СССР в составе:

- Ордена Трудового Красного Знамени Института органической и физической химии им. А. Е. Арбузова;
- Казанского физико-технического института;
- Казанского института биологии;
- Института языка, литературы и истории им. Г. Ибрагимова.

Председателем Президиума КФ АН СССР назначен д.ф.-м.н. М. М. Зарипов.

На КФТИ возложено финансово-хозяйственное обслуживание ИЯЛИ им. Г. Ибрагимова и аппарата Президиума Филиала.

Декабрь – введена в эксплуатацию ионно-лучевая ускорительная установка ИЛУ-3.

В. А. Голенищев-Кутузов обнаружил новый эффект – нерезонансное поглощение ультразвука системой электронных спинов.

Гелиевая станция ГС-2 демонтирована, а ожижитель передан для учебных целей в КХТИ (ныне КГТУ).

1973

12 февраля – м.н.с. А. Н. Гильманов переведён на должность учёного секретаря Президиума КФ АН СССР.

Март – введена в эксплуатацию новая азотная станция АЖА-0.04.

9 апреля – КФТИ присуждено 2-е место с вручением Почётной грамоты Президиума АН СССР и Президиума ЦК профсоюза за достигнутые успехи при проведении общественного смотра по охране труда и культуре производства в честь 50-летия образования СССР.

26–28 июня – I Всесоюзный симпозиум по световому эхо (КФТИ – соорганизатор).

10 сентября – умер д.ф.-м.н., проф. А. И. Ривкинд, зав. лабораторией ядерного магнетизма (1965–1973).

Сентябрь – введена в эксплуатацию в криогенном корпусе (ул. Лобачевского, д. 2) вторая азотная станция АЖА-0.04.

1 октября – к.ф.-м.н. И. А. Сафин назначен и.о. зав. лабораторией ядерного магнетизма.

Путём слияния библиотек КФТИ и Казанского института биологии создана объединённая научная библиотека КФТИ.

12 октября – д.ф.-м.н., проф. У. Х. Копвиллем освобождён от занимаемой должности зав. отделом квантовой акустики и зав. лабораторией электронного акустического парамагнитного резонанса.

22 октября – д.ф.-м.н. В. А. Голенищев-Кутузов назначен и.о. зав. отделом квантовой акустики.

Приобретён двухдиапазонный спектрометр ЭПР Е-12 фирмы Вариан (США).

1974

Апрель – 2-е издание монографии А. Р. Кесселя “Ядерный акустический резонанс” опубликовано на немецком языке в ГДР.

1 июля – в объединённой научной библиотеке КФТИ образованы отделы обслуживания читателей, обработки и каталогов.

1 октября – в отделе радиоспектроскопии образована лаборатория физики металлов (заведующий: к.ф.-м.н., с.н.с. Э. Г. Харахашьян).

Декабрь – в связи с 250-летием Академии наук СССР Президиум АН СССР наградил:

- Почётными грамотами и ценными подарками – 40 сотрудников института: В. И. Бергер, Н. И. Бурдаева, В. И. Быкова, М. А. Венедиктову, М. С. Ганеву, Т. В. Грозову, Р. Ф. Губаева, Х. Г. Дерганова, С. М. Ефремова, К. Т. Иванову, А. А. Казачихина, Ш. Х. Камалееву, И. И. Курочкина, С. В. Кочнева, Ф. Ф. Лядова, Э. И. Логинову, Л. В. Миловидову, Р. М. Мингазову, В. В. Михайлова, Т. Ю. Муратова, А. М. Новикову, Н. И. Пестрицкую, В. А. Жихарева, В. П. Зенцова, Н. А. Савинову, Р. Г. Суркина, В. В. Скворцова, Ю. А. Теплова, В. И. Жандармова, Г. Б. Тейтельбаума, И. В. Липского, В. А. Уланова, В. И. Фурасова, Н. С. Фёдорова, Н. Н. Шихранова, Т. А. Хлебникову, К. С. Ярмухаметову.
- Почётными грамотами – 105 сотрудников института: Н. Б. Алексееву, О. Е. Алексееву, Т. С. Альтшулер, Н. К. Андреева, Я. Я. Асадуллина, Р. С. Атнагулову, А. З. Бакирову, Р. М. Баязитова, К. К. Баянову, Б. К. Березина, В. М. Берёзова, Х. Г. Богданову, Г. Н. Боровикова, А. И. Воронову, Н. В. Гайнутдинова, Р. Г. Галеева, В. А. Гапоненко, И. А. Гарифуллина, О. Ф. Гатауллина, Н. С. Гибадуллина, А. Н. Гильманова, Л. А. Горчакову, Р. Ф. Губаева, Ф. Ф. Губайдуллина, Б. В. Гулина, А. М. Гусева, И. С. Донскую,

А. А. Егорову, Г. Р. Еникееву, М. Х. Зайнуллину, М. Р. Зарипову, Р. А. Зигангарееву, В. А. Иванова, Т. А. Иванову, А. В. Ильину, В. К. Кайбияйнена, А. Ф. Каримову, М. С. Касимову, А. Р. Кесселя, Б. М. Козырева, О. В. Концевую, М. С. Корнишина, М. А. Корчемкина, З. О. Кугушеву, Е. Ф. Куковицкого, В. Н. Лисина, В. А. Логинова, Г. И. Маркелова, В. Л. Матухина, Л. И. Медведева, В. П. Мейклера, С. А. Мигачёва, А. В. Митина, В. В. Морозова, Б. М. Мустакимова, И. А. Нагибарову, С. Г. Нагуманову, Р. М. Насырова, Н. В. Новосёлова, В. К. Нурмухаметова, И. В. Овчинникова, М. Н. Олипову, В. В. Пестова, Ю. А. Петрова, И. П. Петухова, В. А. Пирожкова, Е. В. Прохачко, Р. Г. Рамазанова, В. Р. Ризаева, В. С. Романова, Ю. М. Рыжманова, Р. В. Сабурову, Е. Е. Савина, И. И. Садыкова, В. В. Самарцева, Р. Ш. Сафина, И. А. Сафина, Ж. М. Сахабутдинова, Е. И. Семёнову, М. А. Семёнову, Б. П. Смолякова, Н. К. Соловарова, О. В. Соловьёва, Г. Г. Степахину, М. М. Сулейманову, М. В. Талдыкина, М. А. Тараканова, И. Г. Терегулова, Е. А. Туриянского, Р. Г. Усманова, С. М. Усманову, М. Л. Фалина, А. Г. Фатыхова, А. И. Филиппова, Е. П. Хаймовича, С. Я. Хлебникова, А. В. Цветкову, Ф. Г. Черкасова, В. Д. Чугунова, Г. П. Чугунову, Е. П. Шальнёву, И. Е. Шматкова, Е. И. Штыркова, Н. Б. Юсупова, М. Ш. Юсупова.

- Ценными подарками – 19 сотрудников института: А. Т. Бирюкова, М. Л. Блатта, Ю. И. Валентовича, И. С. Вафина, Г. П. Вишневскую, В. А. Горожанина, А. В. Марина, Н. И. Москалёва, Ф. М. Мухаметзянова, В. М. Пименова, И. В. Свирского, Б. А. Сейфуллина, М. Я. Трофимова, Б. М. Хабибуллина, И. М. Шакирова, Л. Ф. Шатрукова, А. Е. Шевелёва, А. Ф. Чикунова, Ю. В. Яблокова.

8 декабря – Комитет совета ВДНХ СССР наградил:

- серебряной медалью – м.н.с. В. К. Кайбияйнена за разработку схемы демонстрационного спектрометра ЭПР-400, конструктивное оформление и его отладку;
- бронзовой медалью – с.н.с. Р. Г. Суркина за разработку модели казанского цирка и проведение статистических испытаний её на прочность и устойчивость.

И. Б. Хайбуллин, Е. И. Штырков, М. М. Зарипов, М. Ф. Галляутдинов, Р. М. Баязитов открыли явление импульсной рекристаллизации разупорядоченных полупроводников (лазерный отжиг).

1975

30 января – принято постановление Президиума АН СССР “О научной деятельности и перспективах развития научных исследований в учреждениях Казанского филиала АН СССР”.

19 февраля – утверждён Совет молодых учёных КФТИ (председатель: м.н.с. Н. К. Андреев).

25 февраля – на базе мастерских образованы экспериментальная и механическая мастерские и криогенная группа.

Июнь – завершено строительство базы отдыха института “Голубой залив”.

1 июля – в отделе радиоспектроскопии образован сектор теоретической физики (заведующий: д.ф.-м.н., с.н.с. А. Р. Кессель).

Июль – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории физики металлов и сектора теоретической физики вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных и общественных наук АН СССР за 1974 год”.

21 июля – на должность зам. председателя Президиума КФ АН СССР по общим вопросам принят Р. Г. Каримов.

17 сентября – д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов награждён орденом Трудового Красного Знамени.

Зав. отделом радиоспектроскопии, член-корр. АН СССР, заслуженный деятель науки и техники ТАССР Б. М. Козырев награждён орденом Трудового Красного Знамени.

Установлена электронно-вычислительная машина (ЭВМ) Наири 3-1.

Сотрудники гелиевой станции и лаборатории физики металлов создали и запустили рефрижератор растворения He-3 в He-4 для радиоспектроскопических исследований.

1976

5 января – утверждена новая структура научных подразделений института:

- отдел радиоспектроскопии (состоит из лабораторий: парамагнитной релаксации; магнитного резонанса; электронного-парамагнитного резонанса; физики металлов и сектора теоретической физики);
- отдел квантовой акустики;
- отдел теории оболочек (состоит из лабораторий: нелинейной теории оболочек; теории оболочек, взаимодействующих со средой);
- отдел прикладной математики с группой обслуживания ЭВМ.

1 марта – д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари переведён с должности зав. отделом теории оболочек на должность с.н.с. лаборатории нелинейной теории оболочек по личной просьбе.

2–6 июня – V Всесоюзный симпозиум по спектроскопии активированных кристаллов (КФТИ – соорганизатор).

30 июня – д.т.н. М. С. Корнишин переведён на должность зав. отделом теории оболочек.

9 октября – умер акад. АН СССР Е. К. Завойский, зав. сектором физики (1946–1947).

Г. П. Вишневская награждена премией Всесоюзного химического общества им. Д. И. Менделеева.

М.н.с. В. А. Жихарев, м.н.с. Ф. Г. Черкасов стали лауреатами премии комсомола Татарии им. М. Джалиля в области науки 1976 года за работу по обнаружению и изучению явления спинового эха электронов проводимости.

1977

Апрель – научно-исследовательские работы сотрудников отделов квантовой акустики и теории оболочек вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных и общественных наук по АН СССР за 1976 год”.

16 мая – д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари уволен по собственному желанию в связи с уходом на пенсию по возрасту и принят на 0.5 ставки с.н.с. – консультанта в лабораторию нелинейной теории оболочек.

25 сентября–1 октября – комплексная проверка научной и научно-организационной деятельности КФТИ комиссией Бюро Отделения общей физики и астрономии АН СССР во главе с акад. АН СССР А. С. Боровиком-Романовым.

Изданы монографии:

- В. А. Голенищев-Кутузов, В. В. Самарцев, Н. К. Соловаров, Б. М. Хабибуллин “Магнитная квантовая акустика”;
- И. А. Сафин, Д. Я. Осокин “Ядерный квадрупольный резонанс в соединениях азота”;
- М. А. Ильгамов, В. А. Иванов, Б. В. Гулин “Прочность, устойчивость и динамика оболочек с упругим наполнителем”.

1978

2 февраля – Совет Министров ТАССР принял решение об установлении мемориальной доски, посвящённой выдающемуся советскому физическому Герою Социалистического Труда, лауреату Ленинской и Государственной премий СССР, академику Е. К. Завойскому, на фасаде здания Казанского филиала АН СССР (ул. Лобачевского, д. 2/31)

Март – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории физики металлов вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных и общественных наук по АН СССР за 1977 год”.

11 мая – ст. инженер М. В. Талдыкин награждён серебряной медалью ВДНХ СССР за разработку и создание установки по управлению деформацией тела в жидкости.

М.н.с. В. Ф. Тарасов утверждён участником ВДНХ СССР.

10 июля – произошли структурные изменения в научных подразделениях института:

- отдел радиоспектроскопии реорганизован в отдел физики твёрдого тела и отдел радиоспектроскопии;

- создан сектор ЭПР твёрдого тела в составе отдела радиоспектроскопии;
- лаборатория ЭПР переименована в лабораторию физики твёрдого тела;
- лаборатория парамагнитной релаксации переименована в лабораторию ЭПР и парамагнитной релаксации.

Утверждена следующая структура отделов:

- Отдел физики твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов):
 - лаборатория физики твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов);
 - сектор теоретической физики (заведующий: д.ф.-м.н. А. Р. Кессель);
 - сектор ЭПР твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н. Ю. В. Яблоков);
 - лаборатория физики металлов (заведующий: к.ф.-м.н. Э. Г. Харахашьян).
- Отдел радиоспектроскопии (заведующий: член-корр. АН СССР Б. М. Козырев):
 - лаборатория ЭПР и парамагнитной релаксации (заведующий: член-корр. АН СССР Б. М. Козырев);
 - лаборатория ядерного магнетизма (заведующий: д.ф.-м.н. И. А. Сафин).

Октябрь – введена в эксплуатацию ЭВМ ЕС-1033.

16 ноября – в вычислительном центре института образована группа внешних устройств ЭВМ (руководитель: А. В. Марин).

Ноябрь – приобретён спектрометр ЯМР СХР-90 фирмы Брукер (ФРГ).

В. В. Самарцев и Е. И. Штырков предсказали оптическую эхо-голографию и провели исследования в области динамической голографии.

На основе группы по выращиванию монокристаллов создана группа роста кристаллов, подчинённая дирекции.

1979

Апрель – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории физики металлов, отделов квантовой акустики и теории оболочек вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1978 год”.

25 мая – зав. отделом математики В. Д. Чугунов освобождён от занимаемой должности по собственному желанию. Зам. директора по науке С. Ф. Коротков назначен и.о. зав. отделом математики.

21 октября – умер член-корр. АН СССР Б. М. Козырев, зав. отделом радиоспектроскопии и зав. лабораторией ЭПР и парамагнитной релаксации (1947–1979). К.ф.-м.н., с.н.с. И. В. Овчинников назначен и.о. зав. лабораторией ЭПР и парамагнитной релаксации.

22 ноября – д.ф.-м.н. А. Р. Кессель и д.ф.-м.н. И. А. Сафин совместно с Н. Н. Крайник и С. Н. Поповым из ФТИ

им. А. Ф. Иоффе АН СССР (г. Ленинград) получили диплом на открытие № 220 за обнаружение явления электроакустического эха в пьезоэлектрических кристаллах.

1980

Июнь – научно-исследовательские работы сотрудников отдела квантовой акустики вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1979 год”.

Введена в эксплуатацию вторая ЭВМ ЕС-1033.

Декабрь – ст. инженер А. А. Монахов награждён бронзовой медалью ВДНХ СССР за создание и внедрение в отрасли акустического парамагнитного спектрометра.

Приобретён модифицированный двухдиапазонный спектрометр ЭПР ERS-230.

1981

23 января – умер д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари, директор института (1946–1972); зав. сектором механики (1946–1947, 1953–1965), зав. отделом теории оболочек (1965–1976).

Февраль – с момента создания азотной станции в институте получено 100 тыс. литров жидкого гелия.

Апрель – тематические исследования сотрудников лаборатории физики металлов вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1980 год”.

6 мая – КФТИ награждён Дипломом ВЦСПС по итогам Всесоюзного общественного смотра состояния условий и охраны труда 1980 года.

Май – ст. инженеру Р. М. Баязитову, ст. инженеру М. Ф. Галютдинову, директору института М. М. Зарипову, с.н.с. И. Б. Хайбуллину, с.н.с. Е. И. Штыркову вручены знаки “Изобретатель СССР”.

17–19 июня – II Всесоюзный симпозиум по световому эхо (КФТИ – соорганизатор).

2 ноября – Главный комитет ВДНХ СССР наградил:

- Дипломом I степени – КФТИ за обнаружение эффекта и разработку способа лазерного отжига полупроводниковых ионно-легированных слоёв;
- золотой медалью – зав. лабораторией М. М. Зарипова за научное обоснование и разработку физических основ метода, непосредственное участие и организацию комплексных исследований по проблеме лазерного отжига полупроводников;
- бронзовой медалью – зав. лабораторией И. А. Сафина за открытие явления электроакустического (поляризационного) эха и выяснение его физической природы.

С.н.с. И. Б. Хайбуллин, с.н.с. Е. И. Штырков, ст. инженер М. Ф. Галютдинов, ст. инженер Р. М. Баязитов,

зав. сектором А. Р. Кессель, с.н.с. Б. П. Смоляков, м.н.с. В. М. Берёзов утверждены участниками ВДНХ СССР.

30 ноября – 3 декабря – комплексная проверка научной и научно-организационной деятельности КФТИ комиссией Отделения общей физики и астрономии АН СССР во главе с членом-корр. АН СССР К. А. Валиевым.

Д.ф.-м.н., проф. Ю. В. Яблоков награждён орденом “Знак Почёта”.

Д.т.н., зав. отделом теории оболочек М. С. Корнишину присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки и техники Татарской АССР”.

Приобретены мёссбауэровская лаборатория (ВНР) и спектрометр ЯМР СХР-100 фирмы Брукер (ФРГ).

1982

11 февраля – д.ф.-м.н. М. М. Зарипов освобождён от обязанностей председателя Президиума КФ АН по личной просьбе, при этом он продолжал исполнять обязанности директора института. Председателем Президиума Казанского филиала назначен член-корр. АН СССР П. А. Кирпичников.

23 июня – вышло постановление Бюро Отделения общей физики и астрономии АН СССР об увековечении памяти акад. Е. К. Завойского в связи с исполняющимся 75-летием со дня рождения, и в том числе о присвоении имени акад. Е. К. Завойского Казанскому физико-техническому институту КФ АН СССР.

16 августа – умер д.ф.-м.н. Э. Г. Харахашьян, зав. лабораторией физики металлов (1974–1982). К.ф.-м.н., с.н.с. И. А. Гарифуллин назначен и.о. зав. лабораторией физики металлов.

19 сентября – умер к.ф.-м.н. Ф. А. Маковский, зав. лабораторией полупроводников (1962–1968).

26 октября – Главный комитет ВДНХ СССР наградил инженера Г. Г. Закирова бронзовой медалью за экспериментальное обнаружение и исследование ультрадисперсных ионно-легированных слоёв германия для записи и хранения оптической информации, преобразование световой энергии в тепловую светоприёмников ИК-области спектров.

Ноябрь – тематические исследования сотрудников отдела квантовой акустики и лаборатории ядерного магнетизма вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1981 год”.

6 декабря – в структуре научных подразделений института произошли следующие изменения:

- сектор теоретической физики реорганизован в лабораторию теоретической физики;
- сектор ЭПР твёрдого тела реорганизован в лабораторию ЭПР твёрдого тела;
- из отдела физики твёрдого тела выведены лаборатория физики металлов и теоретической физики;

- образован отдел физики магнитных явлений (заведующий: д.ф.-м.н. А. Р. Кессель);
- лаборатории теоретической физики и физики металлов введены в отдел физики магнитных явлений.

13 декабря – Президиум АН СССР и Президиум ЦК профсоюза объявили благодарность КФТИ и наградили Почётной грамотой по итогам общественного смотра по охране труда и культуре производства в учреждениях АН СССР в 1981–1982 гг.

Д.ф.-м.н., с.н.с. Е. И. Штырков в составе коллектива учёных из ГОИ (г. Ленинград), ИФАН БССР (г. Минск), ИФАН УССР (г. Киев), ФИАН (г. Москва) удостоен Государственной премии СССР 1982 года в области науки за цикл работ “Физические основы динамической голографии и новые методы преобразований пространственной структуры световых пучков”.

Д.ф.-м.н., зав. отделом квантовой акустики В. А. Голенищеву-Кутузову присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки Татарской АССР”.

Запущена в эксплуатацию новая азотная станция АЖ-0.05.

Издана монография А. Р. Кесселя, Г. О. Берима “Магнитный резонанс изинговых магнетиков”.

1983

3 января – зав. лабораторией М. А. Ильгамов переведён в состав Президиума КФ АН СССР на должность зам. председателя Президиума, при этом он продолжал заведовать лабораторией теории оболочек, взаимодействующих со средой, на общественных началах.

15 февраля – зав. лабораторией теоретической физики А. Р. Кессель избран по конкурсу на должность зав. отделом теоретической физики.

1 марта – учёный секретарь Президиума КФ АН СССР А. Н. Гильманов переведён в КФТИ на должность с.н.с. в лабораторию ядерного магнетизма, а м.н.с. Б. М. Одинцов – в состав Президиума Казанского филиала на должность учёного секретаря.

2 марта – исполком Казанского городского Совета народных депутатов принял решение о присвоении улице в Советском районе г. Казани наименования “академика Е. К. Завойского”.

Май – сотрудникам института А. А. Бухараеву, М. Ф. Галляудинову, А. Н. Гильманову, В. А. Голенищеву-Кутузову, Ф. Ф. Губайдуллину, М. М. Зарипову, С. А. Мигачёву, Р. Г. Суркину, Е. А. Туриянскому, Е. И. Штыркову вручены знаки “Изобретатель СССР”.

Декабрь – тематические исследования сотрудников отделов квантовой акустики и теории оболочек, лаборатории ЭПР твёрдого тела вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1982 год”.

Приобретён электромагнит для ЯМР спектрометра СХР-100 фирмы Брукер (ФРГ).

Монография В. А. Голенищева-Кутузова, В. В. Самарцева, Н. К. Соловарова, Б. М. Хабибуллина “Магнитная квантовая акустика” издана в Англии на английском языке.

1984

11 апреля – в составе отдела теории оболочек создан сектор динамики и прочности внешних нагрузок автомобиля (заведующий: к.т.н. С. К. Черников).

Апрель – д.ф.-м.н., проф., зам. председателя Президиума КФ АН СССР М. А. Ильгамову присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки и техники Татарской АССР”.

4 мая – в здании Казанского филиала АН СССР (ул. Лобачевского, д. 2/31) открыта мемориальная доска в честь члена-корр. АН СССР, заслуженного деятеля науки и техники Татарской АССР Б. М. Козырева.

20–22 июня – Всесоюзная конференция “Магнитный резонанс в конденсированных средах (физические аспекты)” (МР-84), приуроченная к 40-летию открытия явления ЭПР академиком Е. К. Завойским (КФТИ – соорганизатор).

Июнь – тематические исследования сотрудников лабораторий теоретической физики и нелинейной теории оболочек вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1983 год”.

10 августа – Совет Министров СССР присвоил имя академика Е. К. Завойского Казанскому физико-техническому институту КФ АН СССР (КФТИ им. Е. К. Завойского КФ АН СССР).

Приобретены азотная ожижительная станция АЖА-0.04М; ЭВМ ЕС-1045; ЭПР спектрометр РЭС-231 (ГДР).

Изданы монографии:

- Э. А. Маныкин, В. В. Самарцев “Оптическая эхоспектроскопия”;
- У. Н. Закиров “Механика релятивистских космических полётов”.

1985

28 января – в здании КФТИ им. Е. К. Завойского КФ АН СССР (ул. Сибирский тракт, д. 10/7) открыта мемориальная доска в честь заслуженного деятеля науки РСФСР и ТАССР, д.ф.-м.н., проф. Х. М. Муштари.

Сентябрь – тематические исследования сотрудников отдела физики магнитных явлений, лабораторий ЭПР и парамагнитной релаксации и теоретической физики вошли в перечень “Важнейшие достижения в области естественных наук АН СССР за 1984 год”.

1–4 октября – III Всесоюзный симпозиум по световому эхо и когерентной спектроскопии (г. Харьков) (КФТИ – соорганизатор).

12–16 ноября – комплексная проверка научной и научно-организационной деятельности КФТИ комиссией Отделения общей физики и астрономии АН СССР во главе с акад. АН СССР А. С. Боровиком-Романовым.

Ноябрь – организованы проблемные лаборатории по прочности и надёжности конструкций тракторов и по робототехнике.

Декабрь – Главный комитет ВДНХ СССР наградил:

- Дипломом III степени – КФТИ им. Е. К. Завойского за участие в выставке “Вклад молодежи в научно-технический прогресс”;
- бронзовой медалью – м.н.с. Р. Н. Мифтахова за работу “Медико-биологические аспекты биомеханики мягких оболочек желудка”;
- бронзовыми медалями – инженеров В. А. Кирсанова и Г. С. Шакурова за прибор для обнаружения нарушений герметичности нефтяных и газовых скважин с одновременным определением местоположения повреждённого участка.

Инженер Н. Р. Садыков утверждён участником ВДНХ СССР.

Осуществлена замена ЭВМ ЕС-1033 на ЭВМ ЕС-1045.

1986

21 января – Учёный совет КФТИ им. Е. К. Завойского поддержал выдвижение на соискание Ленинской премии 1986 года цикла работ Ю. Н. Молина, А. Л. Бучеренко, Р. З. Сагдеева, К. М. Салихова, Е. Л. Франкевич “Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях” (Институт химической кинетики и горения СО АН СССР, г. Новосибирск).

25 февраля – к.ф.-м.н. Ж. М. Сахабутдинов избран зав. проблемной лабораторией прочности и надёжности машин, а к.ф.-м.н. В. Л. Федяев – зав. проблемной лабораторией по робототехнике.

5 мая – вышло постановление ООФА АН СССР, поддерживающее ходатайство КФТИ им. Е. К. Завойского КФ АН СССР, об издании биобиблиографии члена-корр. АН СССР Б. М. Козырева.

23–30 мая – Всесоюзная школа по теории взаимодействия оболочек со средами (КФТИ – организатор).

9–11 июня – выездная сессия Научного совета по проблеме “Радиоспектроскопия конденсированных сред” (КФТИ – соорганизатор).

15 ноября – утверждена новая структура института.

- Научные подразделения:
 - лаборатория физики твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов);
 - лаборатория ЭПР твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. Ю. В. Яблоков);
 - лаборатория теоретической физики (заведующий: д.ф.-м.н., проф. А. Р. Кессель);
 - лаборатория физики металлов (заведующий: к.ф.-м.н. И. А. Гарифуллин);

- лаборатория ЭПР и парамагнитной релаксации (заведующий: д.ф.-м.н., проф. И. В. Овчинников);

- лаборатория ядерного магнетизма (заведующий: д.ф.-м.н. И. А. Сафин);

- лаборатория квантовой акустики (заведующий: д.ф.-м.н., проф. В. А. Голенищев-Кутузов);

- лаборатория математического моделирования процессов фильтрации (заведующий: к.ф.-м.н. Ф. М. Мухаметзянов).

Отдел механики оболочек (заведующий: д.т.н., проф. М. С. Корнишин):

- лаборатория нелинейной механики оболочек (заведующий: д.т.н., проф. М. С. Корнишин);

- лаборатория динамики и прочности машин (заведующий: к.т.н. С. К. Черников).

Отдел механики сплошных сред (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. А. Ильгамов):

- лаборатория теории оболочек, взаимодействующих со средой (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. А. Ильгамов);

- лаборатория вычислительной газодинамики (заведующий: к.ф.-м.н. Ж. М. Сахабутдинов);

- лаборатория моделирования технологических процессов (заведующий: к.ф.-м.н. В. Л. Федяев).

Группа роста кристаллов.

- Научно-вспомогательные подразделения:

- вычислительный центр;
- библиотека;
- фотолаборатория;
- научный архив;
- группа ФЭС;
- машбюро;
- множительное бюро;
- группа КИП.

- Производственные подразделения.

- Младший обслуживающий персонал.

- Административно-управленческий персонал.

- Аппарат Президиума КФ АН СССР.

Д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллин награждён орденом “Знак Почёта”.

Приобретён спектрофотометр Спеккорд М-40 (ГДР).

Издана монография Б. М. Одинцова “Электронно-ядерный эффект Оверхаузера в растворах”.

1987

19 марта – член-корр. АН СССР П. А. Кирпичников освобождён от обязанностей председателя Президиума КФ АН СССР по собственному желанию. На эту должность назначен член-корр. АН СССР В. Е. Алемасов.

Март – н.с. У. Н. Закиров награждён Федерацией космонавтики СССР медалью им. С. П. Королёва за не-

посредственное участие в обеспечении выполнения программ космических исследований в СССР.

1 апреля – образована группа научно-технической информации.

1 июня – к.ф.-м.н. И. А. Гарифуллин освобождён от должности зав. лабораторией физики металлов по личной просьбе. Д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум назначен зав. лабораторией физики металлов.

22–26 июня – VI Международная конференция “Основы теоретических вычислений” (КФТИ – соорганизатор).

29 июня–1 июля – выездная сессия Научного совета АН СССР по проблеме “Ультразвук” по акустоэлектронике и физической акустике твёрдого тела (КФТИ – соорганизатор).

Сентябрь – создана группа промышленной энергетики.

1 октября – ИЯЛИ им. Г. Ибрагимова КФ АН СССР переведён на самостоятельный баланс.

Октябрь – с.н.с. В. Н. Шлянников в составе коллектива учёных из Киева (А. А. Захайко, С. Н. Шукаев) и Запорожья (Н. В. Степнов, Ф. С. Судницын) удостоен премии им. Ленинского комсомола 1987 года за “Разработку методов исследования и прогнозирования долговечности элементов газотурбинных двигателей с учётом конструктивно-технологических факторов изготовления и эксплуатации”.

29 ноября–1 декабря – выездная сессия Научного совета АН СССР по проблеме биомеханики (КФТИ – организатор).

Ноябрь – в.н.с. И. А. Гарифуллин, с.н.с. В. А. Жихарев, зав. отделом механики оболочек М. С. Корнишин, в.н.с. Н. К. Соловаров награждены Почётными грамотами ЦК КПСС, СМ СССР, ВЦСПС и ЦК ВЛКСМ за достижения наивысших результатов во Всесоюзном социалистическом соревновании в честь 70-летия Великой Октябрьской социалистической революции.

1988

1 января – д.т.н. М. С. Корнишин освобождён от должности зав. отделом механики оболочек по собственному желанию и переведён г.н.с. в лабораторию нелинейной механики оболочек. К.ф.-м.н., с.н.с. Н. М. Якупов назначен и.о. зав. лабораторией нелинейной механики оболочек.

16 февраля – д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов освобождён от обязанностей директора института по собственному желанию.

Февраль – н.с. У. Н. Закиров награждён медалью им. акад. М. В. Келдыша.

1 марта – д.ф.-м.н. И. А. Сафин освобождён от должности зав. лабораторией ядерного магнетизма по собственному желанию и переведён г.н.с. в лабораторию ядерного магнетизма. И.о. зав. лабораторией назначен в.н.с. Д. Я. Осокин.

5 марта – состоялось общее собрание научных сотрудников КФТИ им. Е. К. Завойского, на котором из 5 кандидатов на должность директора института избран д.ф.-м.н. К. М. Салихов.

Март – тематические исследования сотрудников лабораторий ЭПР и парамагнитной релаксации и квантовой акустики вошли в перечень “Важнейшие достижения в области общественных и естественных наук АН СССР за 1986 год”.

28 апреля – д.ф.-м.н. К. М. Салихов приступил к исполнению обязанностей директора института.

16 мая – д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллин назначен зам. директора КФТИ по науке.

8 июня – приказом директора института распределены должностные обязанности между членами дирекции: С. Ф. Коротков, зам. директора по науке, осуществляет организационное руководство в механико-математических подразделениях, а И. Б. Хайбуллин, зам. директора по науке – в физических лабораториях КФТИ.

22–24 июня – Всесоюзная конференция “Применение магнитного резонанса в народном хозяйстве” (КФТИ – соорганизатор).

23–29 июня – III Всесоюзное совещание-семинар “Актуальные проблемы механики оболочек” (КФТИ – соорганизатор).

24 июня – организован отдел вычислительных систем и автоматизации научных исследований (руководитель: В. И. Рахамов).

14 июля – Главный комитет ВДНХ СССР наградил серебряной медалью м.н.с. Н. А. Саинова за обоснование способа определения температуры поверхности кристаллов при импульсном нагреве.

1 сентября – с.н.с. Н. Р. Яфаев освобождён от обязанностей учёного секретаря и переведён с.н.с. в лабораторию ЭПР твёрдого тела. На должность учёного секретаря назначен м.н.с. В. А. Кирсанов.

14 сентября – Бюро Отделения общей физики и астрономии АН СССР утвердило заместителями директора КФТИ им. Е. К. Завойского по научной работе к.ф.-м.н. С. Ф. Короткова и д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллина.

В соответствии с постановлением Бюро Отделения общей физики и астрономии АН СССР в КФТИ разрешено открыть аспирантуру по специальностям: 01.04.11 “Физика магнитных явлений”; 01.04.17 “Химическая физика”; 01.04.05 “Оптика”.

Сентябрь – приобретены первые в институте персональные компьютеры марки РС XT-16 (5 штук).

6 октября – д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллину, Я. В. Фаттахову присуждена международная премия АН СССР и АН ГДР 1988 года в составе авторского коллектива советских учёных и учёных ГДР за работу по теме “Разработка физических основ ионно-импульсной модификации микроэлектроники”.

25 октября – д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллину, д.ф.-м.н. Е. И. Штыркову, д.ф.-м.н. М. М. Зарипову, к.ф.-м.н.

Р. М. Баязитову, к.ф.-м.н. М. Ф. Галютдинову присуждена Государственная премия СССР в области науки и техники 1988 года за цикл работ “Открытие явлений импульсной ориентированной кристаллизации твёрдых тел (лазерный отжиг)”, опубликованных в 1974–1986 гг.

26 декабря – создан диссертационный совет по присуждению учёной степени доктора физико-математических наук (Д 003.71.01) по специальностям: 01.04.11 “Физика магнитных явлений” и 01.04.17 “Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва” (председатель совета: д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов).

КФТИ им. Е. К. Завойского награждён Дипломом II степени ВДНХ СССР за участие в межотраслевой тематической выставке “Изобретательство и рационализация-88”, а в.н.с. Я. И. Кравцов и с.н.с. Э. А. Буторин награждены серебряными медалями за изготовление газодинамического воспламенителя.

Изданы монографии:

- Ю. В. Яблоков, В. К. Воронкова, Л. В. Мосина “Парамагнитный резонанс обменных кластеров”;
- В. А. Голенищев-Кутузов, В. В. Самарцев, Б. М. Хабибуллин “Импульсная оптическая и акустическая когерентная спектроскопия”.

1989

1 января – утверждена новая структура научных подразделений института:

- лаборатория физики твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов);
- лаборатория радиационной физики твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллин);
- лаборатория нестационарной лазерной спектроскопии (заведующий: д.ф.-м.н. Е. И. Штырков);
- лаборатория электронного парамагнитного резонанса твёрдого тела (заведующий: д.ф.-м.н., проф. Ю. В. Яблоков);
- лаборатория теоретической физики (заведующий: д.ф.-м.н., проф. А. Р. Кессель);
- лаборатория физики металлов (заведующий: д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум);
- лаборатория ЭПР и парамагнитной релаксации (заведующий: д.ф.-м.н., проф. И. В. Овчинников);
- лаборатория ядерного магнетизма (заведующий: д.ф.-м.н. Д. Я. Осокин);
- группа ЯМР интроскопии (руководитель: к.ф.-м.н. Н. К. Андреев);
- лаборатория квантовой акустики (заведующий: д.ф.-м.н., проф. В. А. Голенищев-Кутузов);
- лаборатория нелинейной оптики (заведующий: д.ф.-м.н. В. В. Самарцев);

- лаборатория математического моделирования процессов фильтрации (заведующий: к.ф.-м.н. А. И. Никифоров);
- лаборатория нелинейной механики оболочек (заведующий: к.ф.-м.н. Н. М. Якупов);
- лаборатория динамики и прочности машин (заведующий: к.т.н. С. К. Черников);
- лаборатория химической физики (заведующий: д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов);
- лаборатория теплоэнергетики (заведующий: член-корр. АН СССР В. Е. Алемасов).

- Отдел механики сплошной среды (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. А. Ильгамов):
 - лаборатория механики сплошной среды (заведующий: д.ф.-м.н., проф. М. А. Ильгамов);
 - лаборатория нестационарных процессов в сплошных средах (заведующий: к.ф.-м.н. А. Н. Гильманов);
 - лаборатория вычислительной газодинамики (заведующий: к.ф.-м.н. Ж. М. Сахабутдинов);
 - лаборатория моделирования технологических процессов (заведующий: к.ф.-м.н. В. Л. Федяев).
- Отдел вычислительных систем и автоматизации научных исследований (заведующий: В. И. Рахамов) в составе следующих групп:
 - автоматизации исследований;
 - технического обслуживания ЭВМ;
 - эксплуатации и математического обеспечения.

16–17 января – к.ф.-м.н. С. Ф. Коротков освобождён от обязанностей зам. директора КФТИ по научной работе по собственному желанию и переведён в.н.с. в лабораторию математического моделирования процессов фильтрации. Д.ф.-м.н. М. А. Ильгамов назначен на должность зам. директора по науке.

28 февраля – на базе института открыта кафедра химической физики Казанского государственного университета (зав. кафедрой: д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов).

14–15 марта – Объединённый пленум секции “Физика и химия редкоземельных полупроводников” Научного совета по физике и химии полупроводников при Президиуме АН СССР и секции “Материалы на основе f -элементов для электронной техники” Научного совета по проблеме “Физико-химические основы полупроводникового материаловедения” (КФТИ – соорганизатор).

10 апреля – Б. М. Одинцов освобождён от обязанностей учёного секретаря Президиума КФ АН СССР и переведён на должность в.н.с. в лабораторию химической физики.

12 мая – группа ЯМР интроскопии включена в состав лаборатории химической физики.

23–26 мая – IV Всесоюзный симпозиум “Световое эхо и пути его практических применений” (КФТИ – соорганизатор).

6–10 июня – рабочее совещание “Магнитные свойства и радиоспектроскопия ВТСП материалов” (КФТИ – со-организатор).

14 июля – по решению Федерации космонавтики СССР за заслуги в области космических исследований награждены:

- Алемасов В.Е., председатель Президиума КФ АН СССР – медалью им. М. В. Келдыша;
- Ильгамов М.А., зам. директора по науке – медалью им. С. П. Королёва;
- Коротков С.Ф., в.н.с. – медалью им. Ю. А. Гагарина;
- Закиров У.Н., с.н.с. – медалью им. Ю. А. Гагарина;
- Корнишин М.С., г.н.с. – Почётной грамотой им. Ю. А. Гагарина;
- Ганеева М.С., в.н.с. – Почётной грамотой им. Ю. А. Гагарина;
- Фокин А.П., м.н.с. – Почётной грамотой Федерации космонавтики СССР;
- Давыдов Р.Н., м.н.с. – Почётной грамотой Федерации космонавтики СССР.

Декабрь – Главный комитет ВДНХ СССР наградил:

- серебряной медалью – в.н.с. Б. М. Одинцова за написание и подготовку к изданию монографии “Электронно-ядерный эффект Оверхаузера в растворах”;
- серебряной медалью – с.н.с. Р. Г. Зарипова за работу “Исследования периодических ударных волн”, создание технологической установки;
- серебряной медалью – аспиранта III года обучения Р. Г. Яхина за разработку, конструирование и изготовление основных элементов конструкции датчика импульсного ядерно-электронного резонанса. Работа “Математическое моделирование процессов, протекающих при плавке в электродуговых печах” отмечена Почётной грамотой ВДНХ СССР.

Состоялась выездная сессия Отделения физико-технических проблем энергетики АН СССР (КФТИ – со-организатор).

Приобретён фемтосекундный лазер фирмы “Авеста Лтд.” (СССР).

Издана монография А. И. Голованова, М. С. Корнишина “Введение в метод конечных элементов статики тонких оболочек”.

1990

1 января – при КФТИ создано самостоятельное структурное подразделение – Казанское отделение научно-учебного комплекса Академии наук СССР и Министерства образования РСФСР (Казанское ОНУК) (директор: В. Б. Кузнецов).

16 января – д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов утверждён главным редактором журнала “Магнитный резонанс и его применения” (“Applied Magnetic Resonance”).

23 января – принято постановление Президиума АН СССР “О деятельности и перспективах развития

Казанского филиала АН СССР”, в котором Казанский филиал АН СССР преобразован в Казанский научный центр (КНЦ) АН СССР и определены основные направления развития институтов КНЦ АН СССР.

11 апреля – утверждён состав редколлегии журнала “Магнитный резонанс и его применения”.

Апрель – введена в эксплуатацию ЭВМ ЕС-1046.

10 октября – получено разрешение на строительство корпуса мастерской на территории института (ул. Сибирский тракт, д. 10/7).

Д.ф.-м.н. В. В. Самарцев избран действительным членом Российского оптического общества.

1991

Февраль – приобретена первая в институте копировальная машина Ксерокс-1038.

19 марта – принято постановление Президиума АН СССР “О частичном изменении состава Президиума КНЦ АН СССР”: д.ф.-м.н. К. М. Салихов утверждён зам. председателя Президиума; к.ф.-м.н. А. А. Илюшин – гл. учёным секретарём Президиума КНЦ АН СССР.

4 апреля – в связи с 30-летием со дня исторического полёта Ю. А. Гагарина Бюро Президиума Федерации космонавтики СССР наградило:

- Алемасова В.Е., председателя Президиума КНЦ АН СССР, члена-корр. АН СССР, д.т.н., проф. – медалью им. К. Э. Циолковского;
- Салихова К.М., директора КФТИ, зам. председателя Президиума КНЦ АН СССР, д.ф.-м.н., проф. – медалью им. М. В. Келдыша;
- Хайбуллина И.Б., зам. директора КФТИ, д.ф.-м.н. – медалью им. Ю. А. Гагарина;
- Корнишина М.С., г.н.с., д.т.н. – медалью им. С. П. Королёва;
- Осокина Д.Я., в.н.с., д.ф.-м.н. – медалью им. Н. А. Пилюгина;

• Юбилейной медалью “30 лет со дня полёта Ю. А. Гагарина”:

- Ганееву М.С., в.н.с., д.т.н.;
- Короткова С.Ф., в.н.с., к.ф.-м.н.;
- Илюшина А.А., гл. учёного секретаря Президиума КНЦ АН СССР, к.ф.-м.н.;
- Музеева И.Х., гл. инженера;
- Давыдова Р.И., м.н.с.

• Дипломом им. Ю. А. Гагарина:

Риделя В.В., с.н.с., к.ф.-м.н.

• Почётной грамотой Федерации космонавтики СССР:

- Якупова Н.М., зав. лаб. НМО, к.ф.-м.н.;
- Зарипова Р.Г., с.н.с., к.т.н.;
- Шайдукова И.Г., н.с.;
- Талдыкина М.В., м.н.с.

23 апреля – на базе подразделения КФТИ организован Отдел энергетики КНЦ АН СССР на правах

- самостоятельного научного учреждения АН СССР (директор: член-корр. АН СССР В. Е. Алемасов).
- 30 апреля – умер д.т.н., проф. М. С. Корнишин, зав. отделом механики оболочек (1965–1987).
- 13 мая – на базе лаборатории физики металлов до 31.12.1991 г. создан временный творческий коллектив (ВТК) “Сверхпроводимость” (руководитель: д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум).
- 28 мая – на базе подразделений КФТИ организован Институт механики и машиностроения КНЦ АН СССР (ИММ КНЦ АН СССР) (директор: д.ф.-м.н., проф. М. А. Ильгамов).
- 28 июня – зам. директора по науке КФТИ им. Е. К. Завойского М. А. Ильгамов освобождён от занимаемой должности в связи с назначением директором ИММ КНЦ АН СССР.
- 1 июля – д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллину присвоено почётное звание “Заслуженный изобретатель Татарской АССР”.
- 19 сентября – Кабинет Министров Татарской АССР принял постановление “Об организации и проведении вручения Международной премии им. Е. К. Завойского за выдающийся вклад в современное развитие ЭПР”.
- Сентябрь – Международная премия им. Е. К. Завойского вручена Вильяму Б. Мимсу (США) за вклад в создание электронной спин-эхо спектроскопии и её применения в физике, химии и биологии.
- Октябрь – вышел первый том (3 выпуска) журнала “Магнитный резонанс и его применения”.
- 13 ноября – зав. лабораторией ядерного магнетизма Д. Я. Осокин освобождён от занимаемой должности и переведён в.н.с. в лабораторию ядерного магнетизма. Зав. лабораторией назначен с.н.с. В. Л. Матухин.
- 21 ноября – Указом Президента РСФСР Б. Н. Ельцина восстановлена Российская академия наук (РАН) как высшее научное учреждение России.
- 11 декабря – д.ф.-м.н., проф. И. Б. Хайбуллин избран членом-корр. РАН.
- Состоялся Советско-германский семинар по редкоземельным материалам (лаборатория физики металлов КФТИ – соорганизатор).

1992

- 14 января – принято постановление Президиума РАН “Об организации Центра спектроскопии при КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН”. На базе лабораторий соответствующего профиля создан Центр радиоспектроскопии (научный руководитель: д.ф.-м.н. К. М. Салихов).
- 17 января – с.н.с. И. Н. Дюльдев переведён на должность зав. отделом вычислительных систем.
- Февраль – в КФТИ создана первая в Казани локальная сеть, объединяющая 3 компьютера.

- 11 марта – Президиум Федерации космонавтики России наградил:
- Овчинникова И.В., д.ф.-м.н., проф. – медалью им. К. Э. Циолковского;
 - Кесселя А.Р., д.ф.-м.н., проф. – медалью им. акад. М. С. Рязанского;
 - Голенищева-Кутузова В.А., д.ф.-м.н., проф. – медалью им. акад. М. С. Рязанского;
 - Яблокова Ю.В., д.ф.-м.н., проф. – медалью им. Ю. А. Гагарина;
 - Зарипова М.Р., в.н.с., к.ф.-м.н. – медалью им. акад. В. П. Макеева;
 - Андреева Н.К., с.н.с., к.ф.-м.н. – Почётной грамотой им. Ю. А. Гагарина.
- 19 марта – зам. директора по научной работе КФТИ И. Б. Хайбуллин переведён в Президиум Академии наук Татарстана (АНТ) в связи с утверждением на должность учёного секретаря Президиума АНТ.
- 20 марта – И. Б. Хайбуллин принят на должность зав. лабораторией радиационной физики твёрдого тела по совместительству. На него возложены обязанности зам. директора КФТИ по научной работе на общественных началах.
- 23 марта – с.н.с. В. Ф. Тарасов переведён на должность и.о. зам. директора КФТИ по научной работе.
- Март – в институте стала функционировать электронная почта.
- 1 мая – на базе криогенной группы организован отдел криогенной техники (заведующий: с.н.с. С. Я. Хлебников).
- 25–30 мая – Международный симпозиум “Кластеры – магнитные материалы” (КФТИ – организатор).
- 20 июня – В. А. Кирсанов освобождён от обязанностей учёного секретаря и переведён с.н.с. в лабораторию квантовой акустики. С.н.с. А. А. Бухараев назначен на должность учёного секретаря института.
- 30 июня–4 июля – 29 Всесоюзное совещание по физике низких температур (КФТИ – соорганизатор).
- 31 августа – зав. лабораторией квантовой акустики В. А. Голенищев-Кутузов освобождён от занимаемой должности по собственному желанию и принят на эту должность по совместительству. Руководство организационными работами лаборатории возложено на н.с. И. Ш. Ахмадуллина.
- 28–30 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор). Международная премия им. Е. К. Завойского вручена Бребису Блини (Великобритания) за вклад в теорию и практику ЭПР переходных ионов в кристаллах.
- 2 октября – бухгалтерия и планово-финансовая группа реорганизованы в экономический отдел (заведующая: Р. Б. Маликова).
- 6 октября – на общем собрании научных сотрудников института принят Устав КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН

12 октября – в лаборатории химической физики создана группа “Физические методы радиоспектроскопии” для объединения усилий между КФТИ и КНИРТИ по организации производства и внедрению в народное хозяйство результатов исследований и разработанных приборов (руководитель группы: с.н.с. Ф. Ф. Губайдуллин).

13 октября – на базе редакционно-издательской группы создана редакция журнала “Применение магнитного резонанса”.

Ноябрь – IV чтения по квантовой оптике (КФТИ – организатор).

Д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов избран академиком АНТ; д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов и д.ф.-м.н. И. А. Сафин избраны членами-корреспондентами АНТ.

Д.ф.-м.н., проф. Ю. В. Яблокову присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки РТ”.

Д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов избран феллоу Института проблемных исследований (Берлин, Германия) в 1992–1993 гг.

Изданы монографии:

- И. В. Евсеев, В. М. Ермаченко, В. В. Самарцев “Деполяризующие столкновения в нелинейной электродинамике”;
- Г. П. Вишневская, Л. С. Молочников, Р. Ш. Сафин “ЭПР в ионитах”.

1993

1 января – произведена реорганизация института:

- закрыты все существующие научные подразделения;
- образованы новые научные и научно-вспомогательные подразделения:
 - лаборатория молекулярной радиоспектроскопии (заведующий: д.ф.-м.н. И. В. Овчинников);
 - лаборатория радиационной физики (заведующий: д.ф.-м.н. И. Б. Хайбуллин);
 - лаборатория резонансных явлений (заведующий: д.ф.-м.н. А. Р. Кессель);
 - лаборатория физики перспективных материалов (заведующий: д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум);
 - лаборатория физико-химических процессов (заведующий: д.ф.-м.н. К. М. Салихов);
 - лаборатория моделирования физико-механических процессов (заведующий: к.т.н. С. К. Черников);
 - группа светового эха (руководитель: д.ф.-м.н. В. В. Самарцев);
 - группа роста кристаллов (руководитель: с.н.с. Е. Ф. Куковицкий);
 - редакция журнала “Применение магнитного резонанса” (гл. редактор: д.ф.-м.н. К. М. Салихов).

Февраль – научно-исследовательские работы сотрудников лабораторий резонансных явлений (дважды), радиационной физики, физико-химических процессов и

молекулярной радиоспектроскопии вошли в перечни “Важнейшие результаты в области естественных, технических, гуманитарных и общественных наук РАН за 1990 год”, “Важнейшие результаты в области естественных, технических, гуманитарных и общественных наук РАН за 1991 год”.

2 июня – приостановлена деятельность Казанского ОНУК РАН и МО РФ.

10 июня – создан совместный научно-исследовательский центр (АНТ, КНИИРЭ, КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, НПО ГИПО) “Физика поверхности и перспективные технологии” (научный руководитель по проблеме “Микроэлектроника”: член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин).

26 июня–4 июля – V Международный симпозиум по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (КФТИ – организатор).

Август – II Международная конференция по лазерной физике (LPHYS'93) (КФТИ – организатор).

28–29 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие ЭПР: многочастотный ЭПР” (КФТИ – со-организатор). Международная премия им. Е. К. Завойского вручена Артуру Швайгеру (Швейцария) за вклад в развитие импульсного ЭПР.

3 ноября – приобретены первые в институте лазерный принтер HP LaserJet 4М и цветной сканер HP ScanJet ПС.

19 ноября – КФТИ им. Е. К. Завойского посетил Президент РТ М. Ш. Шаймиев. Он познакомился с деятельностью института и его лабораторий.

Ноябрь – V чтения по квантовой оптике (КФТИ – организатор).

Д.ф.-м.н., проф. А. Р. Кессель избран академиком РАЕН.

Д.ф.-м.н., проф. М. М. Зарипов избран действительным членом Международной академии информатизации.

В отделе криогенной техники запущена станция нового поколения КГУ-40.

1994

1 января – вся допечатная подготовка журнала “Applied Magnetic Resonance” стала осуществляться в КФТИ им. Е. К. Завойского.

23 февраля – на Учёном совете института рассмотрен вопрос о стажёрах-исследователях. Решено это явление развивать дальше в практике института.

11 марта – общее собрание научных сотрудников КФТИ избрало К. М. Салихова директором института на новый срок.

Апрель – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории физики перспективных материалов и группы роста кристаллов вошли в перечень “Важнейшие результаты в области естественных, технических, гуманитарных и общественных наук РАН за 1992 год”.

1 мая – образован до 30 апреля 1995 года ВТК для разработки и создания перестраиваемого лазерного фемтосекундного спектрометра (руководитель: с.н.с. В. С. Лобков).

Июль – группа “Физические методы радиоспектроскопии” для объединения усилий между КФТИ и КНИРТИ по организации производства и внедрению в народное хозяйство результатов исследований и разработанных приборов прекратила своё существование.

Август – институт посетили Президент РТ М. Ш. Шаймиев, мэр города Казани К. Ш. Исхаков и Президент АН Татарстана М. Х. Хасанов. Они ознакомились с деятельностью института и его лабораторий в преддверии 27 Международного Амперовского конгресса.

22–27 августа – 27 Международный Амперовский конгресс, посвящённый 50-летию открытия ЭПР Е. К. Завойским (КФТИ – соорганизатор). Присуждены 3 Международные премии им. Е. К. Завойского:

- Джеймсу Р. Норрису (США) за вклад в определение молекулярной структуры парамагнитных частиц в реакционных центрах фотосинтеза;
- Я. С. Лебедеву (Россия) и Клаусу Мёбиусу (Германия) за вклад в развитие новых методов ЭПР и их применений в химии.

Август – III Международная конференция по лазерной физике (LPHYS'94) (КФТИ – соорганизатор).

Ноябрь – VI чтения по квантовой оптике (КФТИ – организатор).

Д.ф.-м.н. Е. И. Штыркову присуждено почётное звание “Заслуженный деятель науки РФ”; д.ф.-м.н., проф. И. В. Овчинникову – “Заслуженный деятель науки РТ”.

Д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихову присуждена государственная стипендия для выдающихся учёных России на 1994–1996 гг.

Д.ф.-м.н., проф. В. В. Самарцев избран членом-корр. РАЕН.

В институте создана локальная компьютерная сеть, объединяющая более 30 пользователей с выходом на электронные линии связи.

Ю. Е. Несмелову присуждена государственная стипендия Президента РФ для молодых учёных на 1994–1996 гг.

1995

13 апреля – состоялась Юбилейная научная сессия, посвящённая 50-летию Казанского научного центра РАН.

15 мая – в связи с 50-летием Казанского научного центра Президиум наградил Почётными грамотами КазНЦ РАН 34 сотрудника института: А. А. Анкушева, Р. М. Баязитова, Х. Г. Богданову, В. К. Воронкову, Н. В. Гайнутдинову, Ю. Г. Галяметдинову, Ф. Ф. Губайдуллину, И. Н. Дюльдеву, В. А. Жихареву, В. А. Зуйкову, Н. А. Карташёву, В. И. Кузьмину, Н. В. Курбатову, Н. Г. Куркину, С. Г. Львову, Р. Б. Ма-

ликову, С. А. Моисееву, Л. В. Мосину, В. М. Мусина, Х. Л. Мухтасарову, В. Ю. Петухову, В. А. Роль-Шилеву, К. М. Салихову, И. А. Сафина, Р. Ш. Сафина, Б. П. Смолякова, А. Н. Спиваковскую, И. П. Супрун, Ю. И. Таланова, В. И. Тарасова, В. А. Уланова, Г. Г. Халиуллина, С. Я. Хлебникова, М. М. Шакирзянова.

Май – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории физики перспективных материалов вошли в перечень “Важнейшие результаты в области естественных, технических, гуманитарных и общественных наук РАН за 1993 год”.

28 июня – Отделение общей физики и астрономии РАН приняло постановление “О работе Казанского физико-технического института КазНЦ РАН”, в котором одобрило направление научно-исследовательской работы КФТИ им. Е. К. Завойского и поздравило сотрудников с 50-летием института.

26 июля – Кабинет Министров Республики Татарстан принял постановление о создании и внедрении в эксплуатацию МР томографа.

Август – IV Международная конференция по лазерной физике (LPHYS'95) (КФТИ – соорганизатор).

25 сентября – в связи с 50-летием института решением дирекции и Учёного совета учреждён Диплом, который будет вручаться сотрудникам КФТИ и учёным из других институтов, внесшим и вносящим большой вклад в развитие КФТИ им. Е. К. Завойского. Первыми лауреатами Диплома КФТИ стали 32 сотрудника института: Р. З. Бариев, М. Л. Блатт, Х. Г. Богданова, А. А. Бухараев, К. А. Валиев, Г. П. Вишневская, И. А. Гарифуллин, В. А. Голенищев-Кутузов, М. М. Зарипов, В. А. Жихарев, А. Р. Кессель, С. Ф. Коротков, С. А. Лучкина, В. А. Роль-Шилеева, И. В. Овчинников, Д. Я. Осокин, В. В. Самарцев, К. М. Салихов, И. А. Сафин, Р. Ш. Сафин, Б. П. Смоляков, Н. К. Соловаров, В. Ф. Тарасов, Г. Б. Тейтельбаум, М. Л. Фалин, Б. М. Хабибуллин, Г. Г. Халиуллин, И. Б. Хайбуллин, С. Я. Хлебников, Е. И. Штырков, Ю. В. Яблоков, Н. Р. Яфаев.

27–29 сентября – проходили мероприятия, посвящённые 50-летию КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН:

- юбилейная научная сессия ООФА РАН;
- Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор);
- научная сессия, посвящённая 90-летию со дня рождения члена-корр. АН СССР Б. М. Козырева;
- вручение Международной премии им. Е. К. Завойского Джеймсу С. Хайду (США) за вклад в создание приборов и методологии ЭПР.

11 октября – д.ф.-м.н., проф., директору института К. М. Салихову и д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией А. Р. Кесселю присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки РФ”.

1 ноября – А. А. Бухараев освобождён от должности учёного секретаря и переведён на должность с.н.с. в лабораторию физико-химических процессов. На

должность учёного секретаря переведён с.н.с. Х. Л. Гайнутдинов.

Образован ВТК “Томограф – РТ” для создания и запуска низкополевого медицинского томографа (руководитель: д.ф.-м.н. М. С. Тагиров).

Ноябрь – VII чтения по световому эхо и квантовой оптике (КФТИ – организатор).

Д.ф.-м.н., проф. И. Б. Хайбуллин избран членом-корр. АНТ.

К.ф.-м.н., с.н.с. А. А. Бухараев награждён медалью II степени к ордену “За заслуги перед Отечеством”.

Д.ф.-м.н., проф. И. Б. Хайбуллину и д.ф.-м.н., проф. В. В. Самарцеву присвоено почётное звание “Заслуженный деятель науки РТ”.

Д.ф.-м.н., проф. А. Р. Кессель награждён медалью им. П. Л. Капицы РАН.

Н. В. Бердунов, Р. И. Хасанов, Р. А. Хасаншин стали соровскими аспирантами.

Издана монография Б. И. Кочелаева и Ю. В. Яблокова “The Beginning of Paramagnetic Resonance”.

1996

Июнь-июль – VI Международный симпозиум по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (КФТИ – организатор).

19–20 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – соорганизатор). Международная премия им. Е. К. Завойского вручена Джорджу Фейеру (США) за вклад в развитие магнитного резонанса в физике твёрдого тела и исследование фотосинтеза.

4–5 ноября – Международный минисимпозиум “Спиновая динамика”, приуроченный к 60-летию со дня рождения акад. АНТ, члена-корр. РАН, проф. К. М. Салихова (КФТИ – организатор).

11–12 ноября – VII чтения по квантовой оптике, посвящённые памяти проф. У. Х. Копвиллема (КФТИ – организатор).

6 декабря – на основе соглашения между КФТИ и Казанским НПО ВТИ создан совместный отдел телекоммуникационных технологий (заведующий: к.ф.-м.н. В. М. Мусин).

На базе КФТИ создан центр коллективного пользования (ЦКП) “Спиновая химия” (научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов).

Д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов награждён золотой медалью Международного общества ЭПР, а также ему присвоено почётное звание “Выдающийся учёный” государственного исследовательского института RIKEN (Япония).

Д.ф.-м.н. В. В. Самарцев избран членом-корр. РАН.

Ю. М. Вашакидзе, Р. А. Хасаншин стали соровскими аспирантами.

Аспирантке Т. Н. Львовой присуждена государственная стипендия Президента РФ для молодых учёных на 1996 г.

Издана монография К. М. Салихова “Magnetic Isotope Effect in Radical Reactions”.

1997

23 апреля – группа светового эха преобразована в лабораторию нелинейной оптики (заведующий: д.ф.-м.н. В. В. Самарцев).

30 мая – д.ф.-м.н., проф. К. М. Салихов избран членом-корр. РАН.

Май – научно-исследовательские работы сотрудников лаборатории молекулярной радиоспектроскопии вошли в перечень “Важнейшие результаты в области естественных, технических, гуманитарных и общественных наук РАН за 1995 год”.

23–26 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор). Международную премию им. Е. К. Завойского вручили К. А. Валиеву (Россия) за вклад в развитие теории спиновой релаксации.

20–22 ноября – Первая молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (КФТИ – соорганизатор).

20–22 ноября – I школа молодых учёных “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” (КФТИ – соорганизатор).

31 декабря – умер д.ф.-м.н. И. А. Сафин, зав. лабораторией ядерного магнетизма (1978–1988).

Создан опытный образец низкополевого медицинского ЯМР томографа с полным комплектом технической документации, обеспечивающим промышленное серийное производство.

1998

1 января – сверхнизкополевым магнитно-резонансный томограф МРТ-0.02-КФТИ установлен в многопрофильном клиническом лечебном объединении № 7 г. Казани.

16 февраля – КФТИ организовал совместно с Казанским государственным технологическим университетом учебно-научную лабораторию по исследованию строения и реакционной способности органических соединений со статусом научно-вспомогательного подразделения института (заведующий: в.н.с. Ю. Г. Галяметдинов).

18 марта – постановлением Президиума РАН утверждён в новой редакции Устав Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН

23–26 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор). Международная премия им. Е. К. Завойского

вручена Джеку Х. Фриду (США) за вклад в изучение молекулярного движения в жидкостях методом многочастотного ЭПР.

29–31 октября – Вторая молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (КФТИ – соорганизатор).

3–6 ноября – II школа молодых учёных “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” (КФТИ – соорганизатор).

30 ноября – академику АНТ, члену-корр. РАН, директору института К. М. Салихову присуждена Государственная премия РТ 1998 года в области науки и техники за цикл работ “Спиновая динамика элементарных физико-химических процессов”, опубликованных в 1974–1997 гг.

К.ф.-м.н., с.н.с. И. А. Файзрахманову и члену-корр. РАН и АНТ, гл. учёному секретарю АНТ, зав. лабораторией КФТИ И. Б. Хайбуллину в составе коллектива учёных ГИПО присуждена Государственная премия РТ 1998 года в области науки и техники за работу “Разработка научных основ технологии изготовления голограммных дифракционных решёток и внедрение её в серийное производство дифракционной оптики ГИПО”.

9 декабря – утверждено “Положение о создании учебно-научного центра”.

23 декабря – создана совместно с Казанским государственным университетом межведомственная лаборатория радиационной физики и гамма-оптики (соруководители: член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин, проф. Э. К. Садыков, проф. В. В. Самарцев).

24 декабря – институт посетил Президент Российской академии наук Ю. С. Осипов и познакомился с деятельностью института и его лабораторий.

25 декабря – КФТИ совместно с Казанским государственным университетом образовали межведомственную лабораторию по когерентной оптике для совместной подготовки студентов, магистров, аспирантов физического факультета КГУ по специальности “оптика” и обеспечения научно-технического сотрудничества между КГУ и КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН (заведующий: д.ф.-м.н. В. В. Самарцев).

31 декабря – в связи с завершением работ по теме “Томограф-РТ” ВТК распущен.

Издана монография С. Н. Андрианова, В. В. Самарцева “Оптическое сверхизлучение и лазерное охлаждение в твёрдых телах”.

Вышло в свет научно-историческое издание – К. М. Салихов (ред.): “Е. К. Завойский (1907–1976). Материалы к биографии”.

1999

13 января – утверждено “Положение об итоговом конкурсе работ КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН”.

22 января – лауреатами Диплома КФТИ стали Н. Р. Садыков и М. А. Файзуллин.

3 февраля – открыта новая специализация в аспирантуре института: 05.03.18 “Математическое моделирование”.

7 мая – КФТИ совместно с Казанским государственным университетом образовали межведомственную лабораторию радиационной физики и ядерно-физических методов исследования (заведующий: член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин).

18 мая – состоялось общее собрание научных сотрудников института, на котором К. М. Салихов избран директором института на новый срок.

18–20 мая – III школа молодых учёных “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” (КФТИ – соорганизатор).

21 мая – в связи с 275-летием Российской академии наук лауреатами Диплома КФТИ стали: А. И. Андреева, В. А. Зуйков, Г. И. Иванова, В. Е. Катаев, Н. Г. Куркина, С. А. Мигачёв, Х. Л. Мухтасарова, В. Ю. Петухов, Т. А. Хлебникова, С. К. Черников.

7 июня – в связи с 275-летием Российской академии наук Президиум РАН и Совет профсоюзов работников РАН наградили Почётными грамотами РАН: С. М. Ахмина, Р. З. Бариева, Р. М. Баязитова, А. А. Бухараева, Н. В. Гайнутдинова, Х. Л. Гайнутдинова, Ю. Г. Галяметдинова, Ф. Ф. Губайдулина, В. А. Жихарева, М. М. Зарипова, О. В. Концевую, В. Н. Лисина, Л. В. Мосину, В. М. Мусина, Х. Л. Мухтасарову, В. А. Роль-Шилиеву, В. В. Самарцева, Н. К. Соловарова, Ю. И. Таланова, В. Ф. Тарасова, Е. А. Туриянского, М. А. Файзуллина, И. Б. Хайбуллина, С. Я. Хлебникова. 26 сотрудникам института были объявлены благодарности.

29 июня – член-корр. РАН К. М. Салихов утверждён директором института на новый срок.

6 сентября – в связи с реализацией Федерально-целевой программы “Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 1997–2000 гг.” КФТИ совместно с Казанским государственным университетом организовали межведомственную учебную лабораторию физики металловедения (заведующий: д.ф.-м.н. Г. Б. Тейтельбаум).

22–24 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор). Международная премия им. Е. К. Завойского присуждена Джоану ван дер Ваальсу (Нидерланды) за вклад в ЭПР исследования фотовозбуждённых триплетных молекул.

26–29 октября – Третья молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (КФТИ – соорганизатор).

27–29 октября – VIII Международные чтения по квантовой акустике (КФТИ – организатор).

Д.ф.-м.н., проф. И. В. Овчинникову присуждено почётное звание “Заслуженный деятель науки РФ”.

Д.ф.-м.н., проф. А. Р. Кессель награждён медалью им. Петра I Международной академии наук о природе и обществе.

2000

1 января – утверждена следующая структура научных подразделений института:

- лаборатория молекулярной радиоспектроскопии;
- лаборатория радиационной физики;
- лаборатория резонансных явлений;
- лаборатория физики перспективных материалов;
- лаборатория нелинейной оптики;
- лаборатория моделирования физико-механических процессов.

• Отдел химической физики:

- лаборатория молекулярной фотохимии;
- лаборатория физики и химии поверхности.

• Отдел медицинской физики:

- лаборатория биофизики;
- лаборатория методов медицинской физики.

• Группа роста кристаллов.

Назначены руководители ряда отделов и лабораторий:

- К. М. Салихов – зав. отделом химической физики на общественных началах;
- Я. В. Фаттахов – зав. отделом медицинской физики;
- А. А. Бухараев – зав. лабораторией физики и химии поверхности.

18–19 января – Х. Л. Гайнутдинов освобождён от должности учёного секретаря в связи с избранием его по конкурсу на должность зав. лабораторией биофизики.

19 января – В. К. Воронкова переведена на должность учёного секретаря.

1 марта – учреждены ежегодные стипендии КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН для талантливых молодых учёных: стипендия им. Н. С. Гарифьянова для аспирантов и стипендия им. Б. М. Козырева для молодых учёных в возрасте до 30 лет.

11 апреля – постановлением Президиума РАН государственные научные стипендии на 2000–2003 гг. для учёных России присуждены в области физики и астрономии сотрудникам института: д.ф.-м.н., проф., г.н.с. Г. П. Вишневской; д.ф.-м.н., проф., г.н.с. И. А. Гарифуллин; д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией А. Р. Кесселю; д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией В. В. Самарцеву; д.ф.-м.н., проф., г.н.с. Е. И. Штыркову; в области химии: д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией И. В. Овчинникову.

Государственная научная стипендия на 2000–2001 гг. для молодых учёных России в области материалов и химической технологии присуждена аспиранту I года обучения Н. И. Нургазизову.

26 апреля – учреждена премия им. М. Л. Блатта для работников вспомогательных подразделений, заслуживших добросовестным многолетним трудом признательность и уважение научных сотрудников института.

3 мая – на конкурсной основе стипендия им. Б. М. Козырева присуждена А. А. Валидову; а стипендия им. Н. С. Гарифьянова – Н. И. Нургазизову.

27–29 сентября – Международный симпозиум “Современное развитие магнитного резонанса” (КФТИ – организатор). Международная премия им. Е. К. Завойского присуждена:

- Хардену М. МакКоннеллу (США) за вклад в понимание сверхтонких расщеплений в органических и биологических системах;
- фирме “Брукер Аналитик ГмбХ” (директор: Дитер Шмальбайн, Германия) за выдающиеся достижения в разработке приборов, ведущих к новым приложениям ЭПР.

24 октября – Почётными грамотами РАН и Профсоюзом за работников РАН награждены вед. инженер А. И. Андреева, гл. бухгалтер Р. Б. Маликова, в.н.с. В. Ю. Петухов.

26–28 октября – Четвёртая молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (КФТИ – соорганизатор).

Октябрь – конференция по физике низких температур (КФТИ – соорганизатор).

1–3 ноября – IV школа молодых учёных “Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений” (КФТИ – соорганизатор).

21 ноября – премия им. М. Л. Блатта 2000 года присуждена вед. библиотекарю Р. М. Мингазовой.

24 ноября – создан сайт Казанского физико-технического института им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН в Интернете. Утверждён редакционный совет для сайта (председатель: к.т.н. С. К. Черников).

7 декабря – Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского получил лицензию на издательскую деятельность.

Член-корр. РАН, директор института К. М. Салихов избран вице-президентом Международного общества ЭПР.

Приобретён универсальный двухканальный спектральный эллипсометр ЭС-2.

Издана монография К. М. Салихова “10 лекций по спиновой химии”.

*Материал подготовила Н. А. Карташова
ведущий инженер отдела
научно-технической информации*

НАУЧНО-ОРГАНИЗАЦИОННАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ

Новые экспериментальные возможности в области сканирующей зондовой микроскопии

Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН (вместе с Институтом органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН) принимает участие в исследованиях, проводимых при поддержке Федерального центра коллективного пользования (ФЦКП) “Физико-химические исследования веществ и материалов”, созданного на базе Казанского государственного университета. Одно из направлений исследований ФЦКП – это сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ). В 2006 году в рамках ФЦКП Министерством образования и науки РФ были выделены КФТИ средства на приобретение сверхвысоковакуумной установки Multiprobe Р немецкой фирмы Omicron (см. фото 1). Она состоит из нескольких вакуумных камер с большим количеством фланцев, на которых можно размесить устройства для изучения поверхности различными методами, включая СЗМ, Оже и фотоэлектронную спектроскопию, дифракцию медленных электронов. Важное преимущество Multiprobe Р – наличие камеры подготовки образцов, которая через шлюз соединена с основной измеритель-

ной камерой (аналитическим блоком). Это позволяет готовить образцы в вакууме и перемещать их в измерительный блок без соприкосновения с воздухом. Камера подготовки образцов оснащена сверхвысоковакуумными испарителями для напыления на подложку различных материалов. Испаряемое вещество нагревается электронным пучком (мощностью до 300 Вт) до температуры 160–3300°C. Возможно напыление как из тиглей, так и методом сублимации, в этом случае электронный пучок нагревает непосредственно испаряемое вещество. На фланце камеры подготовки образцов установлена также ионная пушка, которая позволяет проводить распыление поверхности ионами Ar^+ с энергией от 300 до 5000 эВ. С помощью последовательно подключённых форвакуумного, турбомолекулярного, ионизационного и сублимационных насосов в камере подготовки образцов можно поддерживать вакуум не хуже $2 \cdot 10^{-10}$ торр, а в аналитической камере не ниже $2 \cdot 10^{-11}$ торр. К сожалению, на те средства, которые нам были выделены, удалось оснастить аналитическую камеру только методами СЗМ. Остальные системы для исследования поверхности (Оже, РФЭС и др.) можно, в принципе, докупить и установить позже (при дополнительном финансировании).

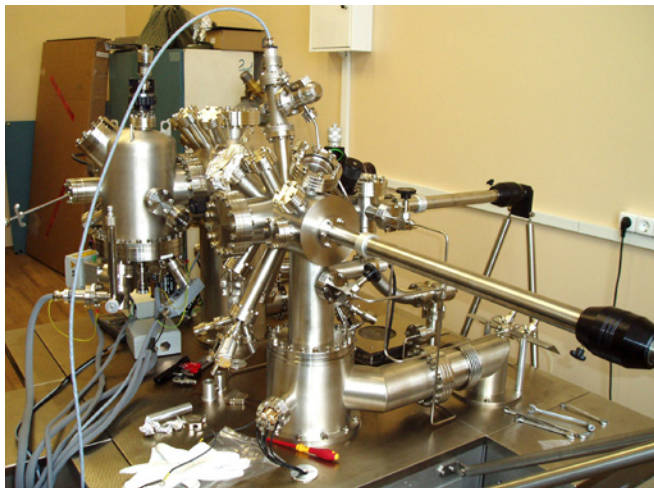


Фото 1. Сверхвысоковакуумная установка Multiprobe Р.

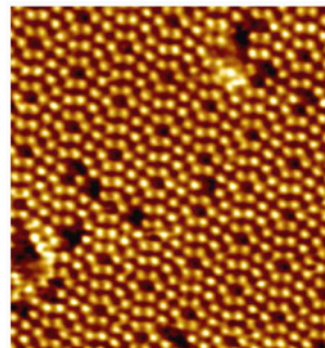


Фото 2. Изображение отдельных атомов на поверхности кремния, полученное методом сканирующей туннельной микроскопии.

В декабре 2006 года установка Multiprobe Р была успешно запущена в эксплуатацию. Это потребовало довольно больших усилий, связанных, в первую очередь, с перемещением и установкой прибора в предназначенной для него комнате на 2-ом этаже. По своим размерам он не проходил не только в двери, но и в окна, поэтому пришлось Multiprobe Р частично демонтировать, а затем собирать вновь. В транспортировке и установке принимали участие не только сотрудники нашей лаборатории, но и наши молодые коллеги из других лабораторий, за что им большое спасибо. Особая благодарность В. С. Романову, опыт которого очень пригодился при выполнении тяжелых работ при разгрузке и транспортировке данной установки, вес которой превышал 1 тонну.

Сейчас сканирующий зондовый микроскоп, который установлен в Multiprobe Р, позволяет получать изображения поверхности с атомарным разрешением в режимах сканирующей туннельной микроскопии, контактной и бесконтактной атомно-силовой микроскопии. Можно изучать распределение электронной плотности вблизи

уровня Ферми методом сканирующей туннельной микроскопии. Важным достоинством Multiprobe Р является возможность проводить измерения образцов в широком интервале температур (от 35 до 600 К) за счёт использования гелиевой продувки. В качестве примера на фото 2 приведено полученное на нашем приборе в режиме туннельной микроскопии изображение отдельных атомов на поверхности кремния. Это знаменитое изображение Si(111)-(7×7), за возможность получения которого была присуждена Нобелевская премия Г. Биннигу (G. Binnig) и Х. Роперу (H. Rohrer).

Появление в КФТИ такого уникального прибора (в России их всего несколько) открывает новые экспериментальные возможности для исследований в области нанотехнологий, физики и химии поверхности.

А. А. Бухараев

*зав. лабораторией физики и химии поверхности
КФТИ, руководитель отдела сканирующей зондовой
микроскопии ФЦКП*

Отдел криогенной техники в 2006 году

Прошедший 2006 год для отдела был весьма напряжённым. В институте продолжались плановые научные исследования при низких температурах. Основные ЭПР измерения на спектрометрах фирмы Брукер и Вариан велись при гелиевых температурах. Регулярно потреблял жидкий гелий субмиллиметровый спектрометр ЭПР с экономичным мини-криостатом (10-литровый сосуд гелия обеспечивает до 9 заливок). Периодически проводились магнитные измерения при температурах до 0.3 К, используя гелий-3. Бесперебойно в течение года работал ЯМР спектрометр Avance 400 с криомагнитом, который, кроме жидкого гелия, ежедневно потребляет 50 литров жидкого азота. Поддерживать такие системы особенно сложно в летнее время, когда производители азота останавливаются на годовую профилактику. Регулярно только с гелием работала оптическая установка А. М. Шегеды. Немало измерений в году велись на созданном Н. Н. Гарифьяновым сквид-магнетометре, который за цикл измерений потребляет до 20 литров гелия.

Первенство по потреблению жидкого азота среди экспериментальных установок по-прежнему твёрдо удерживает ионный ускоритель ИЛУ-3. В 2006 году отдел криогенной техники поддерживал квоту снабжения азотом установки ИЛУ-3 на уровне 1 тонны в месяц и не имел замечаний со стороны потребителя.

В конце 2006 года значительной вехой в институте стал запуск сканирующего зондового микроскопа в

лаборатории физики и химии поверхности. В сверхвысоковакуумной камере установки расположена ячейка, охлаждаемая жидким гелием. Для запуска установки своевременно было ожижено 40 литров гелия.

За истекший год в отделе было проведено 15 пусков гелиевой установки и ожижено 3000 литров гелия для нужд института.

Кроме обеспечения научных исследований криогенными жидкостями в КФТИ, в 2006 году отдел успешно выполнил два госконтракта с общим объёмом 463 тысячи рублей – бесперебойно работали криогенный ЯМР томограф фирмы Тошиба в Детской республиканской клинической больнице МЗ РТ и два ЯМР спектрометра в ИОФХ им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН.

В 2006 году в отделе произошли коренные изменения по укреплению материальной базы. Во дворе института было построено сразу три объекта:

- ангар для приёма, хранения и выдачи жидкого азота из азотных танков;
- склад с бетонным полом для хранения и сортировки гелиевых баллонов;
- ангар для хранения транспортных азотных танков, загружаемых тельфером на автотранспорт.

Следует подчеркнуть, что эта давняя мечта автора осуществилась благодаря чуткому пониманию наших производственных проблем новым хозяйственным и финансовым руководством КФТИ. Запуск этих объ-

ектов значительно улучшил условия труда, повысил производительность труда и обеспечил сохранность оборудования.

Однако производственных проблем ещё много. Прежде всего беспокоит состояние стареющего оборудования. Основной гелиевой установке КГУ-600 уже около 25 лет. Следует отметить, что в настоящее время в России нет заводов, выпускающих гелиевые ожижители. Стоимость

зарубежных аналогов составляет около 1 млн. евро. Хочется верить, что институт приложит все усилия по изысканию ресурсов и обеспечит перспективу развития научных исследований в физтехе, в ближайшие десятилетия, в области физики низких температур.

*С. Я. Хлебников
заведующий отделом криогенной техники*

Международный симпозиум “Modern Problems of Chemical Physics”

С 31 октября по 4 ноября 2006 года в Казани состоялся Международный симпозиум “Modern Problems of Chemical Physics” (“Актуальные проблемы химической физики”), приуроченный к 70-летию Кева Минуллиновича Салихова. Симпозиум был организован Казанским физико-техническим институтом им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН совместно с Академией наук РТ.

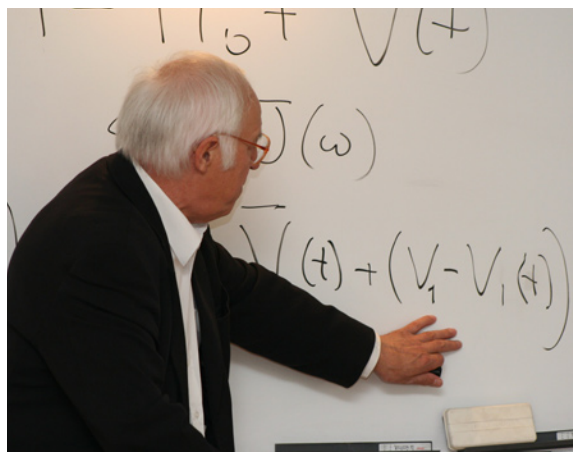
В состав оргкомитета вошли: проф. В. Ф. Тарасов, председатель; член-корр. РАН И. Б. Хайбуллин, заместитель председателя; проф. А. А. Бухараев, заместитель председателя; В. К. Воронкова, учёный секретарь; члены оргкомитета – С. М. Ахмин, Р. М. Ерёмкина, С. А. Зиганшина, Л. В. Мосина, И. В. Овчинников, М. Л. Фалин, Е. Н. Фролова. Локальный оргкомитет также возглавил В. Ф. Тарасов. Все члены локального оргкомитета: С. А. Абдрахманова, Ю. А. Аджалиев, С. М. Ахмин, О. И. Богомолова, В. К. Воронкова, Л. В. Воронова, В. М. Голенева, А. З. Губайдуллина, Р. Р. Гусева, Е. Р. Житейцев, А. А. Коновалов, О. О. Куприянова, Н. Г. Куркина, С. Г. Львов, Л. В. Мосина, М. Л. Фалин, М. П. Цейтлин внесли большой вклад в организацию работы симпозиума, который прошёл во всех отношениях на высоком уровне.

В симпозиуме приняли участие многие крупные зарубежные и российские учёные, известные своими работами в области химической физики: проф. Х. В. Шписс, один из директоров Макс-Планк Института исследования полимеров, Майнц (Германия); проф. К. Мёбиус, Свободный университет Берлина (Германия); проф. В. Любитц, директор Макс-Планк Института бионеорганической химии,

Мюльхайм ан дер Рур (Германия); проф. Д. Штелик, Свободный университет Берлина (Германия); проф. Г. Бунтковский, Институт физической химии, Йена (Германия); проф. Х. М. Фит, Свободный университет Берлина (Германия); проф. М. Боуман, Тихоокеанская северо-западная национальная лаборатория, Ричланд (США); проф. А. ван дер Ест, Университет Брока, Сант-Катаринес (Канада); С. Шильгериус, редактор издательства Шпрингер, Вена (Австрия); д-р У. Айххофф, фирма Брукер БиоСпин, Райнштеттен (Германия); акад. К. А. Валиев, советник РАН, Москва; акад. Р. З. Сагдеев, директор Международного томографического центра СО РАН, Новосибирск; акад. С. Н. Багаев, член президиума РАН, Москва; проф. С. А. Дзюба, директор Института химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск; проф. В. А. Ацаркин, Институт радиотехники и электроники РАН, Москва; проф. Е. Г. Багрянская, Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск; проф. Г. М. Жидомиров, Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск. Интересно отметить, что симпозиум собрал вместе пять



Доклад делает профессор Х. В. Шписс.



Слева направо: профессора К. М. Салихов, К. Мёбиус и Х. М. Фит.

лауреатов Международной премии им. Е. К. Завойского: К. Мёбиуса, К. А. Валиева, В. Любитца, К. М. Салихова и Д. Штелика.

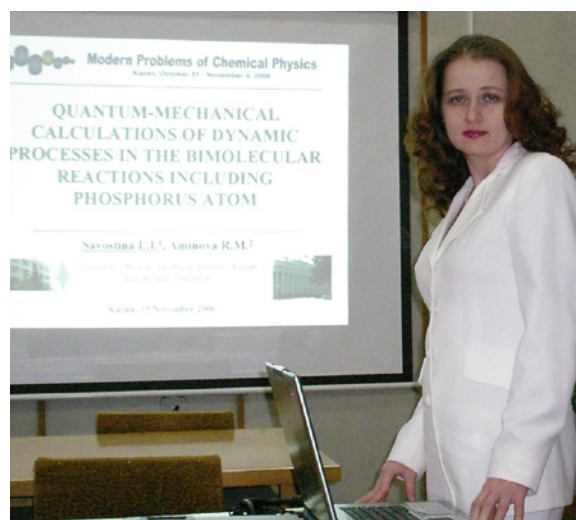
На симпозиуме были представлены доклады по ряду актуальных проблем химической физики:

- спиновая химия, включая химическую поляризацию ядерных спинов, химическую поляризацию электронных спинов, спиновый катализ, новые методы регистрации короткоживущих парамагнитных частиц, основанные на магнитно-спиновых эффектах;
- первичные стадии разделения зарядов в фотосинтетических системах;
- супрамолекулярные системы, наноразмерные частицы;
- спинтроника;
- молекулярные магнетики;
- элементная база квантовой информатики;
- квантовая память;
- исследование новых материалов квантовой электроники;
- новые методы магнитного резонанса;

- атомно-силовая микроскопия;
- магнитно-резонансная томография.

Все доклады, представленные на симпозиуме, содержали новые весьма интересные результаты. По-существу, эти доклады были своеобразными репортажами с передового фронта мировой науки. Особо можно выделить следующие доклады.

Х. В. Шписс продемонстрировал новые возможности ЯМР спектроскопии при изучении структуры супрамолекулярных систем. Во многих случаях, когда не удаётся получить монокристаллы супрамолекулярных систем и нельзя применить рентгеноструктурный анализ, ЯМР спектроскопия является единственным путём для установления структуры супрамолекулярных систем. Как известно, с этой целью широко применяется динамическая поляризация ядерных спинов по эффекту Оверхаузера. Х. В. Шписс в своём докладе показал, что для расшифровки структуры супрамолекулярных систем весьма информативным является изучение проявлений в спектрах ЯМР двухквантовой когерентности в состоянии ядерных спинов.



С докладами выступают сотрудники физтеха: Л. И. Савостина, С. А. Моисеев, М. П. Цейтлин.



Профессора Д. Штелик, В. Любитц и Г. Бунтковский в перерыве между заседаниями.



Выступление
профессора
В. А. Азаркина.

Принципиально важные результаты были приведены в докладе Х. М. Фита. В его лаборатории создана установка, которая позволяет регистрировать эффект химической поляризации ядерных спинов с рекордным временным разрешением. Благодаря этому, проф. Фиту удалось наблюдать в реальном времени перераспределение поляризации спинов в системах взаимодействующих ядерных спинов.

Большой интерес вызвал доклад Д. В. Стася с коллегами (Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск). Ими разработан метод MARY спектроскопии для регистрации короткоживущих ион-радикалов, основанный на том, что эффективность синглет-триплетных переходов в спин-коррелированных радикальных парах имеет особенности в точках пересечения спиновых уровней этих пар, что, в свою очередь, проявляется в вероятностях рекомбинации радикальных пар, влияет на константы скорости химических реакций, на выход различных продуктов реакции.

Большие возможности высокочастотного ЭПР применительно к изучению механизма разделения зарядов в реакционном центре фотосинтеза были продемонстрированы в докладе К. Мёбиуса (Свободный университет Берлина, Германия).

В докладе К. М. Салихова (КФТИ КазНЦ РАН) с соавторами была обсуждена возможность использования спин-зависимых фотоиндуцированных элементарных актов в квантовой телепортации и сформулированы основные требования к системам, на которых можно реализовать квантовую телепортацию. Теоретически исследована спиновая динамика в ходе квантовой телепортации в рамках предложенного авторами протокола квантовой телепортации. Показана перспективность использования разделённых зарядов в реакционном центре фотосинтетических систем в качестве квантового канала связи в процессе квантовой телепортации и методики электронного спинового эха для регистрации результата квантовой телепортации.

В докладе Б. З. Малкина (КГУ) были представлены результаты совместной работы теоретиков Казанского

университета и экспериментаторов Университета Павии (Италия). Получено самосогласованное описание особенностей экспериментально измеренных температурной и полевой зависимостей времени спин-решёточной релаксации ядер фтора на основе детального анализа динамики локальных магнитных полей, создаваемых флуктуирующими магнитными моментами примесных ионов гольмия. В частности, показано, что аномальное увеличение скорости ядерной релаксации в точках антипересечений сверхтонких подуровней основного дублета ионов гольмия может быть обусловлено как туннелированием электронной намагниченности, так и низкосимметричной компонентой случайного кристаллического поля. Эти механизмы ядерной релаксации могут доминировать и в случае ядер, входящих в состав интенсивно изучаемых в последние годы мономолекулярных магнетиков.

Научный уровень симпозиума соответствовал уровню современной мировой науки. В работе симпозиума приняли участие признанные в мире учёные из США, Канады и Германии. С удовлетворением можно отметить, что российские учёные из Новосибирска, Москвы и Казани выступили достойно, представили много хороших докладов. С уверенностью можно сказать, что наблюдается повышение активности работы российских учёных, уровня экспериментальных работ, выполняемых в отечественных лабораториях. Одной из причин такой положительной тенденции является то, что в последние годы стала заметно улучшаться приборная база научных исследований.

Сотрудники нашего института также представили доклады на высоком уровне, постарались все: и молодые и те, чьи работы уже получили международное признание.

Бурные научные дискуссии продолжались и после докладов, в неофициальной обстановке – во время перерывов на чай-кофе и на Welcome Party. Следует отметить очень хорошую организацию этих мероприятий.

*В. Ф. Тарасов,
председатель оргкомитета симпозиума;
В. К. Воронкова,
учёный секретарь симпозиума*

Участие физтеховцев в Международном симпозиуме в Новосибирске

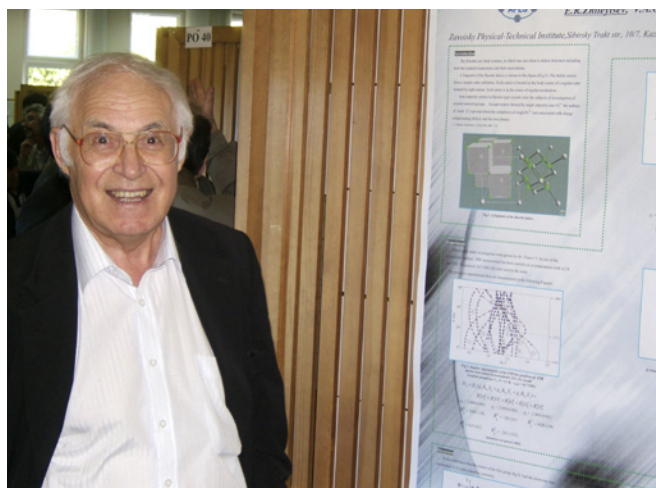
С 24 по 27 августа 2006 года в Академгородке близ Новосибирска проходил V Международный симпозиум по ЭПР стран Азии и Тихого океана (APES-2006). Наш институт, один из ведущих институтов России в области исследований методом ЭПР, принял активное участие в этом мероприятии: делегация из 15 сотрудников представила на симпозиум 2 приглашённые лекции (К. М. Салихов, В. Ф. Тарасов), 3 устных (В. К. Воронкова, Н. Е. Домрачева, Г. С. Шакуров) и 9 стендовых докладов. Заявленная тематика конференции была широкой и разнообразной: от спиновых эффектов и фотохимических систем до новых материалов и ионов в кристаллах. На конференции присутствовало свыше 100 человек, которые представляли более 10 стран мира.

Я, непосредственный участник конференции, начну, пожалуй, с дороги. Состав участников от нашего института был, в большинстве своём, довольно молодой, а возникшие трудности с приобретением билетов разрешились просто: все мы поехали одним поездом и в одном вагоне. Это сразу сделало поездку лёгкой и весёлой. Ехать до Новосибирска почти двое суток. От Новосибирска до Академгородка на маршрутном такси быстро добрались до места. По дороге нас позабавили названия местных остановок. Как выяснилось, названия остановок соответствовали названиям институтов: “Полупроводники”, “Автоматика”, “Ядерка”, “Катализ” и т.п. Разместили нас в хорошей и удобной гостинице “Золотая долина”. После регистрации нам предложили посетить местный ботанический сад. Дорога до ботанического сада заняла минут 30. Пестрая толпа из японцев, индусов, немцев, русских довольно живописно смотрелась в лесном массиве, поскольку в Академгородке не ясно: то ли лес внутри городка, то ли городок внутри леса. На

территории ботанического сада мы побывали в дендрарии и парке бонсай.

На следующий день началась конференция. Открытие конференции проходило в конференц-зале Дома учёных. Хочется поблагодарить организаторов конференции за подготовку, проведение и организацию конференции. С приветственной речью выступил вице-президент Азиатско-Тихоокеанского общества ЭПР (ЭСР) (APES), директор Института химической кинетики и горения СО РАН, проф. С. А. Дзюба, он объявил об открытии конференции. Затем выступили основатель APES, проф. Ч. Рудович (Польша) и его президент, проф. Х. Охта (Япония). По окончании конференции был избран новый президент, проф. Г. Хансон (Австралия). После официального открытия были прослушаны приглашённые лекции. Хочется отметить японских участников. Их доклады отличались, на мой взгляд, разнообразием интересов и задач, которые в настоящее время решают японские учёные. Здесь и твёрдое тело, и квантовые компьютеры, и спиновая химия, большой интерес вызвал доклад о химических реакциях, происходящих в слабых магнитных полях, которые позволяют птицам ориентироваться в магнитном поле Земли и совершать длительные миграционные перелёты. Много научных сообщений было сделано учёными из Индии и Китая.

Традиционно для подобных конференций в России, в первый и предпоследний дни, организаторы симпозиума устроили неформальные вечеринки. Участники конференции смогли встретиться в непринуждённой обстановке и познакомиться друг с другом, обсудить интересующие их вопросы. Как уже отмечалось ранее, на конференции было много молодых учёных из разных городов России, Казахстана и т.д. После открытия конференции



К. М. Салихов у стенда сотрудников института.



Ю. Е. Кандрашкин отвечает на вопрос японского коллеги.

Участники и болельщики футбольного матча.
Слева направо: Е. Р. Житейцев, Р. Г. Галеев,
В. Ф. Тарасов, В. К. Воронкова.



заседания проходили на параллельных сессиях в двух институтах, расположенных неподалеку, в Международном томографическом центре и Институте химической кинетики и горения. Это позволило участникам на примере двух институтов лучше узнать, как развивается наука в Сибири. Не обошли вниманием эту конференцию и традиционные партнёры подобных мероприятий – фирмы Брукер и Джеол. После окончания научных сессий представители фирм провели презентацию своего новейшего оборудования. В заключительные два дня была проведена стендовая сессия, на которой также были определены лучшие стендовые доклады. Разнообразие тематики докладов вызвало большой интерес участников.

Перед отъездом наш спортивный заводила Евгений Житейцев вызвал на товарищеский матч по футболу команду молодых хозяев. Встречу решили провести на

песчаном пляже “Обского моря”. Хозяев поддержали коллеги из Казахстана и матч закончился дружественной ничьей. Уезжали мы поздно ночью с прекрасным настроением от проведённой конференции, замечательных знакомств с нашими молодыми коллегами из Академгородка и других городов и стран, и с надеждой на скорую встречу.

А. А. Коновалов

Журнал “Applied Magnetic Resonance”

Международный журнал “Applied Magnetic Resonance” – один из первых научных журналов в нашей стране, печатающийся на английском языке и посвящённый приложениям магнитного резонанса в физике, химии, биологии, медицине, геохимии, экологии и т.д.

Журнал создан по инициативе члена-корр. РАН К. М. Салихова при поддержке РАН. Издаётся с 1990 года.

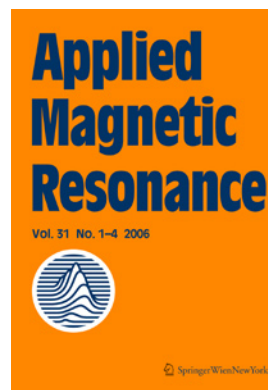
Редакция журнала расположена в КФТИ КазНЦ РАН. Издателем журнала является издательство Шпрингер (Вена Нью Йорк), расположенное в Вене, Австрия.

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; 2003 – 0.874; 2004 – 0.665; 2005 – 0.743.

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 приглашённые обзорные статьи по методам и приложениям ЯМР, ЯКР, ЭПР, мёсбауэровской спектроскопии и т.д. Публикуются специальные выпуски под редакцией известных учёных, посвящённые актуальным проблемам магнитного резонанса. Есть раздел информации о конференциях по магнитному резонансу и новому оборудованию, а также рецензий на новые книги.



На заседании редакционной коллегии журнала
1 ноября 2006 года.

Слева направо: М. С. Тагиров, В. А. Ацаркин,
К. Мёбиус, В. Любитц, С. А. Дзюба,
Л. К. Аминов, А. В. Ильясов, Л. В. Мосина.

Слева направо: Л. В. Мосина, С. Шильгериус,
С. М. Ахмин.



“Applied Magnetic Resonance” опубликовал специальные выпуски оригинальных статей, подготовленных в рамках Амперовских конгрессов, а также ряда специализированных Амперовских симпозиумов и международных конференций.

В 2006 году редакцией осуществлен выпуск 30 и 31 томов журнала, четыре выпуска каждый. Среди них – специальный выпуск, посвященный 70-летию юбилеям проф. К. Мёбиуса и члена-корр. РАН К. М. Салихова и подготовленный акад. Ю. Н. Молиным (Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск) и проф. Р. Биттлом (Свободный университет Берлина, Германия). И К. Мёбиус, и К. М. Салихов внесли значительный вклад в развитие и приложения спектроскопии магнитного резонанса. В этом выпуске журнала собраны статьи их друзей и коллег, представляющие современное положение магнитного резонанса и отражающие широкое разнообразие научных интересов К. Мёбиуса и К. М. Салихова.

Проф. К. Мёбиус (Свободный университет Берлина, Германия) и проф. Мартина Хубер (Гюйгенская лаборатория Лейденского университета, Нидерланды) подготовили специальный выпуск, посвященный 80-летию проф. Дж. Фейера и 50-летию юбилею открытого им метода двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР). Этот метод революционизировал ЭПР спектроскопию сложных систем. К. Мёбиус и Мартина Хубер собрали статьи коллег и учеников Дж. Фейера, связанные с исследованиями Дж. Фейера в разные периоды его жизни. Естественно,

С. Шильгериус
(редактор издательства Шпрингер)



что большую часть этого специального выпуска составляют работы в области развития приборов магнитного резонанса и приложений по изучению фотосинтетических протеинов. Однако, другие важные белковые и модельные системы, а также мембраны были достойно представлены в этом выпуске.

Значительным событием в жизни “Applied Magnetic Resonance” стало расширенное заседание редакции, состоявшееся 1 ноября 2006 года в рамках Международного симпозиума “Актуальные проблемы химической физики”. На заседании присутствовали К. М. Салихов (главный редактор), У. Айххофф, Л. К. Аминов, В. А. Ацаркин, Е. Г. Багрянская, М. К. Боуман, И. А. Гарифуллин, С. А. Дзюба, А. В. Ильясов, В. Любитц, К. Мёбиус, И. В. Овчинников, М. С. Тагиров, Х. В. Шписс, Д. Штелик, Л. В. Мосина (зам. гл. ред. по научно-редакционным вопросам), С. М. Ахмин (зам. гл. ред. по издательским вопросам) и С. Шильгериус (редактор издательства Шпрингер). Было обсуждено положение дел в настоящем. Работа редакции в Казани получила отличную оценку. Были намечены планы на будущее, включающие решение издательства Шпрингер сделать электронную версию нашего журнала доступной в интернете.

Л. В. Мосина
заместитель главного редактора

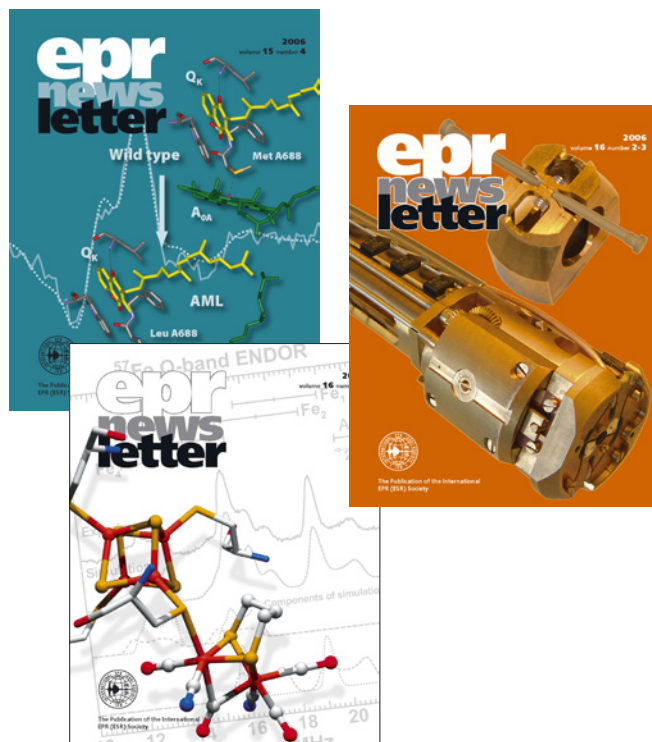
“EPR newsletter”: все новости жизни ЭПР сообщества для Вас!

В прошлом году истёк трёхлетний срок моего пребывания на посту главного редактора “EPR newsletter” [1–3], официального органа Международного общества ЭПР (ЭСР) (www.iesps.org) (МОЭ), объединяющего более тысячи учёных, применяющих метод ЭПР в своих исследованиях. Однако Вольфганг Любитц, новый президент МОЭ, высоко оценив нашу работу по выпуску “EPR newsletter”, предложил мне продолжить эту деятельность. Вместе со мной продолжили свою работу Томас Приснер (Институт физической химии, Франкфурт-на-Майне, Германия), помощник главного редактора по Европе, и Сергей Михайлович Ахмин, технический редактор. Грэма Тимминса (Университет Нью-Мексико, Альбукерк, США), помощника главного редактора по Северной и Южной Америке, сменила Кандис Круг (Медицинский колледж Висконсина, Милуоки, США), а Такеджи Такуи, помощника главного редактора по Азиатско-тихоокеанскому региону, сменил Хитоши Охта (Университет Кобе, Кобе, Япония). Как и прежде, pdf-версия “EPR newsletter” размещается на вебсайте www.epr-newsletter.ethz.ch (с любезного согласия руководства Федеральной технической высшей школы, Цюрих, Швейцария), а печатные копии изготавливает типография “Печатное дело ЛаПлум и сыновья” (Биллерика, Массачусетс, США). Филиал фирмы Брукер БиоСпин в Биллерике (Массачусетс, США) занимается распространением печатных копий вестника.

На страницах “EPR newsletter” читатель находит актуальную информацию о жизни МОЭ, различных премиях и юбилеях, новых книгах и журналах, компьютерных программах и методах, экспериментальных ноу-хау, объявления и отчёты о локальных и международных конференциях, объявления о вакансиях и желающих найти работу, информацию о продаже и обмене оборудования, рекламу спонсоров. Это делает “EPR newsletter” необходимой составной частью жизни любого исследователя, применяющего метод ЭПР в своей работе. Мы по-прежнему огромное внимание уделяем роли личности исследователя в науке, многогранности таланта и его проявлений.

Алекс Мюллер (Цюрих, Швейцария), нобелевский лауреат, разделил с нами своё увлечение символизмом числа пять и пятикратной симметрией [4]. Джон Пилброу (Мельбурн, Австралия), почётный член МОЭ и его бывший президент, представил статью о своих поисках связи между научным знанием и христианской верой [5]. Эрвин Хан (Беркли, США), почётный член МОЭ, в прекрасном эссе “Краткая история физики музыки”, наполовину историческом и наполовину физическом, ответил на вопрос, разрушает ли объективное знание лиризм и красоту искусства [6].

Подборка воспоминаний о том, как проходили первые биофизические исследования мембран с нитроксидными спиновыми метками в лаборатории Хардена МакКоннел-



ла (Станфорд, США) [7], дали читателю возможность проникнуться атмосферой научного поиска и понять, как делаются великие открытия.

В 2006 году мировое сообщество ЭПР понесло тяжёлую и невозполнимую утрату – ушёл из жизни Артур Швайгер (Цюрих, Швейцария). Алекс Ангерхофер, Джефф Хармер, Гуннар Ешке, Алессандро Понти и Сабина Ван Доорслеер, его ученики и сотрудники, на страницах “EPR newsletter” рассказали о своём восприятии этого выдающегося учёного и о том, какое влияние он оказал на их путь в науке [8]. Всю боль от этого безвременного ухода Вольфганг Любитц, Алекс Мюллер, Дитер Шмальбайн, Джон Пилброу, Кев Салихов и Рихард Эрнст выразили в своих прощальных словах [9]. Как эхо разносторонней научной деятельности Артура Швайгера прозвучала его статья с соавторами о программе для контроля работы ЭПР спектрометров [10].

Двойной номер “EPR newsletter” 16/2-3, посвящённый 50-летию юбилею открытия метода двойного электронно-ядерного резонанса (ДЭЯР) – дань уважения Джорджу Фейеру (Ла Хойа, США) [11]. Нам удалось подобрать соответствующий материал практически для всех колонок “EPR newsletter”, даже обложка этого номера отражает исследования методом ДЭЯР, которые проводил Йос Дисселхорст, обладатель серебряной медали МОЭ по аппаратуре ЭПР. Прежде всего, Джордж Фейер дал интервью “EPR newsletter”. Приправленное его замечательным чувством юмора, оно демонстрирует

безграничную глубину личности этого великого человека. Мы благодарны Американскому физическому обществу, давшему разрешение перепечатать первую статью Дж. Фейера по ДЭЯР. Джон Пилброу подготовил подборку статей, показывающих разнообразие направлений, в которых идёт развитие этого метода: от физики твёрдого тела через химию к биологии. Они напоминают нам, что часто ДЭЯР является единственным методом, позволяющим получить информацию о сверхтонких взаимодействиях и структуре. Даниелла Гольдфарб, великолепный специалист в области ДЭЯР, представила вниманию читателей исчерпывающий обзор “Высокополевой импульсный ДЭЯР – за и против”.

Как мог заметить наш внимательный читатель, все четыре года патриархи магнитного резонанса охотно и активно сотрудничают с “EPR newsletter”. Поколение более молодых ЭПР исследователей не столь открыто для этого сотрудничества. Для того, чтобы обеспечить баланс, мы ввели новую колонку “Награда МОЭ для молодого исследователя: несколько лет спустя”. Эта колонка посвящена прошлым лауреатам этой награды и даёт им возможность раскрыть свой путь в науку, рассказать о своей жизни сегодня, поделиться проблемами, с которыми они сталкиваются и которые они решают, и т.д. В этом номере Марк Ньютон, лауреат 2001 года, рассказал о начале своих ДЭЯР исследований в Кларендонской лаборатории (Оксфорд, Великобритания). Специальная

колонка представляет нашим читателям молодых исследователей в области ЭПР, которые недавно стали членами профессорско-преподавательского состава в университетах и институтах различных стран мира.

Огромный интерес читателей к нашим публикациям и высокая оценка нашей работы как официальными лицами МОЭ, так и всем ЭПР сообществом, вдохновляют нашу команду.

Литература

1. Мосина Л.В.: Казанский физико-технический институт имени Е. К. Завойского 2003. Ежегодник (Салихов К.М., ред.), с. 196–198. Казань: ФизтехПресс 2004.
2. Мосина Л.В.: Казанский физико-технический институт имени Е. К. Завойского 2004. Ежегодник (Салихов К.М., ред.), с. 215–216. Казань: ФизтехПресс 2005.
3. Мосина Л.В.: Казанский физико-технический институт имени Е. К. Завойского 2005. Ежегодник (Салихов К.М., ред.), с. 200–201. Казань: ФизтехПресс 2006.
4. Müller K.A.: EPR newsletter **15**, no. 4, 6–8 (2006)
5. Pilbrow J.R.: EPR newsletter **16**, no. 1, 10–11 (2006)
6. Hahn E.L.: EPR newsletter **16**, no. 2-3, 10–12 (2006)
7. EPR newsletter **15**, no. 4, 10–13 (2006)
8. EPR newsletter **16**, no. 1, 14–16 (2006)
9. EPR newsletter **16**, no. 1, 17–20 (2006)
10. EPR newsletter **16**, no. 1, 21 (2006)
11. EPR newsletter **16**, no. 2-3 (2006)

*Л. В. Мосина
главный редактор*

Международная премия им. Е. К. Завойского 2006

Международная премия им. Е. К. Завойского учреждена в 1991 году. 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 Казанским физико-техническим институтом в издании международного журнала “Applied Magnetic Resonance”. Премия получила признание Амперовского общества, Международного общества ЭПР (ЭСР), Президиума и Президента РАН, Госсовета и правительства Республики Татарстан. Она получила высокую международную оценку как значительная премия за научные достижения.

Премия им. Е. К. Завойского присуждается за выдающийся вклад в применения или развитие 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(её) супруга(супруг)



Лауреат премии им. Е. К. Завойского 2006 года Ян Шмидт.

На церемонии вручения Международной премии им. Е. К. Завойского 2006.

Слева направо: З. Р. Валеева, К. М. Салихов, Я. Шмидт.



являются почётными гостями правительства Республики Татарстан.

Выборы лауреата и церемония вручения этой престижной премии в 2006 году проходили в классическом формате. Лауреат был выбран международным комитетом в следующем составе: К. М. Салихов (Казань, Россия), председатель, и члены: Дж. Фейер (Ла Хойа, США), Д. Гаттески (Флоренция, Италия), Х. М. МакКоннелл (Станфорд, США), К. А. МакЛохлан (Оксфорд, Великобритания) и К. Мёбиус (Берлин, Германия). В начале 2006 года комитет обратился примерно к 50 самым авторитетным специалистам в области ЭПР с письменной просьбой назвать кандидата. Одновременно объявление о приёме выдвижений было опубликовано в журнале “Applied Magnetic Resonance”, Амперовском Бюллетене и “EPR newsletter”, официальном органе Международного общества ЭПР (ЭСР). Были рассмотрены все кандидатуры, названные до 1 апреля 2006 года. В результате широкого обсуждения всех кандидатур решение комитета было единодушным – лауреатом премии 2006 был назван Ян Шмидт, профессор Гюйгенской лаборатории (Лейден, Нидерланды).

Профессор Шмидт был отмечен за выдающийся вклад в развитие высокополевых и высокочастотных импульсных методов ЭПР и ДЭЯР в приложениях к полупроводниковым наноматериалам. За шестнадцать лет существования этой премии, высокого звания лауреата были удостоены 19 выдающихся учёных из разных стран мира (в 1994 году, в ознаменование 50-летней годовщины открытия ЭПР, было названо три лауреата; а 2004 году, в ознаменование 60-летней годовщины открытия ЭПР, было названо два лауреата), среди них три представителя России – проф. Я. С. Лебедев и наши земляки, акад. К. А. Валиев и член-корр. РАН К. М. Салихов, 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 ежегодный Международный симпозиум “Современные достижения магнитного резонанса”. В 2006 году он проходил с 27 по 29 сентября. Церемония вручения премии проходила 29 сентября в здании Национального культурного центра “Казань” под председательством проф. К. М. Салихова. В ней участвовали докладчики конференции, а также учё-

ные и студенты университетов и научно-исследовательских институтов Казани. К. М. Салихов объявил решение комитета. З. Р. Валеева, заместитель Премьера-министра Республики Татарстан, вручила проф. Я. Шмидту диплом лауреата, медаль и денежный чек. Лауреата тепло поздравили проректор КГУ, проф. Н. К. Замов; заместитель председателя КазНЦ РАН, проф. О. Г. Синяшин и Президент АН РТ, проф. А. М. Мазгаров. Лауреату были переданы поздравления от имени Амперовского общества, Международного общества ЭПР (ЭСР) и Международного общества магнитного резонанса.

Ян Шмидт прочитал лекцию, в которой рассказал о сорока годах исследований по следам пионеров ЭПР спектроскопии. Торжественное собрание сопровождалось выступлением струнного квартета “Кантилена”. Церемония завершилась банкетом в честь лауреата.

Во время своего пребывания в Казани Ян Шмидт и его супруга посетили музей истории КГУ, где экспонируется экспериментальное оборудование Е. К. Завойского, а также достопримечательности Казани и Раифский монастырь.

*Л. В. Мосина
учёный секретарь комитета
по присуждению премии им. Е. К. Завойского*

Премия им. М. Л. Блатта 2006

Ежегодно присуждая премию им. М. Л. Блатта, научные сотрудники института выражают свою признательность и уважение тем работникам вспомогательных подразделений, которые многолетним и добросовестным трудом, неформальным подходом к своему делу снискали доброе отношение к себе.

Комитет по присуждению премии им. М. Л. Блатта работникам вспомогательных подразделений и Учёный совет Казанского физико-технического института КазНЦ РАН приняли решение: за многолетний добросовестный труд и чуткое, внимательное отношение к сотрудникам института присудить премию 2006 года ведущему экономисту планово-экономической группы Земфире Закировне Шамсутдиновой.

Земфира Закировна работает в КФТИ с 1992 года, начав свою трудовую деятельность в должности экономиста в бухгалтерии, а с 2004 года работает ведущим экономистом планово-экономической группы. Она хорошо знает свою работу и добросовестно относится к своим обязанностям. При этом Земфира Закировна – очень терпеливая, вежливая, тактичная, коммуникабельная и просто симпатичная женщина.

В. Н. Лисин
председатель комитета по присуждению
премии имени М. Л. Блатта



Земфира Закировна Шамсутдинова



2006 год в цифрах

Кадры (на 1 декабря 2006 г.)

Уволены

1. Архипов А.А., инженер I категории
2. Архипова С.С., вед. инженер
3. Балакирева Г.Х., уборщица
4. Гайнутдинов Л.Н., фрезеровщик
5. Гарнов Г.А., инженер-исследователь
6. Ибрагимова Р.Х., вед. бухгалтер
7. Исмаилова А.И., науч. сотрудник
8. Ихсанов Т.Р., инженер
9. Крайнов А.И., токарь
10. Любимов В.Ю., инженер-исследователь
11. Матухина Л.Е., мл. науч. сотрудник
12. Мухаметшина А.Г., мл. науч. сотрудник
13. Неграшов И.В., мл. науч. сотрудник
14. Носков М.И., науч. сотрудник
15. Нургазизов Н.И., науч. сотрудник
16. Нурутдинов Р.М., мл. науч. сотрудник
17. Осипов В.Н., вед. инженер-электроник
18. Солдатова Н.В., вед. бухгалтер
19. Спиридонова Л.В., лаборант-исследователь
20. Таланов Д.Ю., вед. инженер
21. Хуснутдинов Р.Р., мл. науч. сотрудник

Приняты

1. Галялтдинов М.К., вед. инженер
2. Зинкевич Т.А., стажер-исследователь
3. Золина В.В., бухгалтер
4. Хакимова Л.Н., бухгалтер II категории

Среднегодовая численность (человек)

- Общая численность – 237 человек (из них 26 совместителей)
- Научных сотрудников – 147 (из них 15 совместителей)
- Действительных членов АН РТ – 2 (из них 1 совместитель)
- Членов-корреспондентов АН РТ – 1

- Членов-корреспондентов РАН – 2 (из них 1 совместитель)
- Докторов наук – 28 (из них 6 совместителей)
- Кандидатов наук – 70 (из них 2 совместителя)

Средний возраст (лет)

- Докторов наук – 61
- Кандидатов наук – 47
- Научных сотрудников без степени – 35.5

Финансирование (в тыс. руб. на 1 января 2007 г.)

- Общий объем – 90012.0
- Финансирование РАН – 46539.6, из него:
 - базовое, в том числе кап. ремонт – 30944.6
 - целевое – 15595.0
- Федеральное агентство по науке и инновациям (Роснаука) – 26620.0, в том числе:
 - РЦКП – 25040.0
 - Научные школы – 1280.0
 - Гранты Президента РФ для государственной поддержки молодых российских учёных – кандидатов наук и их научных руководителей – 300.0
- Гранты РФФИ – 11568.4, из них:
 - Инициативные научные проекты – 7373.4
 - Материально-техническая база – 1300.0
 - Конференции – 145.0
 - Ориентированные проекты – 2600.0
 - Издательские проекты – 38.0
 - Участие учёных в международных мероприятиях за рубежом – 112.0
- Финансовые средства, выделенные на проведение фундаментальных и прикладных исследований, направленных на реализацию проектов приоритетных направлений развития науки в РТ в 2006 г. – 1763.0, в том числе:
 - Научные проекты – 1343.0
 - Организация и проведение научных международных мероприятий – 420.0

- Финансовые средства, выделенные Кабинетом Министров РТ на проведение научных международных мероприятий – 300.0
- Договора – 2996.8, в том числе:
 - Услуги – 536.2
 - Научно-исследовательские работы – 2460.6
 - Другие источники – 224.2

Публикации

- Сборники – 4
- Учебные пособия – 2
- Статьи: всего – 206, из них:
 - в зарубежных изданиях – 75
 - в отечественных центральных журналах – 39
 - в других изданиях – 92
- Тезисы: всего – 234, из них:
 - в зарубежных изданиях – 174
 - в других изданиях – 60

Темы, финансируемые из госбюджета (Отделение физических наук РАН)

1. Исследование фотоиндуцированных молекулярных процессов методами радиоспектроскопии и оптической спектроскопии.
2. Синтез и исследование новых материалов оптоэлектроники, поиск путей управления их свойствами.
3. Исследование микро- и наноструктур методами сканирующей силовой микроскопии (ССМ) и спектроскопии (ССС).
4. Разработка физико-химических основ ионно-лучевой модификации материалов для наноэлектроники и спинтроники: радиационно-стимулированный синтез магнитных и оптически активных наноструктур в диэлектриках и полупроводниках.
5. Экспериментальное и теоретическое исследование новых физических явлений в акустике и оптике магнитных диэлектриков и полупроводников.
6. Создание (синтез) и исследование парамагнитных жидких кристаллов и неупорядоченных систем с особыми магнитными и оптическими свойствами.
7. Исследование магнетизма и динамики кристаллической решётки в диэлектрических кристаллах и неупорядоченных системах радиоспектроскопическими методами.
8. Радиоспектроскопические исследования сверхпроводимости, магнетизма и фазовые переходы в сильно-коррелированных электронных системах.
9. Разработка фундаментальных проблем функционирования оптической фазовой памяти на основе явлений типа фотонного эха и сверхизлучения в примесных кристаллах и разработка оптимальных режимов использования неклассического света в квантовых устройствах обработки информации.
10. Радиоспектроскопические и биофизические исследования характеристик элементов нейронных сетей. Развитие радиоспектроскопических методов медицинской диагностики.
11. Развитие методов магнитно-резонансной томографии.
12. Разработка методов и средств математического моделирования физико-механических процессов на многопроцессорных системах с разделённой памятью.

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.
– Исследование микроскопического расслоения на магнитные и металлические фазы в сверхпроводящих соединениях. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.
– Изучение эффектов спиновой поляризации магнитных примесей электронного остова в кондо-полупроводниках. Альтшулер Т.С., к.ф.-м.н.
2. *Низкоразмерные квантовые наноструктуры.*
Квантовый транспорт электронов в магнитных наноконтактах. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.
3. *Разработка фундаментальных основ создания научной распределённой информационно-вычислительной среды на основе технологий GRID.*
Возможность применения электронных спинов в квантовом исчислении. Салихов К.М., д.ф.-м.н.
4. *Фемтосекундная оптика и новые материалы.*
Фемтосекундная когерентная спектроскопия полимерных плёнок, активированных различными добавками. Лобков В.С., к.ф.-м.н.
5. *Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий.*
Динамика фазовых переходов и дефектообразование в полупроводниковых кристаллах при импульсных энергетических воздействиях. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.

Целевая программа Президиума РАН “Поддержка молодых учёных”

1. *Поддержка деятельности институтов РАН по привлечению талантливой молодёжи к научной работе.*
Салихов К.М., д.ф.-м.н.
2. *Поддержка проведения научных школ для молодых учёных.*
– Когерентная оптика и оптическая спектроскопия. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
– Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.

Программы фундаментальных исследований Отделения физических наук РАН

1. *Новые материалы и структуры. Направление: Новые гетероструктурированные и композитные материалы с особыми свойствами.*
– 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.
– Исследование особенностей проявления нелинейно-оптического, анизотропно-магнитного и электронного отклика в наноструктурах, формируемых ионной имплантацией. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.
– Исследование фото- и электролюминесцентных свойств нанокомпозитных структур на основе кремния, синтезированных в сильно неравновесных условиях. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.
2. *Оптическая спектроскопия и стандарты частоты.*
Когерентная оптическая спектроскопия на основе явлений фотонного эха и сверхизлучения и её приложения к контролю перспективных носителей информации для процессоров. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.
3. *Сильнокоррелированные 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 твёрдых телах и спинтроника.*
Теоретическое и экспериментальное исследование возможностей создания спинового клапана на основе наноконтактов и слоистых гетероструктур. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.
5. *Когерентные акустические поля и сигналы.*
Когерентная нестационарная фонон-фотонная спектроскопия кристаллов. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.

Федеральные целевые научно-технические программы “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и техники на 2002–2006 гг.”

Приоритетное направление “Развитие инфраструктуры”

1. Подпрограмма “Развитие инфраструктуры” (XI очередь – Центры коллективного пользования)
Научно-методическое, организационное и материально-техническое обеспечение развития Регионального центра коллективного пользования физико-химических исследований веществ и материалов научным оборудованием для проведения научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ по приоритетным направлениям Программы. Координаторы от КФТИ: Салихов К.М., д.ф.-м.н.; Тарасов В.Ф., д.ф.-м.н.
2. Подпрограмма “Развитие системы ведущих научных школ как среды генерации знаний и подготовки научно-педагогических кадров высшей квалификации” (XII очередь – Научные школы)
Исследование спиновых кластеров и самоорганизующихся систем – новых материалов для квантовой информатики, оптоэлектроники, спинтроники и квантовой электроники. Салихов К.М., д.ф.-м.н.

Конкурсы Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ)

Инициативные проекты

1. Альтшулер Т.С., к.ф.-м.н.: Дальнодействующее взаимодействие между магнитными примесями в бориде редких земель и элементов переходной группы (№ 06-02-16319)
2. Андрианов С.Н., д.ф.-м.н.: Исследование режимов самоохладения в радиационно-сбалансированных лазерах (№ 06-02-81037)
3. Богданова Х.Г., д.ф.-м.н.: Изучение взаимосвязи электрических, магнитных и упругоакустических свойств магнитоупорядоченных веществ (№ 05-02-16087)
4. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.: Исследование механизмов гигантского магнитосопротивления в наноконтактах (№ 05-02-16550)
5. Водопьянов Б.П., к.ф.-м.н.: Изучение особенностей прохождения спин-поляризованного тока через мезоскопические структуры, содержащие сверхпроводящие и магнитные материалы (№ 06-02-17233)
6. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: Обменные взаимодействия и спиновая динамика в многоядерных кластерах на основе 3d и 4f ионов (№ 04-02-17163)
7. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Исследование эффектов воздействия на Са-сигнальную систему нейрона при ассоциативном и неассоциативном обучении у виноградной улитки (№ 04-04-48817)

8. Гайнутдинова Т.Х., к.б.н.: Роль оксида азота и его метаболитов в формировании долговременной сенситизации как модели патологической реакции на экстрасимилулы у виноградной улитки (№ 06-04-48834)
9. Галяметдинов Ю.Г., д.х.н.: Жидкокристаллические комплексы лантанидов с магнито- и оптически-анизотропными свойствами (№ 04-03-32923)
10. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Исследование индуцированного сверхпроводимостью ферромагнетизма в гетероструктурах сверхпроводник/ферромагнетик (№ 05-02-17198)
11. Домрачева Н.Е., к.ф.-м.н.: ЭПР новых самоорганизующихся наноструктурных материалов: жидкокристаллических металлодендримеров (№ 06-03-32387)
12. Ерёмин Р.М., к.ф.-м.н.: Электронный парамагнитный резонанс в кристаллах $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$ ($\text{M} = \text{Ba}, \text{Ca}$) (№ 06-02-17401)
13. Калачёв А.А., к.ф.-м.н.: Разработка физических принципов оптической квантовой памяти и голографии (№ 04-02-17082)
14. Калинин А.А., к.ф.-м.н.: Базовые (фундаментальные) проблемы усиления бифотонов в режиме триггерного оптического сверхизлучения (№ 05-02-16169)
15. Лобков В.С., к.ф.-м.н.: Фундаментальные проблемы фемтосекундного лазерного охлаждения полупроводников, легированных стёкол и полимеров (№ 06-02-16491)
16. Мамин Р.Ф., к.ф.-м.н.: Динамическая неоднородность вблизи структурных фазовых переходов в соединениях сложного состава (№ 05-02-17182)
17. Моисеев С.А., д.ф.-м.н.: Квантовая память, основанная на фотонном эхо в оптически плотных средах (№ 06-02-16822)
18. Петрушкин С.В., к.ф.-м.н.: Разработка фундаментальных проблем лазерного охлаждения кристаллов и стёкол, легированных редкоземельными ионами (№ 04-02-16932)
19. Попов Е.А., д.ф.-м.н.: Фундаментальные проблемы мультипольного сверхизлучения и квантовой интерференции в гамма-оптике (№ 05-02-16567)
20. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Квантовая телепортация с участием фотоиндуцированного переноса электрона (№ 06-03-32175)
21. Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Физические принципы многоимпульсного управления когерентными и релаксационными процессами в фотонных эхо-процессорах (№ 05-02-16003)
22. Тарасов В.Ф., д.ф.-м.н.: Управление зарядовым состоянием примесных ионов хрома в синтетическом форстерите (№ 06-02-16662)
23. Тейтельбаум Г.Б., д.ф.-м.н.: Особенности фазового расслоения в сильнокоррелированных электронных системах (№ 04-02-17137)
24. Уланов В.А., д.ф.-м.н.: Магнитоупругие свойства кластеров примесных d-ионов с трёхкратновырожденными основными орбитальными состояниями в кристаллах флюоритов (№ 04-02-16616)

25. Фалин М.Л., к.ф.-м.н.: Оптическое детектирование электронно-ядерных взаимодействий примесных редкоземельных ионов в возбуждённых состояниях в диэлектрических кристаллах (№ 06-02-17481)
26. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Новые приложения ионно-лучевой технологии для создания функциональных наноматериалов для оптоэлектроники и нелинейной оптики (№ 06-02-08147)

Проекты развития материально-технической базы научных исследований

Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Развитие МТБ для проведения исследований по области знаний 02 (№ 06-02-03011)

Проекты экстренной поддержки МТБ

Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Экстренная поддержка материально-технической базы (МТБ) научных исследований по проектам, уже поддержанным РФФИ (№ 06-02-01834)

Издательские проекты

Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Издание русского перевода книги С. Имре и Ф. Балаца “Квантовые вычисления и связь: инженерный подход” (№ 06-02-30016)

Организация российских и международных научных мероприятий на территории России

1. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Организация и проведение международного симпозиума “Современные достижения магнитного резонанса 2006” (№ 06-02-26145)
2. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Организация и проведение международного симпозиума “Современные проблемы химической физики” (№ 06-03-42096)

РФФИ и Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований

Самарцев В.В., д.ф.-м.н.: Фундаментальные проблемы функционирования самоохлаждающихся оптических эхо-процессоров (№ 04-02-81009)

Гранты ориентированных фундаментальных исследований РФФИ и Республики Татарстан

1. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Исследование спектроскопическими методами первичных фотохимических

стадий при фотодинамической терапии (№ 04-03-97514)

2. Сулейманов Н.М., д.ф.-м.н.: Топливные элементы на углеродных нанотрубках (№ 04-02-97504)
3. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Разработка физико-химических основ ионно-лучевой технологии получения новых материалов для наноэлектроники, спинтроники и нелинейной оптики (№ 04-02-97505)

Конкурс фонда НИОКР Республики Татарстан

Инициативные проекты

1. Андрианов В.В., к.б.н.: Создание автоматизированного комплекса ионометрической системы на основе ионоселективных мембран для анализа состава биологических сред (№ 06-6.6–330)
2. Арсланов Н.М.: Селективная фемтосекундная спектроскопия одиночных молекул в ближнеполевой оптической микроскопии (№ 06-6.3-343)
3. Баязитов Р.М., д.ф.-м.н.: Формирование субмикронных и наноразмерных светоизлучающих структур на основе кремниевых соединений с использованием импульсных ионных и лазерных пучков (№ 06-6.4–348)
4. Биктимиров Э.Ф.: Разработка программного обеспечения медицинского МР томографа с индукцией магнитного поля 0.12 Тл (№ 06-6.3-74)
5. Богданова Х.Г., д.ф.-м.н.: Исследование фазового расщепления в манганитах лантана по изменению упругих параметров и электросопротивления с целью поиска эффектов, поясняющих физическую природу колоссального магнетосопротивления (№ 06-6.1–351)
6. Бухараев А.А., д.ф.-м.н.: Наноконтакты с баллистической проводимостью (№ 06-6.3–313)
7. Воронкова В.К., к.ф.-м.н.: Исследование методом ЭПР (стационарный, времяразрешённый, импульсный режимы) новых спиновых многоядерных кластеров, перспективных для молекулярной электроники и квантовой информатики (№ 06-6.3-74)
8. Гайнутдинов Х.Л., д.б.н.: Исследование роли оксида азота и его метаболитов в функциях сердечно-сосудистой системы методом ЭПР спектроскопии стабилизированных NO-радикалов и парамагнитных комплексов железа (№ 06-6.6-60)
9. Гарифуллин И.А., д.ф.-м.н.: Апробация различных конструкций спинового клапана и исследование проникновения ферромагнетизма в сверхпроводник в наноструктурах сверхпроводник/ферромагнетик (№ 06-6.3–329)
10. Гнездилов О.И.: Исследование методами магнитного резонанса синтеза, строения и превращений потенциальных лекарственных препаратов бензофуорксанового ряда (№ 06-6.6-45)
11. Ерёмкина Р.М., к.ф.-м.н.: Исследование манганитов методом ЭПР (№ 06-6.1-350)

12. Житейцев Е.Р.: Эффекты радиации в ионных кристаллах, легированных примесями d-ионов (№ 06-6.1-24)
13. Зарипов М.М., д.ф.-м.н.: Влияние вибронных взаимодействий на свойства ионных кристаллов с центрами восьмикратнокоординированных d-ионов (№ 06-6.1-22)
14. Зарипов Р.Б.: Экспериментальное исследование нового механизма электронной спиновой поляризации возбуждённых триплетных состояний, вызванной взаимной аннигиляцией триплетов (№ 06-6.3-25)
15. Зиганшина С.А., к.х.н.: Атомно-силовая спектроскопия новых биологических и химических сенсоров на основе металлов платиновой группы (№ 06-6.6-315)
16. Ильясов А.В., д.ф.-м.н.: Развитие методов ЯМР томографии для диагностики заболеваний человека на основе измерений кровотока (№ 06-6.6-334)
17. Коновалов А.А.: Исследование димеризации ионов Tb^{3+} в синтетическом форстерите методом высокочастотной ЭПР спектроскопии (№ 06-6.1-75)
18. Куковицкий Е.Ф.: Формирование углеродных нанотрубных слоёв на модифицированной ионной бомбардировкой поверхности металлов (№ 06-6.3-35)
19. Мамбетов А.Е.: Разработка высокопроизводительных средств для расчёта спектров ЭПР последовательных электрон-дырочных пар в реакционном центре фотосистемы 1 с учётом неоднородного уширения методом Монте-Карло (№ 06-6.3-10)
20. Моисеев С.А., д.ф.-м.н.: Квантовая память в технике фотонного эха (№ 06-6.1-326)
21. Мурсалимов А.Р.: Теоретическое исследование механизма возникновения фототока и фотолюминесценции в молекулярных кристаллах методом ЭПР регистрации неравновесной поляризации электронных спинов (№ 06-6.3-349)
22. Несмелова И.М., д.ф.-м.н.: Изучение свойств эпитаксиальных структур на основе МРТ и КРТ для создания элементов ИК-оптоэлектроники с оптимальными фотоэлектрическими характеристиками (№ 06-6.1-36)
23. Обычный А.А., к.ф.-м.н.: Теоретическое и экспериментальное исследование влияния переноса энергии на поляризации электронных спинов порфиринов (№ 06-6.3-69)
24. Овчинников И.В., д.ф.-м.н.: Фото- и термопереклаемые спиновые состояния металлокомплексов (№ 06-6.2-4)
25. Петухов В.Ю., д.ф.-м.н.: Изучение ферромагнитных наноструктур, полученных методом ионно-лучевого синтеза при воздействии внешнего магнитного поля (№ 06-6.4-305)
26. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Поиск путей управления фотофизическими свойствами органических и гибридных нанокомпозитов (№ 06-6.3-327)
27. Сулейманов Н.М., д.ф.-м.н.: Мембраны топливных элементов и модификация их поверхности ионной имплантацией (№ 06-6.7-64)
28. Таланов Ю.И., д.ф.-м.н.: Исследование ионно-имплантированных центров пиннинга в тонких плёнках высокотемпературных сверхпроводников (№ 06-6.2-53)
29. Тарасов В.Ф., д.ф.-м.н.: Изучение зарядового состояния примесных ионов хрома в синтетическом форстерите и разработка методов его целенаправленного изменения (№ 06-6.1-322)
30. Уланов В.А., д.ф.-м.н.: Механизмы синтеза и физические свойства полиядерных кластеров переходных d- и f-элементов в кристаллах с суперионной проводимостью (№ 06-6.1-23)
31. Файзрахманов И.А., д.ф.-м.н.: Разработка ионно-плазменных методов синтеза защитных алмазоподобных покрытий на полимерах (№ 06-6.4-37)
32. Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н.: Изучение динамики структурных и фазовых переходов на поверхности полупроводников при мощных импульсных фотонных обработках (№ 06-6.4-59)
33. Хайбуллин И.Б., д.ф.-м.н.: Исследование явления ферромагнетизма в широкозонных полупроводниках оксидного ряда, имплантированных ионами переходной группы железа (№ 06-6.4-58)
34. Цейтлин М.П., к.ф.-м.н.: Реконструкция ЭПР томограмм с учётом априорной спектральной и пространственной информации (№ 06-6.6-57)
35. Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н.: Экспериментальное исследование новых, антиферромагнитных механизмов рассеяния света на звуке с целью создания управляемых магнитным полем дифракционных решёток в кристаллах для акустооптических и оптоэлектронных устройств (№ 06-6.1-14)

Проведение конференций

1. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Организация и проведение международного симпозиума “Современные достижения магнитного резонанса-2006” (№ 06-6.1-7)
2. Салихов К.М., д.ф.-м.н.: Организация и проведение международного симпозиума “Современные проблемы химической физики” (№ 06-6.1-8)

Важнейшие результаты фундаментальных исследований, вошедшие в отчёт РАН в 2005 году

Физика конденсированных сред

Обнаружен эффект спинового клапана для сверхпроводящего тока в мультислойной системе $[\text{Fe}/\text{V}]_n/\text{V}$, проявляющийся в том, что эффект разрушения куперовских пар слоем Fe_2 уменьшается, если на расстоянии ~ 1.5 нм находится второй слой Fe_2 с антипараллельной ориентацией намагниченности. (*КФТИ КазНЦ РАН*) (Разделы: Основные результаты; Важнейшие итоги)

В антиферромагнитном кристалле $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ обнаружены и исследованы новые магнитоакустические эффекты, связанные с линейным двупреломлением звука, обусловленным эффективным магнитоупругим взаимодействием акустических волн с колебаниями вектора антиферромагнетизма. (*КФТИ КазНЦ РАН*) (Раздел: Основные результаты)

Обнаружен неизвестный ранее эффект температурного гистерезиса магнитной структуры, индуцированной магнитным полем в смектической фазе мезогенных координационных соединений железа со спин-переменными свойствами. (*КФТИ КазНЦ РАН*) (Раздел: Основные результаты)

Оптика. Квантовая электроника

Когерентная и нелинейная оптика

Получен новый нелинейный оптический материал на основе сапфира с наночастицами золота, синтезированный ионной имплантацией, проявляющий нелинейную рефракцию в ближней ИК области с оптическим откликом пикосекундной длительности. (*КФТИ КазНЦ РАН*) (Раздел: Основные результаты)

Исследования и разработки, готовые к практическому применению

Миниатюрная рентгеновская трубка на основе углеродных нанотрубок

Разработан и изготовлен макет малогабаритной диаметром 16 мм и длиной 64 мм рентгеновской трубки с автоэлектронным эмиттером на основе нанотрубок. В трубке исключён подогреватель, что существенно упрощает конструкцию прибора и блока питания к нему, а также сокращает потребляемую прибором энергию. Области возможного применения: электронная промышленность, медицина, рентгеновская дифракция и спектроскопия. (*ИРЭ РАН, КФТИ КазНЦ РАН, ИКАН, ФГУП НПП "Торий"*) (Раздел: Важнейшие итоги)

Публикации сотрудников института

Сборники

1. Aktaş B., Mikailov F., Rameev B. (eds.): Proceedings of International Conference on Nanoscale Magnetism (ICNM-2005). Gebze, July 3–7, 2005, Special Issue of Physica Status Solidi [Phys. Stat. Sol. A **203**, no. 7, 1503–1602 (2006); Phys. Stat. Sol. C **3**, no. 5, 1249–1360 (2006)]
2. Samartsev V.V. (ed.): Photon echo and coherent spectroscopy 2005. Proc. SPIE, vol. 6181. Billingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006. 430 p.
3. Салахов М.Х., Самарцев В.В. (ред.): Когерентная оптика и оптическая спектроскопия. Сб. ст. X Междунар. молодёжной науч. школы. 24–26 октября 2006, вып. X. Казань: КГУ 2006. 266 с.

4. Салихов К.М. (ред.): Казанский физико-технический институт имени Е. К. Завойского 2005. Ежегодник. Казань: ФизтехПресс 2006. 238 с.

Учебные пособия

1. Бухараев А.А., Коновалова О.А., Бизяев Д.А., Салахов М.Х.: Атомно-силовая микроскопия микро- и наноструктур. Учеб.-метод. пособие. Казань: Лаб. оперативной полиграфии УМУ КГУ 2006. 80 с.
2. Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х.: Проблемы памяти: курс лекций. Учеб. пособие. Казань: ТГГПУ 2006. 76 с.

Статьи*

1. Akdogan N., Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Westphalen A., Tagirov L.R., Aktaş B., Zabel H.: Anisotropic ferromagnetism in Co-implanted TiO₂ rutile. *J. MMM* **300**, no. 1, e4–e7 (2006)
2. Altshuler T.S., Goryunov Yu.V., Bresler M.S.: Ferromagnetic ordering of iron impurities in the mixed-valence semiconductor SmB₆. *Phys. Rev. B* **73**, 235210(8) (2006)
3. Arslanov N.M.: The optical form of the scanning nearfield optical microscopy probe with subwavelength aperture. *J. Opt. A, Pure Appl. Opt.* **8**, 338–344 (2006)
4. Bashkirov E.K., Petrushkin S.V.: On the quantum theory of superradiance in two- and three-level macroscopic system. *Laser Phys.* **16**, no. 8, 1202–1212 (2006)
5. Batalov R.I., Bayazitov R.M., Nurutdinov R.M., Shmagin V.B., Krizhkov D.I., Ivlev G.D., Gaiduk P.I., Dezsi I., Kotai E.: Formation of light-emitting iron disilicide/silicon heterostructures by means of pulsed ion and laser beams. *Proc. of VIII Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows (CMM-8) (Ryabchikov A.A., ed.), pp. 330–332. Tomsk 2006.*
6. Cetin A., Kibar R., Ayvacikli M., Can N., Buchal Ch., Townsend P.D., Stepanov A.L., Karali T., Selvi S.: Optical properties of Cu implanted ZnO. *Nucl. Instr. Meth. Phys. B* **249**, 474–477 (2006)
7. Chuklanov A.P., Bukharaev A.A.: Tip shape reconstruction of the probes for shear-force and near-field microscopes. *Surf. Interface Anal.* **38**, no. 4, 587–589 (2006)
8. Chuklanov A.P., Bukharaev A.A., Ziganshina S.A.: Computer program for the grain analysis of AFM images of nanoparticles placed on a rough surface. *Surf. Interface Anal.* **38**, no. 4, 679–681 (2006)
9. Deisenhofer J., Eremina R.M., Pimenov A., Gavrilova T., Berger H., Johnsson M., Lemmens P., Krug von Nidda H.-A., Loidl A., Lee K.-S., Whangbo M.-H.: Structural and magnetic dimers in the spin-gapped system CuTe₂O₅. *Phys. Rev. B* **74**, 174421(8) (2006)
10. Domracheva N.E., Mirea A., Schwörer M., Torre-Lorente L., Lattermann G.: Magnetic properties of poly(propylene imine) copper dendromesogenic complexes: an EPR study. *Chem. Phys. Chem.* **7**, no. 12, 2512–2524 (2006)
11. Drezet A., Hohenau A., Stepanov A.L., Ditzbacher H., Steinberg B., Aussenegg F.R., Leitber A., Krenn J.R.: Surface plasmon polariton Mach-Zehnder interferometer and oscillation fringes. *Plasmonics* **1**, 141–145 (2006)
12. Drezet A., Hohenau A., Stepanov A.L., Ditzbacher H., Steinberg B., Galler N., Aussenegg F.R., Leitber A., Krenn J.R.: How to erase surface plasmon fringes. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 091117(3) (2006)
13. Drezet A., Stepanov A.L., Hohenau A., Steinberg B., Galler N., Ditzbacher H., Leitber A., Aussenegg F.R., Krenn J.R., Gonzalet M.U., Weeber J.-C.: Surface plasmon interference fringes in back-reflection. *Europhys. Lett.* **74**, 693–698 (2006)
14. Eremin M.V., Zakharov D.V., Eremina R.M., Deisenhofer J., Krug von Nidda H.-A., Obermeier G., Horn S., Loidl A.: Unconventional anisotropic superexchange in NaV₂O₅. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027209(4) (2006)
15. Evlyukhin A.B., Bozhevolnyi S.I., Stepanov A.L., Krenn J.R.: Splitting of a surface plasmon beam by chains of nanoparticles. *Appl. Phys. B* **84**, 29–34 (2006)
16. Fritsch V., Thompson J.D., Sarrao J.L., Krug von Nidda H.-A., Eremina R.M., Loidl A.: Correlation between magnetic frustration and electrical conductivity in RInCu₄ compounds (R = Gd, Tm). *Phys. Rev. B* **73**, 094413(7) (2006)
17. Gainutdinova T.Kh., Tagirova R.R., Ismailova A.I., Muranova L.N., Gainutdinov Kh.L., Balaban P.M.: Protein synthesis-dependent reactivation of a contextual conditioned reflex in the common snail. *Neurosci. Behav. Physiol.* **36**, no. 2, 203–207 (2006)
18. Garifullin I.A., Tikhonov D.A., Garif'yanov N.N., Fatkhov M.Z., Theis-Bröhl K., Westerholt K., Sprungmann D., Zabel H., Brucas R., Hjörvarsson B., Tagirov L.R.: Study of the possibility of a spin valve on the basis of superconductor/ferromagnet multilayers. *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, 1257–1267 (2006)
19. Gogova D., Siche D., Fornari R., Monemar B., Gibart P., Dobos L., Pecz B., Tuomisto F., Bayazitov R., Zollo G.: Optical and structural studies of high-quality bulk-like GaN grown by HVPE on a MOVPE AlN buffer layer. *Semicond. Sci. Technol.* **21**, 702–708 (2006)
20. Golze C., Alfonsov A., Klingeler R., Büchner B., Kataev V., Mennerich C., Klauss H.-H., Goiran M., Broto J.-M., Rakoto H., Demeshko S., Leibel G., Meyer F.: Tuning the magnetic ground state of a tetranuclear nickel(II) molecular complex by high magnetic fields. *Phys. Rev. B* **73**, 224403(8) (2006)
21. Gonzalez M.U., Weeber J.-C., Baudrion A.-L., Dereux A., Stepanov A.L., Krenn J.R., Devaux E., Ebbesen T.W.: Design, near-field characterisation and modeling of 45° surface-plasmon Bragg mirrors. *Phys. Rev. B* **73**, 155416(13) (2006)
22. Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B.: Interplay of externally doped and thermally activated holes in LSCO and its impact on the pseudogap crossover. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 247003(4) (2006)
23. Gruzdev M.S., Usol'seva N.V., Torre-Lorente L., Lattermann G., Domracheva N.E.: Synthesis and mesomorphic properties of iron containing dendrimeric complex of second generation, derivative of 3,4-n-dodecyloxybenzoyl poly(propylene imine). *Жидкие кристаллы и их практ. использ.* № 4, 89–98 (2006)
24. Guler S., Rameev B., Khaibullin R.I., Bayrakdar H., Aktaş B.: EPR study of paramagnetic Fe³⁺ centers in

* Статьи, опубликованные в сборнике Ежегодник 2005, не приводятся.

- iron-implanted TiO_2 rutile. *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, no. 7, 1533–1538 (2006)
25. Kalachev A.A., Kalinkin A.A., Samartsev V.V., Shkalikov A.V.: Optical spectroscopy using biphotons. *Proc. SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 618109(6). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 26. Kalachev A.A., Kröll S.: Coherent control of collective spontaneous emission in an extended atomic ensemble and quantum storage. *Phys. Rev. A* **74**, 023814(10) (2006)
 27. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipole cluster superfluorescence: the generalized Dicke model. *Proc. SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 618112(6). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 28. Kalachev A.A., Samartsev V.V.: Multipole gamma super-radiance of even-even nuclei. *Proc. of the VII AFOSR Workshop "Isomers and Quantum Nucleonics"*. Dubna, June 26–July 1 2005, pp. 35–44. Dubna: JINR 2006.
 29. Kalachev A.A., Vlasova D.D.: Code division in optical memory devices based on photon echo. *Proc. SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 61810G(1-6). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 30. Kataev V., Golze C., Alfonsov A., Klingeler R., Buechner B., Goiran M., Broto J.-M., Rakoto H., Mennerich C., Klauss H.-H., Demeshko S., Leibel G., Meyer F.: Magnetism of a novel tetranuclear nickel(II) cluster in strong magnetic fields. *J. Phys.* **51**, 351–354 (2006)
 31. Konovalov A.A., Lis D.A., Subbotin K.A., Tarasov V.F., Zharikov E.V.: High-frequency tunable EPR spectroscopy of Tm^{3+} ions in synthetic forsterite. *Appl. Magn. Reson.* **30**, no. 3-4, 673–682 (2006)
 32. Krupska A., Augustyniak-Jablokow M.A., Yablokov Yu.V., Zelentsov V.V., Ulanov V.A., Mrozinski J.: EPR discovery of a new pressure-induced low-spin phase in $(2\text{Me-5Et-PyH})[\text{Fe}(\text{Th-5Cl-Sa})_2]$. *Acta Phys. Polon. A* **110**, 81–95 (2006)
 33. Lisin V.N., Samartsev V.V., Shgeda A.M., Zuikov V.A., Korableva S.L.: Low magnetic fields behavior of photon echo in $\text{LuLiF}_4:\text{Eu}^{3+}$. *Laser Phys. Lett.* **3**, no. 9, 423–426 (2006)
 34. Lobkov V.S., Leont'ev A.V., Salikhov K.M., Samartsev V.V., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: Stimulated femtosecond photon echo in dye-doped polymer film at room temperature. *Laser Phys. Lett.* **3**, no. 10, 485–489 (2006)
 35. Lobkov V.S., Salikhov K.M., Samartsev V.V., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: Femtosecond photon echo in dye-doped polymer film at a liquid nitrogen and room temperatures. *Proc. SPIE* (Drabovich K., Makarov V., Shen Yu.-R., eds.), vol. 6259, pp. 625914(1-6). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 36. Lobkov V.S., Salikhov K.M., Samartsev V.V., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: Femtosecond photon echo in dye-doped polymer film at room temperature. *Laser Phys. Lett.* **3**, no. 1, 26–30 (2006)
 37. Migachev S.A., Sadykov M.F., Shakirzyanov M.M.: Magnetic sound birefringence in the easy-axis antiferromagnet $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. *J. MMM* **300**, Issue 1, e462–e464 (2006)
 38. Mikhailov F.A., Kazan S., Rameev B.Z., Acikgoz M., Aktaş B.: EPR study of the structural phase transitions in Fe^{3+} doped TlInS_2 . *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, no. 7, 1580–1585 (2006)
 39. Mikhailov F.A., Kazan S., Rameev B.Z., Kulibekov A.M., Kerimova E., Aktaş B.: Twinned EPR spectra of Fe^{3+} centers in ternary layered TlGaS_2 crystal. *Solid State Commun.* **138**, 239–241 (2006)
 40. Mingalieva L., Sukhanov A., Voronkova V., Galeev R., Andruh M., Ghergh R.: Analysis of the polycrystalline EPR spectra of Cu-Gd dimers. *Proc. of the X Int. Youth Sci. School "Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application"*. Kazan, October 31–November 3, pp. 19–22. Kazan 2006.
 41. Moiseev S.A.: Quantum memory protocol in QED cavity based on photon echo. E-print: quantum-ph/0605035 (2006)
 42. Moiseev S.A., Chen Y., Ham B.S.: Numerical analysis of stationary light for potential applications of quantum interface. *J. Kor. Phys. Soc.* **49**, no. 6, 2293–2302 (2006)
 43. Moiseev S.A., Ham B.S.: Generation and manipulation of multi-color stationary light field using electromagnetically induced transparency. E-print: quant-ph/0606243 (2006)
 44. Moiseev S.A., Ham B.S.: Quantum control and manipulations of three-color stationary light. *J. Kor. Phys. Soc.* **48**, no. 4, 540–545 (2006)
 45. Moiseev S.A., Ham B.S.: Quantum manipulation of two-color stationary light: quantum wavelength conversion. *Phys. Rev. A* **73**, 033812(9) (2006)
 46. Moiseev S.A., Simon C., Gisin N.: Photon echo quantum memory for arbitrary non-stationary light fields. E-print: quantum-ph/0609173 (2006)
 47. Mursalimov A.R., Salikhov K.M.: Manifestations in the EPR spectrum shape of memory effects in the electron spin polarization in the case of two consecutive radical pairs. *Appl. Magn. Reson.* **30**, no. 1, 85–102 (2006)
 48. Nefedov A., Akdogan N., Zabel H., Khaibullin R.I., Tagirov L.R.: Spin polarization of oxygen atoms in ferromagnetic, Co-doped rutile TiO_2 . *Appl. Phys. Lett.* **89**, 182509(3) (2006)
 49. Nikiforov V.G., Moiseev S.A.: Molecular librations in a liquid investigated by ultrafast optical Kerr effect spectroscopy. E-print: physics/0601195 (2006)
 50. Okay C., Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Okutan M., Yıldız F., Popok V.N., Aktaş B.: Ferromagnetic resonance study of iron implanted PET foils. *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, no. 7, 1525–1532 (2006)
 51. Ole's A.M., Feiner F.F., Horsch P., Khaliullin G.: Microscopic theory of magnetic interactions in KCuF_3 and

- LaMnO₃ – the role of charge transfer. *Phys. Stat. Sol. (b)* **243**, 89–93 (2006)
52. Petrushkin S.V., Samartsev V.V.: Quantum stochastic equation for quasi-two-level solid-state laser. *Proc. SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 618117(1–5). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 53. Petukhov V.Yu., Panarina N.Yu., Khabibullina N.R., Zhelglov E.P., Mozhanova A.A.: Features of FMR spectra observed in granular films formed by Fe⁺ implantation into PMMA. *Appl. Magn. Reson.* **30**, no. 2, 233–242 (2006)
 54. Popok V.N., Lukashevich M.G., Gorbachuk N.I., Odzhaev V.B., Khaibullin R.I., Khaibullin I.B.: Magnetoresistive effect and impedance spectroscopy of polyimide implanted by cobalt ions. *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, no. 7, 1545–1549 (2006)
 55. Rameev B.Z., Gupta A., Yıldız F., Tagirov L.R., Aktaş B.: Strain-induced magnetic anisotropies in epitaxial CrO₂ thin films probed by FMR technique. *J. MMM* **300**, Issue 1, e526–e529 (2006)
 56. Rameev B., Yıldız F., Kazan S., Aktaş B., Gupta A., Tagirov L., Rata D., Bürgler D., Grünberg P., Schneider C.M., Kämmerer S., Reiss G., Hütten A.: FMR investigations of half metallic ferromagnets. *Phys. Stat. Sol. (a)* **203**, no. 7, 1503–1512 (2006)
 57. Reinhardt C., Passinger S., Kiyan R., Stepanov A.L., Chichkov B.N.: Laser-based rapid prototyping of plasmonic components. *Proc. SPIE “Plasmonics: Metallic nanostructures and their optical properties IV”* (Stockman M.I., ed.), vol. 6323, 63230P(1–8). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 58. Rysanyansky A.I., Palpant B., Debrus S., Khaibullin R.I., Stepanov A.L.: Nonlinear optical properties of copper nanoparticles synthesized in indium tin oxide matrix by ion implantation. *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1346–1353 (2006)
 59. Samartsev V.V., Vlasova D.D.: Acousto-optical wavefronts transformation under conditions of multi-pulses excitation of three-level system. *Proc. SPIE* (Samartsev V.V., ed.), vol. 6181, pp. 61810H(1–5). Bellingham, Washington: SPIE-The Int. Society for Optical Engineering 2006.
 60. Seredyuk M., Gaspar A.B., Ksenofontov V., Reiman S., Galyametdinov Yu., Haase W., Rentschler E., Gutlich P.: Room temperature operational thermochromic liquid crystals. *Chem. Mater.* **18**, 2513–2519 (2006)
 61. Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Two types of adiabats in electromagnetically induced transparency. *Phys. Rev. A* **74**, 04307(4) (2006)
 62. Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Gheysen S., Rostovtsev Y., Kocharovskaya O., Mandel P.: Level mixing induced transparency II. Different transition probabilities of the crossing lines. *Appl. Phys. B* **83**, 635–341 (2006)
 63. Silant’eva D.I., Andrianov V.V., Gainutdinova T.Kh., Gainutdinov Kh.L., Pleshchinskii I.N.: The effects of changes in extracellular calcium concentrations on the electrical properties of command neurons after acquisition of a defensive conditioned reflex in snails. *Neurosci. Behav. Physiol.* **36**, no. 3, 209–212 (2006)
 64. Smith R., Reyes A.P., Ashey R., Caldwell T., Prokofiev A., Assmus W., Teitel’baum G.: NMR studies of incommensurate quantum antiferromagnetic state of LiCuVO₄. *Physica B: Condens. Matter* **378–380**, 1060–1062 (2006)
 65. Steinberg B., Hohenau A., Ditzbacher H., Stepanov A.L., Drezet A., Aussenegg F.R., Leitner A., Krenn J.R.: Dielectric stripes on gold as surface plasmon waveguides. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 094104(3) (2006)
 66. Stepanov A.L.: Optical properties of metal nanoparticles formed by ion implantation and modified by laser annealing. NATO Advanced Study Institute (Sozopol, Bulgaria, 2005) “Functional properties of nanostructured materials”, vol. 223, pp. 139–160. Dordrecht: Springer 2006.
 67. Suter A., Morenzoni E., Garifanov N., Khasanov R., Kirk E., Luetkens H., Prokscha T., Horisberger M.: Nonlocal Meissner screening. *Physica B* **374–375**, 243–246 (2006)
 68. Togoulev P.N., Suleimanov N.M., Conder K.: Pinning enhancement in MB2-magnetic particles composites. *Physica C* **450**, 45–47 (2006)
 69. Tsarevskii S.L., Shaposhnikova T.S., Talanov Yu.I.: Peculiarities of pinning and microwave absorption hysteresis in thin superconducting films. *J. Supercond.* **19**(1–2), 95–97 (2006)
 70. Tseytlin M., Dhami A., Eaton S.S., Eaton G.R.: Comparison of maximum entropy and filtered back-projection methods to reconstruct rapid-scan EPR images. *J. Magn. Reson.* **184**, 157–168 (2006)
 71. Tseytlin M., Dhami A., Quine R.W., Rinard G.A., Eaton S.S., Eaton G.R.: Electron spin T of a nitroxyl radical at 250 MHz measured by rapid scan EPR. *Appl. Magn. Reson.* **30**, no. 3–4, 651–656 (2006)
 72. Turanova O.A., Galyametdinov Yu.G.: Liquid crystalline N-aryl-β-aminovinylketones and their complexes with lanthanides. *Rus. J. Gen. Chem.* **76**, no. 7, 1095–1099 (2006)
 73. Turanova O.A., Turanov A.N., Lapaev D.V., Gnezdilov O.I., Lobkov V.S., Galyametdinov Yu.G.: The first mesogenic derivative of boron difluoride β-diketonate. *Zh. Obsch. Khim.* **76**, no. 5, 767–769 (2006)
 74. Vavilova E., Hellmann I., Kataev V., Taeschner C., Büchner B., Klingeler R.: Magnetic properties of vanadium oxide nanotubes probed by static magnetization and ⁵¹V NMR. *Phys. Rev. B* **73**, 144417(7) (2006)
 75. Vodopyanov B.P., Tagirov L.R.: Boundary resistance in magnetic multilayers. *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 1545–1552 (2006)
 76. Zvezdochkina N.V., Muranova L.N., Andrianov V.V., Arkhipova S.S., Gainutdinov Kh.L., Golubev A.I., Pleshchinskii I.N.: Locomotor responses and neuron excitability in conditions of haloperidol blockade of dopamine in invertebrates and vertebrates. *Neurosci. Behav. Physiol.* **36**, no. 1, 21–27 (2006)

77. Алексеев И.Е., Попов Е.А., Самарцев В.В., Куценко С.М.: Распространение γ -квантов в периодической "оптической" среде ^{178}Hf с инверсной заселённостью ядерных уровней. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 5, 705–708 (2006)
78. Альтшулер Т.С., Бреслер М.С., Горюнов Ю.В.: Ферромагнитное упорядочение примеси железа в полупроводнике с переменной валентностью SmB_6 . ЖЭТФ **130**(4), 729–738 (2006)
79. Аминова Р.М., Шамов Г.А., Савостина Л.И., Миронов В.Ф.: К вопросу о механизме реакции 2-метоксибензо[d]-1,3,2-диоксафосфорин-4-она с хлоралем на основе квантовохимических расчётов. I. Реакция расширения шестичленного Р-гетероцикла до семичленного. Журн. общей химии **76**, № 6, 946–955 (2006)
80. Аптикашева А.Г., Ламберов А.А., Шустов В.А., Егорова С.Р., Левин О.В.: Анализ фазового состава и рентгеновское исследование промышленных гидроксидов алюминия. Журн. физ. химии **80**, № 2, 365–367 (2006)
81. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М.: Формирование и свойства тонкоплёночных полупроводниковых соединений на основе кремния на кремнии с использованием ионной имплантации и импульсных воздействий. Изв. ВУЗов. Материалы электронной техники **1**, 28–34 (2006)
82. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И.: Особенности формирования светоизлучающих слоёв $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ в условиях интенсивных импульсных радиационных воздействий. Тр. XVI Междунар. совещания "Радиационная физика твёрдого тела" (Бондаренко Г.Г., ред.), с. 305–312. Севастополь: ГНУ НИИ ПМТ 2006.
83. Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И.: Формирование гетероструктур $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ под действием импульсных энергетических воздействий. Тр. X конф. студентов, аспирантов и молодых учёных по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (ПДММ-2006) (Галкин Н.Г., ред.), с. 130–136. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН 2006.
84. Баталов Р.И., Нурутдинов Р.М., Баязитов Р.М., Крыжков Д.И., Шмагин В.Б., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И., Дези И., Котаи Э.: Микроструктура и ИК люминесценция гетероструктур дисилицид железа/кремний, синтезированных импульсными ионными и лазерными пучками. Сб. ст. "Физика экстремальных состояний вещества-2006" (Фортов В.Е. и др., ред.), с. 198–200. Черноголовка: ИПХФ РАН 2006.
85. Бахтин А.И., Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Хайбуллин И.Б.: Оптические свойства и кристаллохимия синтетического рутила, имплантированного ионами кобальта. Зап. рос. минерал. о-ва № 6, 75–84 (2006)
86. Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Капралов А.В., Куркин М.И., Потапов А.А., Николаев В.В., Леонтьев В.Е.: Эффект невзаимности при распространении ультразвука в монокристалле манганита лантана состава $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$. ФТТ **48**, вып. 2, 309–311 (2006)
87. Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А., Гатиятов Р.Г.: Гигантское магнитосопротивление никелевых наноконтактов, полученных электрохимическим методом. Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования № 2, 24–28 (2006)
88. Бухараев А.А., Бизяев Д.А., Бородин П.А., Гатиятов Р.Г., Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Зиганшина С.А.: Сканирующая зондовая микроскопия микро- и наноструктур в сильных магнитных полях. Тр. X Междунар. науч. конф. и школы-семинара по микро- и нанoeлектронике. Дивноморское, 24–29 сентября, с. 43–45. Таганрог: ТГРТУ 2006.
89. Варламов А.Г., Уланов В.А.: Проводимость ионных диэлектриков $\text{CdF}_2:\text{Ag}^+$ и $\text{CaF}_2:\text{Ag}^+$ в условиях рентгеновского облучения. Изв. ВУЗов. Проблемы энергетики № 5-6, 97–100 (2006)
90. Вишневская Г.П.: Физик и лирик. К 100-летию со дня рождения член.-корр. АН СССР Б. М. Козырева. Вестн. РАН **76**, № 5, 462–467 (2006)
91. Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Константинов В.Н., Фахрутдинов А.Р.: ЭПР ионов Gd^{3+} в универсальных катионитах КУ-2 и КУ-1. Сб. ст. "Структура и динамика молекулярных систем" (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 1, с. 184–188. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
92. Власова Д.Д., Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Ассоциативная выборка информации в оптической памяти на основе фотонного эха с использованием кодов Фрэнка. Учён. зап. КГУ. Сер. "Физ.-мат. науки", т. 148, кн. 1, с. 77–82 (2006)
93. Власова Д.Д., Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Когерентное детектирование фазоманипулированных сигналов в режиме долгоживущего фотонного эха. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 4–9. Казань: ЗАО "Новое знание" 2006.
94. Власова Д.Д., Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Кодовое разделение каналов в оптической памяти на основе фотонного эха. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 518–521 (2006)
95. Власова Д.Д., Самарцев В.В.: Визуализация акустических сигналов в трёхуровневых средах в режиме долгоживущего фотонного эха. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 10–15. Казань: ЗАО "Новое знание" 2006.
96. Власова Д.Д., Самарцев В.В.: Модуляция последовательностей оптических импульсов в режиме акустооптического преобразования волновых фронтов. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х.,

- Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 79–82. Казань: ИЦ КГУ 2006.
97. Воробьев А.Ю., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Фемтосекундный когерентный режим лазерного охлаждения полимерных плёнок, легированных молекулами красителя. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 241–244. Казань: ИЦ КГУ 2006.
98. Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Мингалиева Л.В., Суханов А.А., Андрух М.: ЭПР димера медь-гадолиний. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 1, с. 193–196. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
99. Гайдук П.И., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Ивлев Г.Д.: Структура слоёв кремния, легированного железом или эрбием, после облучения мощными лазерными импульсами. Материалы VI Междунар. науч.-техн. конф. “Квантовая электроника” (Манак И.С., ред.), с. 144–146. Минск: Акад. упр. при Президенте Республики Беларусь 2006.
100. Гайнутдинов Х.Л., Андрианов В.В., Береговой Н.А., Гайнутдинова Т.Х., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Силантьева Д.И., Штарк М.Б., Эпштейн О.И.: Исследование эффектов антител к белку S100 на ионные каналы входящего и выходящего токов идентифицированных нейронов улитки *Helix lucorum*. Журн. эволюц. биохимии и физиол. **42**, № 3, 225–230 (2006)
101. Гайнутдинов Х.Л., Зефирова А.Л., Юртаева С.В., Обыкновенный А.А., Гнездилов О.И., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Рахматуллина Ф.Ф.: Исследование методом ЭПР спектроскопии продукции оксида азота в тканях крыс при ишемическом повреждении сердца. Материалы Междунар. симп. “Активные формы кислорода, азота и хлора в регуляции клеточных функций в норме и при патологии” (Степура И.И., Заводник И.Б., ред.), ч. 1, с. 51–54. Гродно: Гродн. гос. мед. ун-т 2006.
102. Галеев Р.Т.: Влияние слабого междимерного взаимодействия на форму линии ЭПР поликристаллических образцов. ФТТ **48**, вып. 5, 821–825 (2006)
103. Галкин Н.Г., Горошко Д.Л., Чусовитин Е.А., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Молекулярно-лучевая эпитаксия кремния на слоях кремния, имплантированных ионами железа: морфология, структура и оптические свойства. Тр. X конф. студентов, аспирантов и молодых учёных по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (ПДММ-2006) (Галкин Н.Г., ред.), с. 146–155. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН 2006.
104. Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Степанов А.Л., Усманов Т., Маркуес С., да Силва Р.С., Алвес Е.: Исследование методом Z-сканирования по отражению нелинейно-оптических характеристик композитных материалов на основе сапфира с наночастицами серебра, меди и золота. Оптика и спектроскопия **101**, № 4, 652–660 (2006)
105. Гарифуллин И.А.: Эффект близости сверхпроводник/ферромагнетик и его возможное использование в спинтронике. УФН **176**, № 6, 676–679 (2006)
106. Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: АСМ измерения магнитострикции в никелевых структурах. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 16–21. Казань: ЗАО “Новое знание” 2006.
107. Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Высокопрецизионные измерения магнитострикции в никелевых структурах с помощью атомно-силового микроскопа. Учён. зап. КГУ. Сер. “Физ.-мат. науки”, т. 148, кн. 1, с. 109–115 (2006)
108. Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Прецизионные измерения магнитострикции в никелевых структурах, используемых для получения магниторезистивных наноконтактов. Письма в ЖТФ **32**, вып. 19, 72–78 (2006)
109. Житейцев Е.Р., Уланов В.А., Зарипов М.М., Жеглов Е.П.: ЭПР центров трёхвалентного железа в кристалле $\text{SrF}_2:\text{Fe}$. ФТТ **48**, вып. 10, 1779–1783 (2006)
110. Захаров М.В., Кагадей В.А., Львова Т.Н., Нефедцев Е.В., Оскомов К.В., Проскуровский Д.И., Романенко С.В., Фаттахов Я.В., Хайбуллин И.Б.: Влияние обработки кремния в атомарном водороде на образование локальных областей плавления при импульсном световом облучении. ФТП **40**, вып. 1, 61–66 (2006)
111. Зиганшина С.А., Можанова А.А., Челнокова И.А., Гедмина А.В.: Атомно-силовая микроскопия наночастиц палладия, электроосаждённых на графитовых электродах. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 22–26. Казань: ЗАО “Новое знание” 2006.
112. Зиганшина С.А., Чуکلанов А.П., Бухараев А.А., Шайдарова Л.Г., Челнокова И.А., Гедмина А.В., Будников Г.К.: Изучение многофазных наноструктур при помощи атомно-силового микроскопа, работающего в режиме фазового контраста. Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исслед. № 2, 18–23 (2006)
113. Зуйков В.А., Лобков В.С., Салихов К.М., Самарцев В.В., Сафиуллин Г.М.: Исследование фемтосекундного фотонного эха в полимерной плёнке, легированной молекулами красителя, при комнатной температуре. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 473–476 (2006)
114. Ибрагимова М.И., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П., Коныхов Г.В., Низамов Р.Н.: Сравнение закономерностей метаболических изменений, происходящих в крови и тканях органов мышей под действием растительного радиотоксина и облучения: изучение методом ЭПР. Материалы Всерос. науч. конф. “Проблемы радиационной безопасности”. Казань, 23–24 июня, с. 37–41. Казань: ФГУ ФЦТРБ ВНИВИ 2006.

115. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Динамика полного внутреннего отражения ИК излучения при лазерном отжиге имплантированного кремния. Сб. ст. "Физика экстремальных состояний вещества-2006" (Фортов В.Е. и др., ред.), с. 179–181. Черногловка: ИПХФ РАН 2006.
116. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Поглощение и отражение ИК излучения в Si при наносекундном лазерном воздействии. Материалы VI Междунар. конф. "Лазерная физика и оптические технологии" (Казак Н.С. и др., ред.), с. 112–115. Гродно: ГроднГУ 2006.
117. Ириняков Е.Н.: За гранью симметрий Редже коэффициентов Клебша-Гордана группы вращений. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 165–168. Казань: ИЦ КГУ 2006.
118. Ириняков Е.Н., Дмитриева Р.О.: Простой вывод симметрий Редже коэффициентов Клебша-Гордана группы вращений. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 225–228. Казань: ИЦ КГУ 2006.
119. Ириняков Е.Н., Леушин А.М.: Вычисление параметров нелинейной теории конфигурационного взаимодействия для иона Cr^{3+} . Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 115–118. Казань: ИЦ КГУ 2006.
120. Калачёв А.А., Калинин А.А., Самарцев В.В., Шкаликов А.В.: Оптическая спектроскопия с помощью бифотонов. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 480–483 (2006)
121. Калачёв А.А., Самарцев В.В.: Квантовая память в режиме оптического субизлучения. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 514–517 (2006)
122. Калашников Д.А., Калинин А.А., Шкаликов А.В., Самарцев В.В.: Перенос информации с помощью бифотонов в протоколах квантовой криптографии. Учён. зап. КГУ. Сер. "Физ.-мат. науки", т. 148, кн. 1, с. 124–128 (2006)
123. Каримуллин К.Р., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Детектирование световых импульсов в режиме счёта фотонов. Учён. зап. КГУ. Сер. "Физ.-мат. науки", т. 148, кн. 1, с. 135–141 (2006)
124. Каримуллин К.Р., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Спектроскопическое исследование перспективных носителей оптической информации. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 177–180. Казань: ИЦ КГУ 2006.
125. Кувшинова Н.В., Обычный А.А., Салихов К.М.: Применение методов радиоспектроскопии для исследования механизма формирования спиновой поляризации триплетных молекул порфиринов. Сб. ст. "Структура и динамика молекулярных систем" (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 1, с. 445–448. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
126. Кувшинова Н.В., Июдин В.С., Обычный А.А., Салихов К.М.: Изучение поляризации электронных спинов триплетной молекулы гематопорфирина IX в присутствии кислорода методом ВР ЭПР. Сб. ст. "Структура и динамика молекулярных систем" (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 1, с. 449–453. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
127. Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Многоимпульсное управление релаксационными процессами в твёрдотельных фотонных эхо-процессорах. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 43–49. Казань: ЗАО "Новое знание" 2006.
128. Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Многоимпульсные оптические последовательности в твёрдотельных фотонных эхо-процессорах. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 12, 1771–1775 (2006)
129. Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Фазовые оптические последовательности в технике сужения спектральных линий. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 197–200. Казань: ИЦ КГУ 2006.
130. Леонтьев А.В., Иванин К.В., Лобков В.С., Сафиуллин Г.М., Климовицкий А.Е., Салихов К.М., Самарцев В.В.: Фемтосекундное фотонное эхо в полимерной плёнке, легированной молекулами красителя, при комнатной температуре. Учён. зап. КГУ. Сер. "Физ.-мат. науки", т. 148, кн. 1, с. 135–141 (2006)
131. Леонтьев А.В., Лобков В.С., Сафиуллин Г.М., Салихов К.М., Самарцев В.В.: Спектроскопическое исследование сигналов стимулированного фотонного эха в полимерной плёнке, допированной молекулами красителя, при комнатной температуре. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы "Когерентная оптика и оптическая спектроскопия" (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 139–142. Казань: ИЦ КГУ 2006.
132. Леушин А.М., Ириняков Е.Н.: К интерпретации оптических спектров ионов элементов группы железа. Оптика и спектроскопия **100**, № 3, 368–373 (2006)
133. Лончаков А.Т., Подгорных С.М., Соколов В.И., Груздев Н.Б., Шакуров Г.С.: Низкоэнергетические возбуждённые состояния ионов 3d-переходных металлов в селениде цинка. ФТТ **48**, вып. 9, 1610–1613 (2006)
134. Лопатин О.Н., Хайбуллин Р.И., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Возможности ионной имплантации в геммологии. Учён. зап. КГУ. Сер. "Естественные науки", т. 148, кн. 4, с. 103–110 (2006)

135. Мамин Р.Ф., Мигачёв С.А., Садыков М.Ф., Родионов А.А., Лунёв И.В., Изотов В.В., Гусев Ю.А.: Неоднородные состояния в манганитах. Сб. тр. IV Междунар. науч.-техн. конф. “Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения” (Intermatic-2005). Москва, 25–28 октября, с. 231–241. Москва 2006.
136. Мигачёв С.А., Садыков М.Ф., Шакирзянов М.М.: Поворот плоскости поляризации и линейное двупреломление звука в гематите ниже точки Морино. ФТТ **48**, вып. 4, 663–666 (2006)
137. Мингалиева Л.В., Суханов А.А., Галеев Р.Т., Воронкова В.К., Новицкий Г., Чёрня В.: Исследование обменных взаимодействий в трёхъядерном гетерокластере. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 2, с. 32–35. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
138. Мусатов А.Л., Гуляев Ю.В., Израэльянц К.Р., Куковицкий Е.Ф., Киселёв Н.А., Масленникова О.Ю., Гузилов И.А., Шигалина О.М., Ормонт А.Б., Чиркова Е.Г.: Низковольтные планарные автоэлектронные эмиттеры на основе углеродных нанотрубок. Радиотехника и электроника № 8, 1019–1024 (2006)
139. Назипов Р.А., Зюзин Н.А., Пятаев А.В., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М.: Гамма-резонансная спектроскопия аморфного сплава, облучённого импульсным ионным пучком. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 87–90. Казань: ИЦ КГУ 2006.
140. Никифоров В.Г., Лобков В.С.: Исследование вращательной динамики молекул в жидкости в субпикосекундном диапазоне. Квантовая электроника **36**, № 9, 984–988 (2006)
141. Петрушкин С.В.: Квантовое стохастическое уравнение для радиационно-сбалансированного лазера. Учён. зап. КГУ. Сер. “Физ.-мат. науки”, т. 148, кн. 1, с. 170–178 (2006)
142. Петрушкин С.В.: Теплообмен и охлаждение в полупроводниковых лазерах. Сб. тр. Междунар. конф. “Фундаментальные проблемы оптики-2006”, с. 204–205. Санкт-Петербург: ИД “Corvus” 2006.
143. Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Квантовая теория радиационно-сбалансированного лазера. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 536–539 (2006)
144. Рамеев Б.З., Йылдыз Ф., Казан С., Акташ Б., Рата Д., Бюрглер Д., Грюнберг П., Шнейдер К.М., Кеммерер С., Рейс Г., Хюттен А.: ФМР исследование тонких плёнок сплавов Гейслера $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ и Co_2MnSi . ФММ **102**, № 4, 383–391 (2006)
145. Савостина Л.И., Аминова Р.М., Миронов В.Ф.: К вопросу о механизме реакции 2-метоксибензо[d]-1,3,2-диоксафосфорин-4-она с хлоралем на основе квантовохимических расчётов. II. Реакция Перкова. Журн. общей химии **76**, № 7, 1078–1087 (2006)
146. Салихов К.М.: Времяразрешённая ЭПР спектроскопия неравновесных спиновых систем, создаваемых в ходе спин-зависимых фотофизических и фотохимических процессов в конденсированных средах. УФН **176**, 664–669 (2006)
147. Сараев Д.В., Лунёв И.В., Васильева М.А., Гусев Ю.А., Юсупова Т.Н., Гончаров В.А.: Роль ванадия в формировании агрегативной структуры нефти. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 2, с. 178–181. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
148. Сафиуллин Г.М., Лобков В.С., Самарцев В.В., Салихов К.М., Леонтьев А.В.: Когерентное фемтосекундное эхо в полимерной плёнке, допированной молекулами красителя. Сб. тр. IV Междунар. конф. “Фундаментальные проблемы оптики-2006” (Беспалов В.Г., Козлов С.А., ред.), с. 181–183. Санкт-Петербург: ИД “Corvus” 2006.
149. Селиванова Н.М., Осипова В.В., Галяметдинов Ю.Г.: Роль иона лантаноида при мицеллообразовании и самоорганизации лиотропных жидкокристаллических систем. Журн. физ. химии **80**, № 4, 753–757 (2006)
150. Степанов А.Л., Маркуес С., Алвес Е., да Силва Р.С., Силва М.Р., Ганеев Р.А., Ряснянский А.И., Усманов Т.: Ионный синтез и анализ оптических свойств наночастиц золота в матрице Al_2O_3 . ЖТФ **76**, 80–87 (2006)
151. Трошина Ю.И., Хайбуллин Р.И., Базаров В.В., Гатиятов Р.Г., Лопатин О.Н., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Окрашивание кристаллов рутила путём имплантации ионов марганца, железа и кобальта. Учён. зап. КГУ. Сер. “Естественные науки”, т. 148, кн. 1, 71–81 (2006)
152. Туранова О.А., Галяметдинов Ю.Г.: Жидкокристаллические N-арилзамещённые β-аминовинилкетоны и их комплексы с лантаноидами. Журн. общей химии **76**, № 7, 1143–1148 (2006)
153. Туранова О.А., Туранов А.Н., Лапаев Д.В., Гнездилов О.И., Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г.: Первое производное β-дикетоната дифторида бора. Журн. общей химии **76**, № 5, 767–770 (2006)
154. Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Степанов А.Л., Хайбуллин И.Б.: Влияние имплантации ионов меди на оптические свойства и низкотемпературную проводимость углеродных плёнок. ФТП **40**, вып. 4, 419–425 (2006)
155. Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В., Хайбуллин И.Б.: Исследование динамики рекристаллизации кремния, имплантированного ионами фосфора, при быстром термическом отжиге. Тез. I Всерос. конф. “Физические и физико-химические основы ионной имплантации”. Нижний Новгород, 24–27 октября, с. 19–21. Нижний Новгород 2006.
156. Хасанов О.Х., Горбач Д.В., Петрушкин С.В., Самарцев В.В., Смирнова Т.В., Федотова О.М.: Солитоны

- в оптически плотных легированных кристаллах. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 540–543 (2006)
157. Черников С.К., Баскевич Т.П.: Анализ динамической реакции конструкции на вычислительных кластерах. Тр. Шестого Междунар. науч.-практ. семинара “Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах”. Санкт-Петербург, 12–17 декабря, с. 203–208. Нижний Новгород: ННГУ 2006.
 158. Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ашихмин А.Н.: Решение некоторых задач физики и механики на многопроцессорных системах с распределённой памятью. Тр. Шестого Междунар. науч.-практ. семинара “Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах”. Санкт-Петербург, 12–17 декабря, с. 209–214. Нижний Новгород: ННГУ 2006.
 159. Черников С.К., Файзуллин А.М.: Использование компьютерного моделирования при анализе пассивной безопасности автомобилей. Тр. XXI Междунар. конф. “Математическое моделирование в механике сплошных сред. Методы граничных и конечных элементов” “BEM&FEM-2005”. Санкт-Петербург, 4–7 октября, с. 506–512. Санкт-Петербург 2006.
 160. Шайдарова Л.Г., Челнокова И.А., Гедмина А.В., Будников Г.К., Зиганшина С.А., Можанова А.А., Бухараев А.А.: Электроокисление щавелевой кислоты на угольно-пастовом электроде с осаждёнными наночастицами палладия. Журн. аналит. химии **61**, № 4, 409–416 (2006)
 161. Шахмуратов Р.Н., Ребане А., Мегрэ П., Одюрс Дж.: Медленный свет в полимерной плёнке с узким спектральным провалом. Изв. РАН. Сер. физ. **70**, № 4, 477–479 (2006)
 162. Шкаликов А.В., Калашников Д.А., Калинин А.А., Самарцев В.В.: Использование лавинных фотодиодов для детектирования бифотонов. Сб. тр. конф. молодых учёных КФТИ КазНЦ РАН, Казань, 23 марта, с. 63–67. Казань: ЗАО “Новое знание” 2006.
 163. Шкаликов А.В., Калинин А.А., Калачёв А.А., Самарцев В.В.: К вопросу о распространении импульсов “малой” площади через оптически плотные среды. Сб. тр. X Междунар. молодёжной науч. школы “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия” (Салахов М.Х., Самарцев В.В., ред.), вып. 10, с. 181–184. Казань: ИЦ КГУ 2006.
 164. Эпштейн О.И., Штарк М.Б., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Гайнутдинова Т.Х., Силантьева Д.И.: Модулирующее действие совместного применения антител к белку S100 и его малых доз на мембранные эффекты хинина. Бюл. эксперим. биол. медицины **142**, № 7, 1–4 (2006)
 165. Юртаева С.В., Обычный А.А., Гнездилов О.И., Гайнутдинов Х.Л., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н.: ЭПР исследование образования оксида азота и других парамагнитных частиц при воздействии на сердечно-сосудистую систему. Сб. ст. “Структура и динамика молекулярных систем” (Шиховцева Е.С., Хатымов Р.В., Хазимуллин М.В. и др., ред.), вып. XIII, ч. 2, с. 469–472. Уфа: ИФМК УНЦ РАН 2006.
 166. Юртаева С.В., Яфарова Г.Г., Гайнутдинова Т.Х., Тимошенко А.Х., Обычный А.А., Гайнутдинов Х.Л.: Исследование методом ЭПР спектроскопии изменения содержания оксида азота в тканях виноградной улитки при выработке долговременной сенситизации. Материалы Междунар. симп. “Активные формы кислорода, азота и хлора в регуляции клеточных функций в норме и при патологии” (Степура И.И., Заводник И.Б., ред.), ч. 2, с. 194–197. Гродно: Гродн. гос. мед. ун-т 2006.

Защиты, награды, государственные стипендии

Защита диссертаций

В 2006 году кандидатские диссертации защитили следующие сотрудники:

1. Арсланов Наркис Мусавирович
Нанооптика ближнеполевой микроскопии: эффекты распространения светового поля в сужающемся субволновом зонде
01.04.05 “Оптика”
2. Исмаилова Асия Ильгизовна
Роль оксида азота и ионов кальция в механизмах долговременной сенситизации у виноградной улитки
03.00.13 “Физиология”

3. Латыпов Владислав Альбертович
Исследование примесных редкоземельных ионов в кристаллах типа перовскита и эльясолита методами ЭПР, ДЭЯР и оптической спектроскопии
01.04.11 “Физика магнитных явлений”
4. Муранова Людмила Николаевна
Влияние галоперидола на поведенческие реакции и электрические характеристики командных нейронов виноградной улитки
03.00.13 “Физиология”
5. Никифоров Виктор Геннадьевич
Исследование многоуровневых молекулярных систем с использованием метода регистрации сверхбыстро-

го оптического эффекта Керра и метода вращения спина мюона

01.04.17 “Химическая физика, в т.ч. физика горения и взрыва”

Научные стипендии

Именная стипендия Немецкого научного фонда им. Александра фон Гумбольдта для проведения научных исследований по теме “Нанооптика поверхностных плазмон-поляритонов” в Лазерном центре г. Ганновера (Германия) в 2006 году присуждена Степанову А.Л., к.ф.-м.н., с.н.с.

Награждения

Орденом “За заслуги перед Республикой Татарстан” награждён Салихов К.М., член-корр. РАН, директор института, за достойный вклад в развитие науки, активную научно-организационную, педагогическую и общественную деятельность.

Государственная премия РТ 2006 года в области науки и техники за цикл работ “Физика ван-флековских парамагнетиков” присуждена М. М. Зарипову, г.н.с. КФТИ им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН, в составе коллектива учёных Казанского государственного университета: С. А. Альтшулера (посмертно), М. А. Теплова (посмертно), М. С. Тагирова, Б. З. Малкина, Л. К. Аминова, Д. А. Тажурского, А. В. Егорова.

Почётной грамотой РАН и Профсоюза работников РАН за высокий уровень проводимых фундаментальных и прикладных научных исследований, успехи в подготовке научных кадров и в связи с 60-летием образования награждён Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского КазНЦ РАН.

Почётными грамотами РАН и Профсоюза работников РАН были отмечены:

Спиваковская А.Н., вед. библиотекарь
Мигачёв С.А., к.ф.-м.н., с.н.с.

Почётными грамотами Президиума КазНЦ РАН были отмечены:

Биктимиров Э.Ф., инженер
Закирова А.Х., контролёр КПП
Карсалова Н.А., вед. инженер
Садыков Н.Р., зав. отделом
Степанов А.Л., к.ф.-м.н., с.н.с.
Тарасов В.И., водитель
Хайбуллин Р.И., к.ф.-м.н., с.н.с.
Шакуров Г.С., к.ф.-м.н., с.н.с.

Благодарственные письма КФТИ вручены старейшим сотрудникам института:

Голенищеву-Кутузову В.А., д.ф.-м.н., г.н.с.
Зарипову М.М., д.ф.-м.н., г.н.с.
Короткову С.Ф., к.ф.-м.н., пенсионеру
Пироговой И.И., пенсионерке
Хлебниковой Т.А., пенсионерке
Яфаеву Н.Р., к.ф.-м.н., пенсионеру

Дипломами КФТИ отмечены:

Арсланов И.А., н.с.
Ахмин С.М., к.ф.-м.н., зам. гл. редактора
Баязитов Р.М., д.ф.-м.н., зав. лабораторией
Воронкова В.К., к.ф.-м.н., учён. секретарь
Гайнутдинов Х.Л., д.б.н., зав. лабораторией
Галяметдинов Ю.Г., д.х.н., г.н.с.
Гарифьянов Н.Н., к.ф.-м.н., с.н.с.
Гнездилов И.Д., мастер
Губайдуллин Ф.Ф., к.ф.-м.н., с.н.с.
Губайдуллина А.З., документовед
Иванова Т.А., к.ф.-м.н., с.н.с.
Калачёв А.А., к.ф.-м.н., с.н.с.
Карташёва Н.А., вед. инженер
Коновалов Д.А., гл. спец.
Куковицкий Е.Ф., с.н.с.
Куприянова О.О., нач. АХО
Курбатова Н.В., н.с.
Лисин В.Н., к.ф.-м.н., с.н.с.
Лобков В.С., к.ф.-м.н., с.н.с.
Львов С.Г., н.с.
Мосина Л.В., к.ф.-м.н., зам. гл. редактора
Мусин В.М., к.ф.-м.н., зав. отделом
Осокин С.И., к.ф.-м.н., вед. инженер
Осин Ю.Н., н.с.
Сулейманов Н.М., д.ф.-м.н., в.н.с.
Таланов Ю.И., д.ф.-м.н., в.н.с.
Туриянский Е.А., гл. спец.
Уланов В.А., д.ф.-м.н., с.н.с.
Файзрахманов И.А., д.ф.-м.н., в.н.с.
Фаттахов Я.В., к.ф.-м.н., зав. отделом и зав. лабораторией
Черников С.К., к.т.н., зав. лабораторией
Шакирзянов М.М., д.ф.-м.н., зав. лабораторией
Шакуров Г.С., к.ф.-м.н., с.н.с.
Шегеда А.М., к.ф.-м.н., с.н.с.
Шустов В.А., н.с.

Дипломом победителя II республиканского конкурса “50 лучших инновационных идей Республики Татарстан” за лучшую инновационную идею “Создание малотоннажного производства механоактивированной лекарственной формы кальция глюконата (МАКГ) для высокоэффективного лечения заболеваний, обусловленных нарушением кальциевого обмена в организме” награждён Ю. В. Петухов, д.ф.-м.н., зав. лабораторией.

Дипломом победителя Программы инновационных проектов “Идея-1000” в номинации Программы “Молодёжный инновационный проект” за работу “Разработка магнитной системы с индукцией поля 0.20 Тл для использования в специализированном травматологическом магнитно-резонансном томографе” награждён Э. Ф. Биктимиров, аспирант.

Дипломами участников II республиканского конкурса “50 лучших инновационных идей Республики Татарстан” награждены Р. М. Баязитов, д.ф.-м.н., зав. лабораторией; А. А. Бухараев, д.ф.-м.н., зав. лабораторией; С. А. Зиганшина, к.х.н., и.о. с.н.с.; А. А. Коновалов, н.с.; И. А. Файзрахманов, д.ф.-м.н., в.н.с.

Участие сотрудников института в преподавательской деятельности

В 2006 году сотрудники КФТИ, помимо основной научно-исследовательской работы, занимались преподавательской деятельностью в различных вузах г. Казани, где читали следующие учебные курсы:

Ашихмин А.Н., ст. преп. каф. “Автомобили и автомобильное хозяйство” КГТУ (КАИ)

- Теория автомобиля
- Надёжность автомобилей

Богданова Х.Г., проф. каф. промышленной электроники КГЭУ

- Информационно-измерительная техника и электроника
- Цифровая электроника
- Физика диэлектриков, металлов и полупроводников

Богомолов В.А., ст. преп. каф. информатики и прикладной математики КГТУ (КХТИ)

- Интернет-технологии
- Операционные системы

Бухараев А.А., преп. каф. хим. физики КГУ

- Атомы и молекулы на поверхности
- проф. каф. оптики и нанофотоники КГУ
- Микроскопия микро- и наноструктур

Вишневская Г.П., проф. каф. хим. физики КГУ

- Строение и молекулярная динамика конденсированных сред
- ЭПР в растворах

Гайнутдинов Х.Л., преп. каф. хим. физики КГУ

- Избранные физические вопросы молекулярной биологии
- проф. каф. анатомии, физиологии и охраны здоровья человека ТГГПУ
- Механизмы памяти
- Психофизиология

Гайнутдинова Т.Х., ассист. каф. физиологии человека и животных КГУ

- Анатомия человека
- Физиология человека

Галеев Р.Т., преп. каф. хим. физики КГУ

- Mathematica для решения задач спиновой химии
- Ерёмина Р.М., доц. каф. общей физики КГУ
- Актуальные вопросы магнитного резонанса
 - Электричество и магнетизм

Зарипов М.М., проф. каф. квантовой электроники и радиоспектроскопии КГУ

- Теория спектров электронного парамагнитного резонанса в кристаллах

Калачёв А.А., ассист. каф. оптики и нанофотоники КГУ

- Квантовая оптика
- Новые физические методы оптической обработки информации
- Оптические квантовые генераторы

Манапов Р.А., доц. каф. техн. физики КГТУ (КАИ)

- Физика и диагностика поверхности
- Твёрдотельная электроника

Моисеев С.А., доц. каф. хим. физики КГУ

- Оптическая молекулярная спектроскопия
- Современные проблемы квантовой оптики

Мурсалимов А.Р., преп. каф. хим. физики КГУ

- Численные методы в физике

Петрушкин С.В., преп. каф. оптики и нанофотоники КГУ

- Основы теории лазерного охлаждения газов и твёрдых тел

Петухов В.Ю., проф. каф. физики твёрдого тела КГУ

- Радиационная физика твёрдого тела
- Радиационная физика
- Современные методы экспериментальной физики
- Радиационная физика в медицине
- Физика поверхности и тонких плёнок

Рамеев Б.З., доц. каф. физики Института технологии г. Гебзе, Турция

- Ферромагнитный резонанс

Садчиков Ю.В., доц. каф. “Автомобили и автомобильное хозяйство” КГТУ (КАИ)

- Автомобили. Конструирование и расчёт

Салихов К.М., проф. каф. хим. физики КГУ

- Химическая кинетика и катализ
- Современные проблемы химической физики
- Избранные проблемы магнитного резонанса

Самарцев В.В., проф. кафедры оптики и нанофотоники КГУ

- Проблемы когерентной оптики
- Лазерная спектроскопия
- Новые физические методы оптической обработки информации
- Оптика фемтосекундных лазеров

Соловаров Н.К., доц. каф. общей физики ТГГПУ

- Общая физика
- Элементы квантовой электродинамики
- доц. каф. квантовой электроники и магнитной радио-спектроскопии КГУ
- Современные проблемы квантовой оптики

Сулейманов Н.М., проф. каф. “Электрические станции” КГЭУ

- Нетрадиционные и возобновляемые источники энергии
- Новые методы преобразования энергии – водородные топливные элементы

Тарасов В.Ф., проф. каф. пром. электроники КГЭУ

- Информационно-измерительная техника и электроника

– Физические основы электроники

– Физика сверхпроводимости

Туранов А.Н., ст. преподаватель каф. электрических сетей и систем КГЭУ

- Основы производства передачи электроэнергии
- Электромагнитная совместимость в энергетике

Туранова О.А., ст. преподаватель каф. электрических сетей и систем КГЭУ

- Применение ЭВМ в электроэнергетике

Фалин М.Л., доц. каф. общей и эксперим. физики ТГГПУ

- Электричество
- Молекулярная физика
- Механика
- Оптика

Черников С.К., проф. каф. проектирования летательных аппаратов КГТУ (КАИ)

- Теория автомобиля

Шакуров Г.С., ст. преп. каф. электропривода и автоматизации промышленных установок и технологических комплексов КГЭУ

- Элементы автоматизированного электропривода
- Элементы систем автоматики

Конференции, организованные КФТИ и при участии КФТИ

1. International Workshop “Modern Development of Magnetic Resonance”, September 27–29, 2006, Kazan
2. X Международная молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”, 24–26 октября 2006, Казань (совместно с Казанским государственным университетом)
3. X International Youth Scientific School “Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application”, October 31–November 3, 2006, Kazan (совместно с Казанским государственным университетом)
4. International Symposium “Modern Problems of Chemical Physics”, October 31–November 4, 2006, Kazan
5. Итоговая научная конференция КазНЦ РАН, 12–13 февраля 2007, Казань (стендовая сессия проводилась 4–5 декабря 2006 года при обсуждении итогов 2006 года)
6. Конференция молодых учёных КФТИ, 19 марта 2007, Казань

Программы конференций, организованных институтом

International Workshop “Modern Development of Magnetic Resonance”

September 27, 2006

First session

Chair: Khaibullin I.B.

Thomas D.D.: Lipid Nanotube Structural Dynamics of Spin-labeled Muscle Proteins

Krushelnitsky A.G.: Complex NMR Approaches to Studying Conformational Dynamics of Biopolymers

Second session

Chair: Samartsev V.V.

Nesmelov Yu.E.: Myosin Structural Dynamics Revealed by Site-Directed Spin Labeling and Multifrequency EPR

Ulanov V.A., Zaripov M.M., Varlamov A.G.: Jahn-Teller Copper Trimers in BaF₂ Crystals: Molecular Motion Controlled by Magnetic Field, Antisymmetric Exchange and Temperature

Third session

Chair: Aminov L.K.

Ohta H.: High-Frequency and High-Field ESR Studies of Novel Quantum Spin Systems

Kononov A.A., Tarasov V.F.: Peculiarities of Low-Field Tunable High-Frequency EPR Spectroscopy

Reijerse E.J., Schmidt P., Klihm G., Lubitz W.: A Novel High-Frequency CW/Pulsed EPR Spectrometer Operating at 122 and 244 GHz

September 28, 2006

Fourth session

Chair: Ovchinnikov I.V.

Rakhmatullin R.M.: Rare-Earth Clusters in SiO₂ and GeO₂ Glasses. Study by the EPR SpectroscopyEremina R.M., Mukovskii Ya.M., Krug von Nidda H.-A., Loidl A.: Observation of a Phase Separation in La_{1-x}Ba_xMnO₃ by ESR*Fifth session*

Chair: Ilyasov A.V.

Schmidt J.: High-Frequency EPR and ENDOR Spectroscopy on Semiconductor Nanoparticles

Sixth session

Chair: Moiseev S.A.

Kandrashkin Yu.E., Asano M.S., van der Est A.: Light-Induced Electron Spin Polarization of the Excited Quartet State in Vanadyl Octaethylporphyrin

Mursalimov A.R., Chernikov S.K., Sadchikov Yu.V., Salikhov K.M.: Monte-Carlo Simulation of the EPR Spectra of Charge-Separated States in Photosynthetic Reaction Centers

Hanson G.R.: Insights from Multifrequency EPR, Computer Simulation (Molecular Sophe) and DFT Calculations into the Geometric and Electronic Structure of Molybdoenzymes

Seventh session

Chair: Salikhov K.M.

Lecture of the Zavoisky Awardee 2006

Schmidt J.: Four Decades in the Footsteps of the Pioneers in Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy

International Symposium "Modern Problems of Chemical Physics"

November 1, 2006

Chair: Zhidomirov G.M.

Plenary Lectures

Spiess H.-W.: Magnetic Resonance, a Powerful Tool for Studying Supramolecular Systems

Dzuba S.A.: Supramolecular Structure and Dynamics of Spin-Labeled Biomembrane-Peptide Systems

Plenary Talk

Orlinskiy S.B.: From Monocrystal to Nanocrystal ZnO by High-Frequency EPR/ENDOR

Chair: Stehlik D.

Plenary Lectures

Atsarkin V.A., Demidov V.V., Noginova N.E.: Electron Spin Resonance and Relaxation in Nanoparticles: Between Para- and Ferromagnetism

Buntkowsky G.: NMR Spectroscopy on the Mesoscopic Length Scale

Chair: Teitelbaum G.B.

*Plenary Lecture*Bowman M.: The Semiquinone Intermediate in Ubiquinol Oxidation by Cytochrome bc₁*Plenary Talks*

Garifullin I.A.: The Superconductor/Ferromagnet Proximity Effect and Its Potential Application in Spintronics

Bagryanskaya E.G.: Phase Transitions and Exchange Interaction in Molecular Magnetics Studied by EPR

Chair: Malkin B.Z.

*Plenary Talk*Rakhmatullin R.M.: Rare-Earth Clusters in SiO₂ and GeO₂ Glasses. Study by the EPR Spectroscopy*Oral Talks*

Marque S.: Persilylated Phosphoranyl Radicals: the First Persistent Phosphoranyl Radicals. An EPR Study

Galeev R.T., Voronkova V.K.: EPR of Clusters Containing Non-Kramers Ions

November 2, 2006

Chair: Eichhoff U.

Plenary Lecture

Stehlik D.: Control of Function in Photosynthetic Reaction Centers by Electron Acceptor-Protein Interactions as Studied by Transient EPR Spectroscopy

Plenary Talks

Stass D.V., Kalneus E.V., Molin Yu.N.: Effect of Low Magnetic Fields and MARY Spectroscopy

Purtov P.A.: Spin Catalysis Theory

Chair: Dzuba S.A.

Plenary Lecture

Vieth H.-M.: Dynamic Polarization and Relaxation in Systems of Coupled Nuclear Spins

Plenary Talks

Salikhov K.M., Golbeck J.H., Stehlik D.: Quantum Teleportation across a Biological Membrane by means of Correlated Spin Pair Dynamics in Photosynthetic Reaction Centers

Maryasov A.G.: Dipole-Dipole Interactions of High-Spin Paramagnetic Centers in Disordered Systems

Oral Talk

Mambetov A.E., Brennerman M.H., Salikhov K.M.: Calculations of Rate Constants of Electron Spin Polarisation of Triplet Excitons in Molecular Crystals due to Triplet-Triplet Annihilation

Plenary Lecture

Möbius K.: Combining Light, Microwaves and Magnetic Fields to Reveal Electron-Transfer Characteristics in Photosynthesis by High-Field EPR

Chair: Ovchinnikov I.V.

Plenary Lecture

Lubitz W.: Spectroscopic Investigations to Elucidate the Function of Hydrogenase: Basis for a Biological Hydrogen Production

Plenary Talks

Leshina T.V.: Spin Chemistry Application to Modelling of Ligand-Receptor Interaction

Kruppa A.I.: Investigation of Guest-Host Complexes of Beta-Cyclodextrin by Spin Chemistry

Chair: Bukharaev A.A.

Plenary Lecture

Van der Est A.: Electron Spin Polarization in Coupled Spin Systems

Oral Talks

Gorelik V.R.: CIDEP in Micellized Radical Pairs in the Presence of Stable Nitroxide Radicals

Shakirov S.R.: CIDNP of Micellized Radical Pairs and Short-Lived Biradicals in Presence of Stable Nitroxides

Bercu V.: Signatures of the Fast Dynamics on the Reorientation of Molecular Guests in Glassy Polystyrene, a High-Field Electron Paramagnetic Resonance Study

November 3, 2006

Chair: Khaibullin I.B.

Plenary Talks

Eichhoff U.: Recent Life Science Applications of NMR and EPR

Eremin M.V., Aleev A., Eremin I.M.: On Interplay between the Magnetic Susceptibilities of Localized and Itinerant Electrons in HTSCs

Tarasov V.F., Konovalov A.A.: Tunable High-Frequency Low-Field EPR Spectroscopy of EPR-Silent Ions

Oral Talks

Tseytlin M.P., Dhami A., Eaton S.S., Eaton G.R.: Comparison of Maximum Entropy Methods to Reconstruct EPR Images from Rapid Scan Spectra

Gatiatov R.G., Borodin P.A., Bukharaev A.A., Biziaev D.A., Gumarov G.G.: Atomic and Magnetic Force Microscopy of Nanostructures Obtained by Laser and Ion Etching

Chair: Tagirov M.S.

Plenary Talks

Fatkullin N., Kimmich R., Kehr M.: Intermolecular Contribution into Spin-Lattice Relaxation Rate and Relative Intermolecular Displacements in Polymer Systems

Malkin B.Z., Graf M., Lascialfari A., Borsa F., Barbara B., Vanyunin M.V.: Experimental and Theoretical Studies of ^{19}F Nuclear Relaxation in $\text{LiYF}_4\cdot\text{Ho}^{3+}$ Single Crystals

Moiseev S.A., Simon C., Gisin N.: Photon Echo Quantum Memory for Arbitrary Light Pulses and Quantum Manipulations of Time-Qubit States

Oral Talks

Lijewski S.: Electron Spin Relaxation in Fluorite Type Crystals

Kandrashkin Yu.E.: "Spin Algebra" Package for General Analysis of Magnetic Resonance Problems in "Mathematica"

Savostina L.I., Aminova R.M.: Quantum-Mechanical Calculations of Dynamic Processes in the Bimolecular Reactions Including Phosphorus Atom

Итоговая научная конференция КазНЦ РАН

Пленарное заседание

Моисеев С.А.: Квантовая память на фотонном эхо

Секция физическая

Стендовая сессия

4–5 декабря 2006 года

Сессия 1

Галеев Р.Т., Воронкова В.К.: Ферромагнитное взаимодействие Cu-Tb в пятиядерном кластере $[\text{Cu}_3\text{Tb}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Зарипов Р.Б., Салихов К.М. (КФТИ), Кулик Л.В., Дзюба С.А. (ИХКГ СО РАН, Новосибирск): Изучение диполь-дипольного взаимодействия в нитроксильном радикале методом ESEEM

Зинкевич Т.А., Гнездилов О.И. (КФТИ), Крушельницкий А.Г. (КИББ): ЯМР исследования молекулярной динамики α -кристаллина

Июдин В.С., Обычный А.А., Салихов К.М.: Установление влияния кислорода на поляризацию электронных спинов гематопорфирина IX методом ЭПР

Июдин В.С., Обычный А.А., Салихов К.М.: Исследование фотодинамических реакций методами ЭПР и оптической спектроскопии

Кувшинова Н.В., Июдин В.С., Зарипов Р.Б., Обычный А.А., Салихов К.М.: Исследование электронной спиновой поляризации порфиринов с разным замещением в макроцикле методом ЭПР

- Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А. (КФТИ), Джабаров В.И. (КГТУ), Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г. (КФТИ): Влияние температуры на эффективность переноса энергии в жидкокристаллическом комплексе европия
- Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А., Лобков В.С., Салихов К.М., Галяметдинов Ю.Г.: Внутримолекулярный перенос энергии в мезогенном аддукте европия(III)
- Лобков В.С., Галявиев И.Г., Сафиуллин Г.М., Салихов К.М., Шмелёв А.Г.: Многофункциональный оптический спектрометр с наносекундным временным разрешением
- Лобков В.С., Самарцев В.В., Сафиуллин Г.М., Салихов К.М., Леонтьев А.В., Шмелёв А.Г.: Когерентное фемтосекундное фотонное эхо в полимерной плёнке, допированной молекулами красителя
- Мамбетов А.Е., Бренерман М.Х., Салихов К.М.: Расчёт эффективности поляризации электронных спинов триплетных экситонов в молекулярных кристаллах, вызванной триплет-триплетной аннигиляцией
- Мингалиева Л.В., Суханов А.А., Галеев Р.Т., Воронкова В.К.: Первый пример исследования методом ЭПР гетероядерного кластера Cu-Gd
- Моисеев С.А.: Квантовая память на фотонном эхо
- Моисеев С.А.: Квантовые манипуляции двухцветными световыми полями: квантовая конверсия длины волн света
- Моисеев С.А., Арсланов Н.М.: Эффекты интерференции, взаимодействия и распространения световых полей в зонде ближнеполевой оптической микроскопии
- Мурсалимов А.Р., Черников С.К., Садчиков Ю.В., Салихов К.М.: Применение метода Монте-Карло в симуляции спектров ЭПР радикальных пар в реакционном центре фотосистемы 1
- Никифоров В.Г., Лобков В.С.: Исследование вращательной динамики молекул в жидкости в субпикосекундном диапазоне
- Савостина Л.И., Аминова Р.М.: Изучение различных механизмов реакций фосфорсодержащих соединений с молекулами растворителя на основе метода квантовой химии
- Салихов К.М.: Квантовая телепортация через биологические мембраны с помощью спин-коррелированных пар в реакционном центре фотосинтеза
- Цейтлин М.П.: Сравнение методов максимальной энтропии для реконструкции ЭПР изображений из спектров быстрого прохождения
- Андрианов В.В., Гайнутдинова Т.Х., Муранова Л.Н., Силантьева Д.И., Тагирова Р.Р., Гайнутдинов Х.Л.: Реактивация долговременной памяти у виноградной улитки после напоминания. Роль ионов кальция в процессах формирования долговременной сенситизации, как экспериментальной модели патологии
- Гайнутдинов Х.Л., Обычный А.А., Юртаева С.В., Яфарова Г.Г., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н.: ЭПР

исследования образования оксида азота и других парамагнитных частиц при воздействии на сердечно-сосудистую и нервную системы

Сессия 2

- Герасимов К.И., Латыпов В.А., Фалин М.Л.: Магнитный резонанс и оптическая спектроскопия $\text{CsCaF}_3:\text{Yb}^{3+}$. Перовскит и наноструктурные комплексы флюорита
- Герасимов К.И., Латыпов В.А., Фалин М.Л.: Магнито-оптическая спектроскопия парамагнитных центров кубической симметрии Yb^{3+} в кристаллах структурного ряда флюорита
- Ерёмина Р.М., Гаврилова Т.П.: Анизотропные обменные взаимодействия в CuTe_2O_5
- Ерёмина Р.М., Яцык И.В.: Электронный парамагнитный резонанс кристаллов $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$, $\text{M} = \text{Ca}, \text{Ba}$
- Житейцев Е.Р., Уланов В.А., Зарипов М.М.: Структура и магнитные свойства центров Fe^{3+} в кристаллах SrF_2 и BaF_2
- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия Tm^{3+} и Tb^{3+} в синтетическом форстерите
- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Примесные центры хрома в форстерите, легированном хромом и литием
- Шакуров Г.С.: ЭПР Cr^{4+} в LiScGeO_4
- Вишневская Г.П., Фролова Е.Н. (КФТИ), Константинов В.Н. (КГЭУ), Фахрутдинов А.Р. (КФТИ): Состояние ионов Gd^{3+} в сульфо- и сульфифенолсодержащих ионообменных полимерах по данным ЭПР
- Гончаров В.А.: Оптимизация алгоритма обработки сигналов ВДС спектрометра для корректного расчёта диэлектрических спектров
- Домрачева Н.Е.: Магнитные свойства жидкокристаллических дендримерных комплексов меди: ЭПР исследование
- Иванова Т.А., Овчинников И.В., Туранов А.Н.: Влияние внешнесферного аниона на свойства спинового перехода в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{X}$, $\text{X} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$
- Туранова О.А., Галяметдинов Ю.Г.: Новые жидкокристаллические соединения
- Юртаева С.В., Обычный А.А., Гайнутдинов Х.Л., Яфарова Г.Г., Муранова Л.Н.: Применение метода ЭПР для исследования образования NO-содержащих парамагнитных комплексов в биологических тканях при внешних воздействиях на сердечно-сосудистую и нервную системы
- Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Мамин Р.Ф., Потапов А.А.: Высокочастотные ультразвуковые исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.125$)

Сессия 3

- Альтшулер Т.С. (КФТИ), Бреслер М.С. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург), Горюнов Ю.В. (КФТИ): Ферромагнитное упорядочение примеси железа в полупроводнике с переменной валентностью SmB_6
- Бадрутдинов А.О., Зарубежнова Е. (КГУ), Таланов Ю.И. (КФТИ), Якоб Г. (Университет Майнца, Германия), Тейтельбаум Г.Б. (КФТИ): Локальные свойства микроскопического фазового расслоения в монокристаллических плёнках $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$
- Гарифуллин И.А., Гарифьянов Н.Н., Салихов Р.И.: Структура границ раздела в многослойных тонкоплёночных металлических гетероструктурах
- Горьков Л.П. (ИТФ им. Л. Д. Ландау, Москва), Тейтельбаум Г.Б. (КФТИ): Роль носителей тока различной природы в формировании транспортных свойств купратов
- Мамин Р.Ф. (КФТИ), Угами Т., Мартон Т. (Университет Теннесси, Ноксвилл, США), Мигачёв С.А. (КФТИ): Гигантская диэлектрическая проницаемость и эффект колоссального магнетосопротивления в высокопроводящих манганитах
- Таланов Ю.И., Бухараев А.Н., Валидов А.А., Гумаров Г.Г., Панарина Н.Ю., Петухов В.Ю., Хасанов Р.И.: Влияние низкоэнергетического облучения на пиннинг в тонких плёнках ВТСП
- Тогулев П.Н., Сулейманов Н.М. (КФТИ), Цондер К. (Институт им. П. Шеррера, Виллиген, Швейцария): Исследование эффектов пиннинга в сверхпроводящих композитах на основе диборида магния
- Власова Д.Д.: Ассоциативная выборка информации в оптической памяти на основе фотонного эха с использованием кодов Фрэнка
- Калачёв А.А.: Коherentный контроль коллективного спонтанного излучения и квантовая оптическая память
- Каримуллин К.Р., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Спектроскопическое исследование перспективных носителей оптической информации
- Лисин В.Н., Самарцев В.В., Шегеда А.М., Зуйков В.А.: Фотонное эхо в $\text{LiLuF}_4:\text{Er}^{3+}$ в слабых магнитных полях
- Петрушкин С.В.: Квантовая теория радиационно-сбалансированного лазера
- Шкаликов А.В.: Оптическая бифотонная спектроскопия
- Захаров М.В., Фаттахов Я.В., Галаяутдинов М.Ф., Хайбуллин И.Б.: Исследование динамики рекристаллизации кремния, имплантированного ионами фосфора, при импульсном световом облучении
- Черников С.К., Файзуллин А.М.: Анализ динамической реакции конструкции на вычислительных кластерах
- Черников С.К. (КФТИ), Хамзин А.Г. (КГТУ им. А. Н. Туполева): Анализ случайных процессов

Сессия 4

- Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Прецизионные измерения магнитострикции в никелевых структурах, используемых для получения магниторезистивных наноконтактов
- Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Гумаров Г.Г., Галаяутдинов М.Ф.: Исследование возможности формирования наноразмерных перемычек посредством ионно-лучевого травления
- Зиганшина С.А., Чукланов А.П., Бухараев А.А.: Атомно-силовая микроскопия композитных электродов с каталитическими свойствами
- Куковицкий Е.Ф., Львов С.Г., Саинов Н.А.: Каталитический рост углеродных нанотрубок в условиях микро-реактора
- Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П. (КФТИ), Ивойлов Н.Г., Дулов Е.Н. (КГУ): Анизотропия тонких плёнок силицидов железа, синтезированных в магнитном поле
- Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П., Обычный А.А. (КФТИ), Коныгин Г.Н., Самородов И.В., Даминов А.Р. (ФТИ УрО РАН, Ижевск): ЭПР и ЯМР исследования механоактивированного глюконата кальция
- Баязитов Р.М.: Исследование процессов фото- и термо-возбуждения при импульсном лазерном отжиге имплантированных слоёв кремния
- Гатиятова Ю.И., Хайбуллин Р.И.: Исследование магнитных свойств корунда (Al_2O_3), имплантированного ионами кобальта
- Рамеев Б.З.: Магнитные свойства тонких плёнок полуметаллических ферромагнетиков
- Степанов А.Л.: Исследование нелинейного оптического отклика металлических наночастиц при пикосекундном лазерном воздействии: 1. Нелинейная рефракция наночастиц золота в оксиде цинка при облучении пикосекундным лазером на длине волны 532 нм; 2. Нелинейное поглощение наночастиц меди в оксиде кремния при облучении пикосекундным лазером на длине волны 532 нм
- Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Хайбуллин И.Б.: Влияние имплантации ионов меди на оптические свойства и низкотемпературную проводимость углеродных плёнок
- Хайбуллин Р.И. (КФТИ), Тагиров Л.Р. (КГУ): К вопросу о природе явления анизотропного ферромагнетизма в рутиле (TiO_2), имплантированном ионами кобальта: наблюдение спиновой поляризации кислорода в ферромагнитных образцах TiO_2 , имплантированных ионами кобальта; влияние режимов имплантации ионов кобальта на структурные и магнитные свойства рутила (TiO_2)

Устная сессия

Секционные заседания

12 февраля 2007 года

Заседание 1

Председатель: Овчинников И.В.

Житейцев Е.Р., Уланов В.А., Зарипов М.М.: ЭПР парамагнитных продуктов реакций между точечными дефектами во флюоритах, активированных ионами железа

Уланов В.А., Зарипов М.М., Варламов А.Г., Фазлижанов И.И., Ерёмина Р.М.: Аномалии в магнитных свойствах кристаллов $\text{BaF}_2:\text{Cu}$

Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Мингалиева Л.В.: Ферромагнитное взаимодействие Cu-Tb в пятиядерном кластере $[\text{Cu}_3\text{Tb}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_{12}(\text{H}_2\text{O})_8] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Высокочастотная ЭПР спектроскопия Tm^{3+} и Tb^{3+} в синтетическом фториде

Ерёмина Р.М., Яцык И.В. (КФТИ), Муковский Я.М., Круг фон Нидда Х.А., Лойдл А. (Университет г. Аугсбурга, Германия): Определение области существования ферромагнитных нанообразований в $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$, $\text{M} = \text{Ca}, \text{Ba}$

Альтшуллер Т.С. (КФТИ), Бреслер М.С. (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург), Горюнов Ю.В. (КФТИ): Ферромагнитное упорядочение примеси железа в полупроводнике с переменной валентностью SmB_6

Заседание 2

Председатель: Тарасов В.Ф.

Вишневская Г.П., Фролова Е.Н. (КФТИ), Константинов В.Н. (КГЭУ), Фахрутдинов А.Р. (КФТИ): Состояние ионов Gd^{3+} в сульфо- и сульфифенолсодержащих ионообменных полимерах по данным ЭПР

Домрачева Н.Е. (КФТИ), Миреа А., Швёер М., Торре-Лоренте Л., Латтерманн Г. (Университет г. Байройта, Германия): Магнитные свойства жидкокристаллических дендримерных комплексов меди: ЭПР исследование

Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Мамин Р.Ф., Потапов А.А.: Высокочастотные ультразвуковые исследования структурного фазового перехода в монокристалле $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.125$)

Лисин В.Н., Самарцев В.В., Шегеда А.М., Зуйков В.А.: Фотонное эхо в $\text{LiLuF}_4:\text{Er}^{3+}$ в слабых магнитных полях

Моисеев С.А., Арсланов Н.М.: Эффекты интерференции, взаимодействия и распространения световых полей в зонде ближнеполевой оптической микроскопии

13 февраля 2007 года

Заседание 3

Председатель: Самарцев В.В.

Никифоров В.Г., Лобков В.С.: Исследование вращательной динамики молекул в жидкости в субпикосекундном диапазоне

Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А., Лобков В.С., Салихов К.М., Галяметдинов Ю.Г.: Внутримолекулярный перенос энергии в мезогенном аддукте европия(III)

Зиганшина С.А., Чукланов А.П., Бухараев А.А.: Атомно-силовая микроскопия композитных электродов с каталитическими свойствами

Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П. (КФТИ), Ивойлов Н.Г., Дулов Е.Н. (КГУ): Анизотропия тонких плёнок силицидов железа, синтезированных в магнитном поле

Баязитов Р.М.: Исследование процессов фото- и термовозбуждения при импульсном лазерном отжиге имплантированных слоёв кремния

Хайбуллин Р.И. (КФТИ), Тагиров Л.Р. (КГУ), Актоган Н., Нефедов А., Цабель Х. (Рурский университет, Германия): Наблюдение спиновой поляризации кислорода в ферромагнитных образцах рутила (TiO_2)

Конференция молодых учёных 2006

19 марта 2007 года

Председатель: Валидов А.А.

Хамзин А.Г.: К анализу колебаний автомобиля при действии случайных нагрузок

Калашников Д.А., Калинин А.А., Шкаликов А.В., Самарцев В.В.: Эффект поляризационной интерференции бифотонов при спонтанном параметрическом рассеянии света II-го типа в кристалле ВВО

Файзуллин А.М., Мирхазов Р.Р.: Компьютерное моделирование испытаний антропоморфного манекена

Чушников А.И., Ибрагимова М.И., Жеглов Е.П.: Влияние процессов размораживания на спектр ЭПР образцов крови и её плазмы

Чушников А.И., Ибрагимова М.И., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П.: Исследование патологических изменений в организме доноров по анализу спектров ЭПР крови

Бариев И.И., Ибрагимова М.И., Жеглов Е.П.: Исследование методом ЭПР особенностей протекания острой лучевой болезни при γ -облучении с малой мощностью дозы

Панарина Н.Ю., Бухараев А.Н., Таланов Ю.И., Петухов В.Ю., Гумаров Г.Г., Валидов А.А.: Критический ток и линия необратимости тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, облучённых ионами Co и Fe с энергией 40 кэВ

Городничева Е.С., Невзорова Т.А., Коновалова О.А.: Визуализация биомакромолекул методом атомно-силовой микроскопии

Ириняков Е.Н., Леушин А.М.: Вычисление параметров нелинейной теории конфигурационного взаимодействия для ионов элементов переходных групп

Участие сотрудников института в конференциях

Международные конференции

36 Winter Symposium on the Physics of Quantum Electronics, January 2–7, 2006, Snowbird, USA

Odeurs J., Gheysen S., Vyvey K., Shakhmuratov R.N.: Change of polarization and delayed gamma radiation using nuclear level mixing induced transparency (invited)

Seminar of Laser Center Hannover, January 20, 2006, Hannover, Germany

Stepanov A.L.: Fabrication of metal nanoparticles in dielectrics by low energy ion implantation and laser annealing (invited)

XIII Международное совещание и VI школа по эволюционной физиологии, 23–28 января 2006, Санкт-Петербург, Россия

Андрианов В.В., Силантьева Д.И., Гайнутдинова Т.Х., Гайнутдинов Х.Л.: Применение блокаторов ионных каналов на фоне увеличения внутриклеточного кальция у обученных улиток (стенд.)

Каримов Ф.К., Гайнутдинов Х.Л., Ситдииков Ф.Г.: Влияние пороговой и сверхпороговой стимуляции блуждающих нервов на показатели деятельности сердца крыс и изменение количества оксида азота при десимпатизации (стенд.)

Силантьева Д.И., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Штарк М.Б., Эпштейн О.И.: Влияние антител к белку S100 на ионные каналы идентифицированных нейронов виноградной улитки (стенд.)

Тагирова Р.Р., Гайнутдинова Т.Х.: Эффекты форсколина, IBMX, 8-BR-цАМФ на электрические характеристики командных нейронов обученных улиток (стенд.)

Paul Scherrer Institute MuSR Users Meeting, January 25–27, 2006, Villigen, Switzerland

Suleimanov N.M.: Muon spin proving of methanol (ethanol) decomposition on carbon supported catalysts (oral)

International Seminar “Molecular Design and Supramolecular Architecture of Nanomaterials”, January 29–February 5, 2006, Florence, Italy

Domracheva N., Mirea A., Schwörer M., Lattermann G., Torre-Lorente L.: Magnetic properties of Cu(II) and Fe(III) dendromesogenic complexes: an EPR study (oral)

Torre-Lorente L., Gruzdev M., Lattermann G., Domracheva N., Mirea A., Schwörer M., Usol'tseva N.: Liquid crystalline complexes and nanocomposites of copper and iron with PPI dendrimer derivatives (oral)

XXX Международная зимняя школа по ядерной физике Санкт-Петербургского института ядерной физики РАН, 15–19 февраля 2006, Гатчина, Россия

Suleimanov N.M.: What can μ -SR do for fuel cells? (invited)

XXI Международная конференция “Уравнения состояния вещества”, 1–6 марта 2006, пос. Эльбрус, Кабардино-Балкарская республика, Россия

Баталов Р.И., Нурутдинов Р.М., Баязитов Р.М., Крыжков Д.И., Шмагин В.Б., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И., Дези И., Котай Э.: Микроструктура и ИК люминесценция гетероструктур дисилицид железа/кремний, синтезированных импульсными ионными и лазерными пучками (стенд.)

Баязитов Р.М.: Процессы фото- и термовозбуждения полупроводников при импульсных лазерных обработках тонкоплёночных покрытий (стенд.)

Ивлев Г.Д., Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Гацкевич Е.И.: Динамика полного внутреннего отражения ИК излучения при лазерном отжиге имплантированного кремния (стенд.)

American Physical Society March Meeting (APS March Meeting 2006), March 13–17, 2006, Baltimore, USA

Gor'kov L.P. and Teitel'baum G.B.: On electron-hole symmetry and phase separation in some electron doped (oral)

Marton Z., Egami T., Mamin R.F.: Charge separation and pre-percolation regime in manganites (oral)

EPS-21 General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, March 27–31, 2006, Dresden, Germany

Akdogan N., Rameev B., Dorosinsky L., Sozeri H., Khaibullin R., Aktaş B., Tagirov L., Nefedov A., Westphalen A., Zabel H.: Ferromagnetism and magnetic anisotropy in Co-implanted TiO_2 (oral)

Golze C., Alfonsov A., Klingeler R., Büchner B., Kataev V., Mennerich C., Klauss H.-H., Goiran M., Broto J.M., Rakoto H., Demeshko S., Leibel G., Meyer F.: Tuning the magnetic ground state of a novel tetranuclear nickel(II) molecular complex by high magnetic fields (oral)

Hellmann I., Klingeler R., Vavilova E., Arango Y., Popa A., Kataev V., Täschner Ch. and Büchner B.: Magnetic properties of vanadium oxide (oral)

Klingeler R., Kataev V., Schaufuss U., Büchner B., Reutler P., Revcolevschi A., Goiran M., Rakoto H., Broto J.M., Raquet B.: Magnetically driven microwave absorption in $\text{La}_2\text{Sr}_2\text{MnO}_4$ (oral)

Nefedov A., Akdogan N., Westphalen A., Khaibullin R., Tagirov L., Zabel H.: Observation of two ferromagnetic phases in Co-doped rutile TiO_2 (oral)

- Schnack J., Klingeler R., Kataev V., Büchner B.: Revisiting the magnetism of hole-doped CuO_2 spin chains in $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (oral)
- Arango Y., Yang S., Kataev V., Dunsch L., Büchner B.: Magnetic properties of nitrid-clusterfullerene (poster)
- Klingeler R., Kataev V., Golze C., Büchner B., Alfonsov A., Klauss H.-H., Mennerich C., Goiran M., Rakoto H., Broto J.-M., Demeshko S., Liebeling G., Meyer F., Kögerler P., Schnack J., Price D.J.: Magnetism of multi-center Ni- and Fe-based molecular complexes: pulsed magnetic field studies (poster)
- Mennerich C., Golze C., Kataev V., Alfonsov A., Klingeler R., Büchner B., Price D.J., Goiran M., Rakoto H., Broto J.-M., Kataeva O., Broekelmann M., Grossjohann S., Brenig W., Klauss H.-H.: High-field magnetization and ESR on an $S = 1$ spin ladder (poster)
- Schaufuss U., Sekar C., Krabbes G., Tristan N., Drechsler S.-L., Kataev V., Büchner B.: High-field ESR study of the quantum spin magnet CaCu_2O_3 doped with nonmagnetic Zn (poster)
- Vavilova E., Kataev V., Hellmann I., Klingeler R., Täschner Ch., Büchner B.: V NMR study of vanadium oxide nanotubes (poster)

International Symposium "Structure Meets Magnetism", April 5–7, 2006, Bochum, Germany

- Akdogan N., Nefedov A., Westphalen A., Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Aktaş B., Tagirov L.R., Zabel H.: Ferromagnetism in Co-doped TiO_2 rutile (poster)

Annual Physical Conference, April 20–21, 2006, Seoul, South Korea

- Moiseev S.A.: Tunable quantum wavelength conversion using stationary light (oral)

NANOTR-II: NanoScience and NanoTechnology, May 3–5, 2006, Middle East Technical University, Ankara, Turkey

- Rameev B., Aktaş B., Yıldız F., Kazan S.: Nanoscale magnetism of half metallic ferromagnets probed by FMR technique (oral)

International Conference "Advanced Lasers and Their Applications" (ALTA-2006), May 11–13, 2006, Jeju, South Korea

- Moiseev S.A. and Ham B.S.: Manipulations of three-color stationary light (oral)

International Conference on Advances in Nanostructured Materials, Processing-Microstructure-Properties (NANOVED 2006–NENAMAT), May 14–17, 2006, Stará Lesná, Slovak Republic

- Aktaş B., Akdogan N., Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Tagirov L.R., Zabel H.: Anisotropic ferromagnetism in the magnetic ion implanted TiO_2 rutile (oral)

- Rameev B., Aktaş B.: Thin films of half metallic ferromagnets probed by FMR technique (oral)

8 Russia/CIS/Baltic/Japan Symposium on Ferroelectricity (RCBJSF-8), May 15–19, 2006, Tsukuba, Japan

- Mamin R.F., Egami T., Marton T., Migachev S.A.: Giant dielectric permittivity and colossal magnetocapacitance effect in complex manganites with high conductivity (oral)

XIX Международная научно-техническая конференция по фотозлектронике и приборам ночного видения, 23–26 мая 2006, Москва, Россия

- Рыжков В.Н., Алеева Н.В., Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Андреев В.А., Несмелова И.М.: Влияние защитных анодных покрытий на химико-механическую устойчивость эпитаксиальных слоёв тройных твёрдых растворов кадмий-ртуть-теллур, марганец-ртуть-теллур (устн.)

XI International Conference on Quantum Optics (ICQO'2006), May 26–31, 2006, Minsk, Belarus

- Moiseev S.A., Gisin N.: Photon echo quantum memory for arbitrary non-stationary light fields (invited)
- Moiseev S.A., Ham B.S.: Generation and control of the stationary multi-color correlated light fields using EIT effect (invited)

III Международная конференция "Высокоспиновые молекулы и молекулярные магнетики", 13–16 июня 2006, Иваново, Россия

- Домрачева Н.Е., Миреа А., Швёдер М., Латтерманн Г., Торре-Лоренте Л.: Магнитные свойства медьсодержащих дендримерных наноструктур: данные ЭПР (устн.)

Advanced Research Workshop "Mesoscopic and Strongly Correlated Electron Systems" (Meso-06) – 4 "Nanoscale Superconductivity and Magnetism", June 14–19, 2006, Chernogolovka, Russia

- Vodopyanov B.P.: Influence of the induced magnetic moment on the ballistic conductance of a point contact superconductor/strong ferromagnet (poster)

X Международная конференция "Мёссбауэровская спектроскопия и её применения" (X МКМСИП), 18–24 июня 2006, Ижевск, Россия

- Гумаров Г.Г., Гиматов А.В., Петухов В.Ю., Дулов Е.Н., Ивойлов Н.Г.: Мёссбауэровские и рентгеноструктурные исследования кремния, имплантированного ионами железа в магнитном поле (стенд.)

- Дулов Е.Н., Хрипунов Д.М., Ивойлов Н.Г., Хайбуллин И.Б.: Мёссбауэровские исследования монокристаллов рутила, имплантированного железом с высокими дозами (стенд.)

International Workshop Graduating College "Magnetic Resonance", June 19, 2006, Stuttgart, Germany

- Kataev V.: Sub-terahertz ESR spectroscopy of multi-nuclear molecular complexes in strong magnetic fields (invited)

International Workshop on Nanostructured Materials (NANOMAT-2006), June 21–23, 2006, Antalya, Turkey
 Aktaş B., Rameev B.Z., Yıldız F., Tagirov L.R., Heinrich B., Woltersdorf G., Urban R.: FMR studies of ultrathin Fe films grown on GaAs (oral)
 Rameev B.Z., Khaibullin R.I., Tagirov L.R., Yıldız F., Aktaş B.: Magnetic resonance studies of Co and Fe implanted TiO₂ rutile single crystals (poster)

International Symposium of Anomalous Quantum Materials 2006, June 23–27, 2006, Okinawa, Japan
 Khaliullin G.: Charge susceptibility and phonons in cuprates (invited)

9 International Conference on Hole Burning, Single Molecule and Related Spectroscopies: Science and Applications (HBSM-2006), June 24–29, 2006, Aussois, France
 Rysanyanskiy A., Palpant B., Debrus U., Pal A., Stepanov A.L.: Optical nonlinearities of Au nanoparticles embedded in zinc oxide matrix (poster)
 Shakhmuratov R.N., Rebane A., Megret P., Odeurs J.: Slow light with persistent spectral hole burning (poster)

VI International Conference “Ion Implantation and Other Applications of Ions and Electrons” (ION-2006), June 26–29, 2006, Kazimierz Dolny, Poland
 Bayazitov R., Batalov R., Marques C., Alves E., Ivlev G., Gaiduk P.: Structure studies of Er ion implanted and pulsed beam annealed Si layers (poster)

VIII Международная конференция “Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы”, 26–30 июня 2006, Ульяновск, Россия
 Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И.: Импульсный отжиг слоёв кремния, имплантированных ионами 3d и 4f элементов (устн.)
 Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Баязитов Р.М., Баталов Р.И., Хайбуллин И.Б.: Динамика фотоионизации, нагрева и кристаллизации имплантированного кремния при лазерном отжиге (стенд.)

International Conference “Coherent Control of the Fundamental Processes in Optics and X-Ray-Optics” (CCFP’2006), June 29–July 3, 2006, Nizhny Novgorod, Russia
 Samartsev V.V., Kalachev A.A.: Multiple cluster superfluorescence of nuclear molecules (invited)
 Samartsev V.V., Lobkov V.S., Salikhov K.M., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: Femtosecond stimulated photon echo in the dye-doped polymer film and a possibility of the coherent optical cooling via phonon side-band (invited)
 Shakhmuratov R.N., Odeurs J.: Where is the energy of slow light stored (invited)
 Shakhmuratov R.N., Odeurs J., Gheysen S., Rostovtsev Y., Kocharovskaya O., Mandel P.: Level mixing induced transparency for gamma radiation (invited)

Lyubimov V.Yu., Popov E.A.: The quantum interference effects of gamma-radiation under crossing of nuclear levels in radiofrequency field (poster)

V International Conference on Mechanochemistry and Mechanical Alloying (INCOME-2006), July 3–6, 2006, Novosibirsk, Russia

Konygin G.N., Yelsukov E.P., Rybin D.S., Petukhov V.Yu., Gumarov G.G., Efremov Yu.Ya., Shafutdunova D.R., Strelkov N.S., Pozdeev V.V., Maksimov P.N.: Mechanically activated calcium gluconate (MACG) (oral)

XVI Международное совещание “Радиационная физика твёрдого тела”, 3–8 июля 2006, Севастополь, Украина
 Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И.: Особенности формирования светоизлучающих слоёв β -FeSi₂/Si в условиях интенсивных импульсных радиационных воздействий (устн.)

M2S Satellite Meeting “Low-Energy Excitations in High-T_c Superconductors” of the Max-Planck-Institute, July 4–7, 2006, Stuttgart, Germany

Teitelbaum G.B.: The low frequency stripe fluctuations in the superconducting cuprates (poster)

International Symposium “Nuclear Magnetic Resonance in Condensed Matter” (NMRCM 2006), July 9–13, 2006, Saint-Petersburg, Russia
 Salikhov K.M., Fattakhov Ya.V., Fakhrutdinov A.R., Anashkin V.N., Shagalov V.A., Biktimirov E.F., Murtazina E.M.: Medical magnetic resonance tomograph (poster)

X Europhysical Conference on Defects in Insulating Materials “EURODIM 2006”, July 10–14, 2006, Milan, Italy
 Falin M.L., Latypov V.A., Abdulsabirov R.Yu., Korableva S.L.: EPR of the new rare-earth impurity centers in perovskite-type crystals (poster)

International Conference “Slow and Fast Light”, July 23, 2006, Washington, USA

Moiseev S.A., Ham B.S.: Ultraefficient nonlinear quantum optics using slow-light-based stationary light (poster)

15 International Laser Physics Workshop (LPHYS’06), July 24–28, 2006, Lausanne, Switzerland

Samartsev V.V., Lisin V.N., Shegeda A.M., Zuikov V.A.: Low magnetic fields behavior of photon echo in LuLiF₄:Er³⁺ (oral)

Samartsev V.V., Lisin V.N., Shegeda A.M., Zuikov V.A.: Weak magnetic field behaviour of the backward photon echo in LuLiF₄:Eu³⁺ crystal (oral)

Samartsev V.V., Lobkov V.S., Salikhov K.M., Safiullin G.M., Zuikov V.A.: Femtosecond stimulated photon echo in the dye-doped polymer film at room temperature: outlook on the high-temperature echo-processors creation and the laser cooling via phonon side-band (oral)

Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides: Science and Technology towards Sustainable Optoelectronics (APAC-SILICIDE 2006), July 29–31, 2006, Kyoto, Japan

Galkin N.G., Goroshko D.L., Chusovitin E.A., Polyarnyi V.O., Bayazitov R.M., Batalov R.I.: Silicon molecular beam epitaxy on silicon layers implanted by Fe⁺ ions: structure, morphology and optical properties (poster)

XVII International Conference on Magnetism (ICM-2006), August 20–25, 2006, Kyoto, Japan

Rameev B., Aktaş B.: FMR studies of half metallic ferromagnetic thin films (poster)

Первый Всемирный конгресс “Альтернативная энергетика и экология” (WCAEE-2006), 21–25 августа 2006, Саров, Россия

Сулейманов Н.М., Матухин В.Л., Куковицкий Е.Ф., Хантаймеров С.М.: Применение углеродных наноструктурных материалов в топливных элементах (стенд.)

5 Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, August 24–27, 2006, Novosibirsk, Russia

Salikhov K.M.: Comments to the simulations of the time-resolved EPR spectra of the charge separated states in photosynthetic centers (invited)

Butyaev O.G., Konovalov A.A., Salikhov K.M., Tarasov V.F.: Unusual manifestation of the spectral diffusion in the EPR spectra of non-Kramers paramagnetic centers as studied by tunable high-frequency EPR spectroscopy (oral)

Domracheva N., Mirea A., Schwörer M., Torre-Lorente L., Lattermann G.: Magnetic features of copper(II) dendromesogenic complexes: an EPR study (oral)

Shakurov G.S., Malkin B.Z., Vanyunin M.V.: Studies of isotopic disorder in ${}^7\text{Li}_x{}^6\text{Li}_{1-x}\text{YF}_4\text{:Ho}^{3+}$ crystals by high frequency EPR (oral)

Voronkova V.K.: The possibility of EPR for study of the exchange interaction between transition-metal and rare-earth ions (oral)

Andruh M., Gheorghe R., Mingalieva L., Sukhanov A., Voronkova V.: EPR investigation of the heteronuclear Cu-Gd complex (poster)

Iyudin V.S., Obynochny A.A., Salikhov K.M.: EPR method application for investigation of oxygen influence on electron spin polarization of hematoporphyrin IX (poster)

Kandrashkin Yu.E., Kumar P.P., van der Est A.: Novel intramolecular electron transfer in axial bis(terpyridoxy)phosphorus(V) porphyrin studied by time-resolved EPR spectroscopy (poster)

Konovalov A.A., Tarasov V.F.: High-frequency EPR spectroscopy of Tm³⁺ and Tb³⁺ ions in synthetic forsterite (poster)

Kuvshinova N.V., Zaripov R.B., Obynochnyi A.A., Salikhov K.M.: EPR study of electron spin polarization of porphyrins with different replacement of rings (poster)

Mursalimov A.R., Sadchikov Yu.V., Salikhov K.M.: Simulations of EPR spectra of the consecutive radical pairs in reaction centers of photosystem I: the influence of

inhomogeneous line broadening based on Monte-Carlo method (poster)

Tseytlin M.P., Dhama A., Eaton S.S., Eaton G.R.: Comparison of maximum entropy and filtered back-projection methods to reconstruct rapid-scan EPR images (poster)

Varlamov A.G., Garipov N.R., Ulanov V.A.: Temperature dependencies in the EPR spectra of titanium clusters in CaF₂ and SrF₂ crystals (poster)

Voronkova V.K., Galeev R.T., Novitchi G., Turta C.I., Caneschi A., Gatteschi D.: Peculiarities of EPR spectrum of spin cluster formed from Kramers and non-Kramers ions (poster)

Zhiteytshev E.R., Ulanov V.A.: Structures and magnetic properties of iron paramagnetic complexes in SrF₂ crystals (poster)

International Symposium on the Jahn-Teller Effects: Novel Aspects in Orbital Physics and Vibronic Dynamics of Molecules and Crystals, August 28–31, 2006, Trieste, Italy

Ulanov V.A., Varlamov A.G.: Jahn-Teller copper trimers in BaF₂ crystals: molecular motion controlled by magnetic field, antisymmetric exchange and temperature (oral)

Ulanov V.A., Varlamov A.G., Zhiteitcey E.R.: Jahn-Teller effect in the $[\text{TiF}_4\text{F}_4\text{int}]^{6-}(\text{C}_{4v})$ and $[\text{NiF}_4\text{F}_4\text{int}]^{7-}(\text{C}_{4v})$ clusters embedded into SrF₂ crystals (poster)

Gordon Research Conference “Magnetic Nanostructures”, September 3–8, 2006, The Queen’s College Oxford, UK

Aktaş B., Rameev B.: FMR investigations of anisotropic ferromagnetism in the magnetic ion implanted TiO₂ rutile (poster)

8 European Conference on Applications of Polar Dielectrics (ECAPD), September 5–8, 2006, Metz, France

Kholkin A.L., Bdikin I.K., Mamin R.F.: Electric field induced polar state in doped manganites via scanning probe microscopy (oral)

6 European Federation of EPR Groups Meeting (EFEPR-06), September 5–8, 2006, Madrid, Spain

Altshuler T.S., Bresler M.S., Goryunov Yu.V.: Impurity ferromagnetism of iron in samarium hexaboride (poster)

Fifth International Seminar on Ferroelastic Physics, September 10–13, 2006, Voronezh, Russia

Mamin R.F.: Temperature change of defect properties and features of phase transitions (oral)

Mamin R.F., Bdikin I.K., Kholkin A.L.: Investigation of piezoelectric properties of induced state in manganites by different methods of atomic force microscopy (oral)

Bush A.A., Kamentsev K.E., Mamin R.F., Migachev S.A., Sadikov M.F.: Appearance of relaxor behavior by example of Pb₅(Ge_{1-x}Si_x)₃O₁₁ and (Pb_{1-y}Ba_y)₅Ge₃O₁₁ single crystals (poster)

Kiselev D.A., Bdikin I.K., Mamin R.F., Dkhil B., Sternberg A., Kholkin A.L.: Investigation of piezoelectric properties

of induced state in manganites by different methods of atomic force microscopy (poster)

Mamin R.F., Egami T., Marton T., Migachev S.A., Lunev I.V.: Giant dielectric permittivity and colossal magnetocapacitance effect as evidence of charge segregation in complex manganites (poster)

VIII International Conference "Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows", September 10–15, 2006, Tomsk, Russia

Batalov R.I., Bayazitov R.M., Nurutdinov R.M., Shmagin V.B., Krizhkov D.I., Ivlev G.D., Gaiduk P.I., Dezsı I., Kotai E.: Formation of light-emitting iron disilicide/silicon heterostructures by means of pulsed ion and laser beams (poster)

VIII Международный семинар по магнитному резонансу "Спектроскопия, томография и экология", 11–16 сентября 2006, Ростов-на-Дону, Россия

Аминова Р.М., Моисеев С.А., Шамов А.Г.: Моделирование фемтосекундной динамики оптически возбуждённого нитрона на основе квантовохимических расчётов поверхностей потенциальной энергии возбуждённых состояний молекул (стенд.)

International Workshop SFB 418 "Irradiation-Assisted Methods of Formation and Modification of Metal Nanoparticles in Glass", September 12, 2006, Halle, Germany

Stepanov A.L.: Formation of metal nanoparticles in dielectrics by low energy ion implantation and their modification by laser annealing (invited)

Ninth International Meeting "Ordering in Metals and Alloys" (OMA-9), September 12–16, 2006, Rostov-on-Don, Russia

Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Потапов А.А.: Особенности распространения акустических волн вблизи структурного фазового перехода в манганите $\text{La}_{0.875}\text{Sr}_{0.125}\text{MnO}_3$ (устн.)

Ерёмина Р.М., Яцык И.В., Муковский Я.М., Арсенов А.А., Пестун А.Е.: Наблюдение фазового разделения в $\text{La}_{0.85}\text{Ba}_{0.15}\text{MnO}_3$ методом ЭПР (устн.)

Гаврилова Т.П., Ерёмина Р.М., Дейзенхофер И., фон Нидда Х.-А., Лоидл А.: Анизотропные обменные взаимодействия в CuTe_2O_5 (стенд.)

VIII East European Regional Conference of the International Society for Invertebrate Neurobiology "Simpler Nervous Systems", September 13–17, 2006, Kazan, Russia

Gainutdinov Kh.L., Gainutdinova T.Kh., Balaban P.M.: Reconsolidation of a context long-term memory in the terrestrial snail after reminder requires protein synthesis (oral)

Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L., Shtark M.B., Epstein O.I.: Effects of antibodies to protein S100 on the electrical activity and Ca-dependent K-channels of snail identified neurons (poster)

Gainutdinova T.Kh., Sylantjeva D.I., Gainutdinov Kh.L.: Effects of extracellular calcium on electrical characteristics of command neurons of snails after learning and long-term sensitization (poster)

Goryunova A.Yu., Ismailova A.I., Gainutdinova T.Kh.: Effects of nitroglycerine and inhibitor of NO-synthase L-NAME on elaboration of long-term sensitization in snail (poster)

Ismailova A.I., Gainutdinova T.Kh., Muranova L.N., Gainutdinov Kh.L.: Effects of chronic caffeine on electrical characteristics of command neurons during elaboration of long-term sensitization in snail (poster)

Kanakotina I.B., Tagirova R.R., Golubev A.I., Gainutdinov Kh.L.: Serotonergic system in elaboration of conditioned reflex and long-term sensitization in snail (poster)

Muranova L.N., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L.: Investigation of mechanisms of hyperpolarizing effect of chronic injection of haloperidol in terrestrial snail (poster)

Muranova L.N., Golubev A.I., Gainutdinov Kh.L.: Influence of predecessor dopamine L-DOPA, 6-hydroxydopamine and haloperidol on elaboration of conditioned defensive reflex in snail (poster)

Sylantjeva D.I., Andrianov V.V., Gainutdinova T.Kh., Gainutdinov Kh.L.: Effects of chronic caffeine and inhibitors of ion channels on elaboration of conditioned reflex in snails (poster)

Tagirova R.R., Gainutdinov Kh.L.: Investigation of adenylatcyclase system of snail command neurons participations in associative learning: effects of forskoline, IBMX and 8-Br-cAMP (poster)

Timoshenko A.Kh., Gainutdinova T.Kh., Sylantjeva D.I.: Effects of changes of intracellular calcium in command neurons of snails after learning and long-term sensitization (poster)

Yurtaeva S.V., Ismailova A.I., Obynochny A.A., Andrianov V.V., Gainutdinov Kh.L.: The variation of nitrogen oxide production in snail tissues under long-term sensitization: the investigation by EPR technique (poster)

Specialized Colloque AMPERE and AvH-Workshop: Advanced Materials as Studied by Spectroscopic and Diffraction Techniques, September 16–21, 2006, Vilnius, Lithuania

Altshuler T., Goryunov Yu., Shitsevalova N., Dukhnenko A.: Magnetic resonance in two spin subsystem of europium hexaboride (oral)

XV International Conference "Ion Beam Modification of Materials" (IBMM-2006), September 18–22, 2006, Taormina, Italy

Khaibullin R.I., Ibragimov S.Z., Tagirov L.R., Popok V.N., Khaibullin I.B.: Formation of anisotropic ferromagnetic response in rutile (TiO_2) implanted with cobalt ions (oral)

Bayazitov R.M., Batalov R.I., Marques C.P., Alves E., Ivlev G.D., Gaiduk P.I.: Pulsed annealing of Er ion implanted Si layers (poster)

- Fattakhov Ya.V., Galyautdinov M.F., L'vova T.N., Zakharov M.V., Khaibullin I.B.: Investigation of structural-phase transitions dynamics on the surface of implanted silicon at rapid thermal processing (poster)
- Ivlev G.D., Gatzkevich E.I., Bayazitov R.M., Batalov R.I., Khaibullin I.B.: Dynamics of photoionization, heating and crystallization of implanted silicon during laser annealing (poster)
- Khaibullin R.I., Lopatin O.N., Bazarov V.V., Troshina J.I., Bakhtin A.I., Rameev B.Z., Aktaş B., Khaibullin I.B.: Coloration of single crystal rutile by implantation with Co, Mn and Fe ions (poster)
- Lukashevich M.G., Battle X., Labarta A., Odzhaev V.B., Popok V.N., Zhikharev V.A., Khaibullin R.I.: Modification of magnetic properties of polyethyleneterephthalate by implantation of iron ions (poster)
- Stepanov A.L., Khaibullin R.I., Can N., Rysnanskiy A., Palplant B.: Nonlinear optical properties of transparent semiconductors with implanted metal nanoparticles (poster)

9 International Meeting "Order, Disorder and Properties of Oxides", September 19–23, 2006, Rostov-on-Don, Russia
 Гарифуллин И.А., Гарибянов Н.Н., Салихов Р.И.: Структура границ раздела в многослойных тонкоплёночных металлических гетероструктурах (стенд.)

X Международная научно-техническая конференция и молодёжная школа-семинар "Актуальные проблемы твёрдотельной электроники и микроэлектроники" (ПЭМ-2006), 24–29 сентября 2006, Дивноморское, Россия
 Бухараев А.А., Бизяев Д.А., Бородин П.А., Гатиятов Р.Г., Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Зиганшина С.А.: Сканирующая зондовая микроскопия микро- и наноструктур в сильных магнитных полях (устн.)

Международная нейрохимическая конференция "Нейроспецифические метаболиты и энзимологические основы деятельности ЦНС", 25–27 сентября 2006, Пенза, Россия

- Гайнутдинов Х.Л., Гнездилов О.И., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Обычный А.А., Юртаева С.В., Яфарова Г.Г., Зефилов А.Л., Рахматуллина Ф.Ф.: Исследование продукции оксида азота в тканях крыс методом ЭПР спектроскопии при ишемическом повреждении сердца (устн.)
- Силантьева Д.И., Андрианов В.В., Гайнутдинова Т.Х., Тагирова Р.Р., Гайнутдинов Х.Л.: Исследование взаимодействия ионов Са и аденилатциклазной системы при ассоциативном обучении у виноградной улитки (устн.)
- Гайнутдинова Т.Х.: Влияние блокады синтеза белка на сохранение условного оборонительного рефлекса на постукивание по раковине у виноградной улитки (стенд.)
- Тагирова Р.Р., Канакотина И.Б., Гайнутдинов Х.Л.: Эффекты 5-окситриптофана и нейротоксина 5,7-дигид-

рокситриптамина при ассоциативном обучении у виноградной улитки (стенд.)

VI Международная конференция "Лазерная физика и оптические технологии", 25–29 сентября 2006, Гродно, Беларусь

Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Поглощение и отражение ИК излучения в Si при наносекундном лазерном воздействии (устн.)

XV International Conference "Physical Methods in Coordination and Supramolecular Chemistry", September 27–October 1, 2006, Chishinaw, Moldova

- Ciornea V., Borta A., Galeev R., Mingalieva L., Voronkova V., Costes J.-P., Fillipova I., Novitchi Gh., Gulea A.: Synthesis, structure, EPR and magnetic properties of some new chromium(III) heterometallic nitrilotriacetates (poster)
- Galeev R., Mingalieva L., Sukhanov A., Voronkova V., Gheorghe R., Andruh M.: EPR investigation of the exchange interaction in the heteronuclear compound (poster)

Международный симпозиум "Активные формы кислорода, азота и хлора в регуляции клеточных функций в норме и при патологии", 28–29 сентября 2006, Гродно, Беларусь

- Гайнутдинов Х.Л., Зефилов А.Л., Юртаева С.В., Обычный А.А., Гнездилов О.И., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н., Рахматуллина Ф.Ф.: Исследование методом ЭПР спектроскопии продукции оксида азота в тканях крыс при ишемическом повреждении сердца (стенд.)
- Юртаева С.В., Яфарова Г.Г., Гайнутдинова Т.Х., Тимошенко А.Х., Обычный А.А., Гайнутдинов Х.Л.: Исследование методом ЭПР спектроскопии изменения содержания оксида азота в тканях виноградной улитки при выработке долговременной сенситизации (стенд.)

XIII научно-техническая конференция с участием зарубежных специалистов "Вакуумная наука и техника", 2–9 октября 2006, Сочи, Россия

Куковицкий Е.Ф., Львов С.Г., Мусатов А.Л., Израэльянц К.Р., Масленникова О.Ю., Гузилов И.А.: Углеродные нанотрубные автоэммиттеры, полученные в условиях микрореактора (устн.)

2 Международная конференция "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости" (ФПС'06), 9–13 октября 2006, Звенигород, Россия

Тейтельбаум Г.Б.: Носители тока различной природы в купратах и их проявление в данных ряда экспериментов (приглашён.)

Бухараев А.Н., Валидов А.А., Гумаров Г.Г., Панарина Н.Ю., Петухов В.Ю., Таланов Ю.И., Хасанов Р.И.: Исследование эффектов облучения тонких плёнок $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ионами Co^+ и Fe^+ с энергией 40 кэВ (стенд.)

Тогулев П.Н., Сулейманов Н.М., Цондер К.: Исследование эффектов пиннинга в сверхпроводящих композитах на основе диборида магния (стенд.)

Яцык И.В., Ерёмина Р.М., Шакирзянов М.М., Муковский Я.М., Пестун А.Н., Арсенов А.А.: Поведение ширины линии ЭПР в монокристаллах $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (стенд.)

5 Workshop on Orbital Physics and Novel Phenomena in Transition Metal Oxides, October 11–12, 2006, Berlin, Germany

Kataev V., Klingeler R., Schaufuss R., Goiran M., Raquet B., Rakoto H., Broto J.-M., Reutler P., Revcolevschi A., Büchner B.: Anomalous absorption of sub-THz microwaves in the layered manganate $\text{La}_1\text{Sr}_1\text{MnO}_4$ in strong magnetic fields (poster)

Klingeler R., Hellmann I., Popa A., Kataev V., Vavilova E., Arango Y., Täschner C., Liu X., Knupfer M., Masquelier C., Büchner B.: Magnetic and electronic properties of vanadiumoxide (poster)

IV Международная конференция “Фундаментальные проблемы оптики-2006”, 16–20 октября 2006, Санкт-Петербург, Россия

Андрианов С.Н., Власова Д.Д., Петрушкин С.В.: Радиационно-сбалансированное сверхизлучение (устн.)

Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Многоимпульсные оптические последовательности в твердотельных фотонных эхо-процессорах (устн.)

Sai'dasheva I.Sh., Arslanov N.M., Moiseev S.A.: Photon echo modelling in the medium with controlled gradient: possibility of effective quantum memory (oral)

Arslanov N.M., Moiseev S.A.: Enhancement of TE (HE) light in a probe of the near-field optical microscope with optimal form (poster)

Калинкин А.А., Калачёв А.А., Калашников Д.А., Шкаликов А.В., Самарцев В.В.: Распространение однофотонных волновых пакетов в оптически плотных резонансных средах (стенд.)

Петрушкин С.В.: Теплообмен и охлаждение в полупроводниковых лазерах (стенд.)

Сафиуллин Г.М., Лобков В.С., Самарцев В.В., Салихов К.М., Леонтьев А.В.: Когерентное фемтосекундное эхо в полимерной плёнке, допированной молекулами красителя (стенд.)

VI Международная научная конференция по лиотропным жидким кристаллам совместно с симпозиумом “Успехи в изучении термотропных жидких кристаллов”, 17–21 октября 2006, Иваново, Россия

Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Лобков В.С., Князев А.А., Джабаров В.И., Галяметдинов Ю.Г.: Влияние температуры на эффективность переноса энергии в жидкокристаллическом комплексе европия (стенд.)

V Международная конференция “Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология”, 18–20 октября 2006, Москва, Россия

Куковицкий Е.Ф., Львов С.Г., Саинов Н.А.: Каталитический рост углеродных нанотрубок в условиях микрореактора (стенд.)

X Международная молодёжная научная школа “Когерентная оптика и оптическая спектроскопия”, 24–26 октября 2006, Казань, Россия

Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: Квантовая память многоимпульсных световых полей, основанная на обращённом штарковском фотонном эхо (устн.)

Арсланов Н.М., Моисеев С.А.: О возможностях пространственного сжатия света в оптической микроскопии ближнего поля (устн.)

Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Фазовые оптические последовательности в технике сужения спектральных линий (устн.)

Леонтьев А.В., Лобков В.С., Сафиуллин Г.М., Салихов К.М.: Спектроскопическое исследование сигналов стимулированного фотонного эха в полимерной плёнке, допированной молекулами красителя, при комнатной температуре (устн.)

Чукланов А.П., Гатиятов Р.Г., Бизяев Д.А., Бородин П.А., Галаятдинов М.Ф., Бухараев А.А.: Формирование микро- и наноструктур воздействием импульсного лазерного излучения на металлические наноплёнки (устн.)

Власова Д.Д., Самарцев В.В.: Модуляция последовательностей оптических импульсов в режиме акустооптического преобразования волновых фронтов (стенд.)

Воробьёв А.Ю., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Фемтосекундный когерентный режим лазерного охлаждения полимерных плёнок, легированных молекулами красителя (стенд.)

Галимуллин Д.З., Чукланов А.П., Бухараев А.А., Салахов М.Х.: Биспектральный анализ нелинейных эффектов при исследовании колебаний кантилевера в динамическом режиме (стенд.)

Каримуллин К.Р., Зуйков В.А., Самарцев В.В.: Спектроскопическое исследование перспективных носителей оптической информации (стенд.)

Назипов Р.А., Пятаев А.В., Зюзин Н.А., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М.: Гамма-резонансная спектроскопия аморфного сплава, облучённого импульсным ионным пучком (стенд.)

Фаррахов Б.Ф., Фаттахов Я.В., Захаров М.В.: Исследование динамики фазовых переходов в имплантированном кремнии методом оптической дифракции (стенд.)

Шкаликов А.В., Калинкин А.А., Калачёв А.А., Калашников Д.А., Самарцев В.В.: К вопросу о распространении импульсов “малой” площади в оптически плотных резонансных средах (стенд.)

Шмелёв А.Г., Леонтьев А.В., Сафиуллин Г.М.: Исследование параметров суперконтинуума (стенд.)

X International Youth Scientific School "Actual Problems of Magnetic Resonance and Its Application", October 31–November 3, 2006, Kazan, Russia

- Galeev R., Mingalieva L., Sukhanov A., Voronkova V., Novitski Gh., Ciornea V.: EPR investigation of spin architectures built on a basis of chromium dimers (oral)
- Mursalimov A.R., Chernikov S.K., Sadchikov Yu.V., Kandrashkin Yu.E., Salikhov K.M.: Monte-Carlo simulations of the EPR spectra of charge separated states in photosynthetic reaction centers (oral)
- Mingalieva L., Sukhanov A., Voronkova V., Galeev R., Andruh M., Gheorghe R.: The analysis of the polycrystalline EPR spectra of Cu-Gd dimers (oral)
- Yatzyk I.V., Eremina R.M., Krug von Nidda H.-A., Loidl A., Mukovskii Ya.M.: Observation of a Griffith's phase in paramagnetic $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ (oral)
- Ulanov M.N., Kulik L.V., Bizin M.A., Ivanova V.N., Zaripov R.B., Dzuba S.A.: Triplet state dynamics of fullerene C_{60} studied by pulse EPR (oral)
- Zaripov R.B., Salikhov K.M., Kulik L.V., Dzuba S.A.: ESEEM study of dipole-dipole interaction in nitroxide biradicals (oral)

Physical Seminar of the Technical University of Chemnitz, November 6, 2006, Chemnitz, Germany

- Kataev V.: Probing the spin states of multi-center paramagnetic molecular complexes by high-field ESR spectroscopy (invited)

VI Международная научно-техническая конференция "Квантовая электроника", 14–17 ноября 2006, Минск, Беларусь

- Гайдук П.И., Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Ивлев Г.Д.: Структура слоёв кремния, легированного железом или эрбием, после облучения мощными лазерными импульсами (устн.)

Шестой Международный научно-практический семинар и молодёжная школа "Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах", 12–17 декабря 2006, Санкт-Петербург, Россия

- Черников С.К., Баскевич Т.П.: Анализ динамической реакции конструкции на вычислительных кластерах (устн.)
- Черников С.К., Садчиков Ю.В., Ашихмин А.Н.: Решение некоторых задач физики и механики на многопроцессорных системах с распределённой памятью (устн.)

5 International Conference of the STRIPES'06, December 17–22, 2006, Rome, Italy

- Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B.: Externally doped and thermally activated holes in LSCO and the pseudogap crossover (invited)

Российские конференции

Х ежегодный симпозиум "Нанопизика и нанозлектроника", 13–17 марта 2006, Нижний Новгород

- Бизяев Д.А., Бухараев А.А., Угрюмов О.В., Варнава О.А.: Исследование свойств ингибиторов коррозии методами атомно-силовой микроскопии (стенд.)
- Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Магнитомеханические эффекты и магнитосопротивление никелевых наноструктур (стенд.)
- Нургаизов Н.И., Ждан П.А.: Приготовление игл для магнитно-силовой микроскопии высокого разрешения (стенд.)
- Нургаизов Н.И., Ждан П.А., Биннс К.: Сканирующая зондовая микроскопия наноструктурированных магнитных образцов, полученных различными методами (стенд.)
- Kharintsev S.S., Chevtchenko S.S., Ovchinnikov D.V., Hofmann G.G., Loos J.: Tip enhanced Raman spectroscopy of PCBM (poster)
- Ovchinnikov D.V.: Tip-sample convolution effect influence on surface roughness determined from AFM image (poster)
- Ovchinnikov D.V., Chevtchenko S.S., Loos J.: High-temperature AFM investigation of PCBM thin film annealing (poster)

10 Пушкинская школа-конференция молодых учёных "Биология – наука XXI века", 17–21 апреля 2006, Пушкино

- Андреев В.В., Силантьева Д.И.: Исследование действия антител к Са-связывающему белку S100 на электрическую активность и К-каналы идентифицированных нейронов после обучения (стенд.)
- Гайнутдинова Т.Х., Исмаилова А.И.: Исследование механизмов зависимой от белкового синтеза реактивации условного обонятельного рефлекса у виноградной улитки – анализ влияния аннотина при нападении с подкреплением (стенд.)
- Исмаилова А.И., Гайнутдинова Т.Х., Муранова Л.Н.: Электрофизиологическое исследование эффектов хронического введения кофеина на формирование долговременной сенситизации у виноградной улитки (стенд.)

Совещание по программе фундаментальных исследований ОФН РАН "Спин-зависимые эффекты в твёрдых телах и спинтроника", 20–21 апреля 2006, Санкт-Петербург

- Гарифуллин И.А.: Теоретическое и экспериментальное исследование возможностей создания спинового клапана на основе наноконтактов и слоистых гетероструктур (устн.)

IX Российская медико-биологическая научная конференция молодых учёных “Человек и его здоровье”, 22 апреля 2006, Санкт-Петербург

Гайнутдинова Т.Х., Андрианов В.В., Силантьева Д.И.: Роль ионов кальция в функционировании командных нейронов виноградных улиток после обучения (стенд.)

Горюнова А.Ю., Гайнутдинова Т.Х.: Действие нитроглицерина и блокатора NO-синтазы L-NAME на формирование долговременной сенситизации у виноградной улитки (стенд.)

Каримов Ф.К., Муранова Л.Н.: Исследование методом ЭПР интенсивности продукции оксида азота в тканях органов крыс разного возраста (стенд.)

Муранова Л.Н., Андрианов В.В.: Исследование длительности сохранения эффектов хронического введения галоперидола у виноградной улитки (стенд.)

X конференция студентов, аспирантов и молодых учёных по физике полупроводниковых, диэлектрических и магнитных материалов (ПДММ-2006), 26–29 апреля 2006, Владивосток

Галкин Н.Г., Горошко Д.Л., Чусовитин Е.А., Баязитов Р.М., Баталов Р.И.: Молекулярно-лучевая эпитаксия кремния на слоях кремния, имплантированных ионами железа: морфология, структура и оптические свойства (устн.)

Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Нурутдинов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлев Г.Д., Гайдук П.И.: Формирование гетероструктур β -FeSi₂/Si под действием импульсных энергетических воздействий (стенд.)

VI научная конференция молодых учёных, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета “Материалы и технологии XXI века”, 28 апреля 2006, Казань

Баталов Р.И., Новиков Г.А., Баязитов Р.М.: Формирование пористых гетероструктур карбида кремния на кремнии и исследование их фотолюминесценции в видимой области (стенд.)

Баталов Р.И., Новиков Г.А., Баязитов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И.: Формирование слоёв дисилицида железа на кремнии и светоизлучающих структур на их основе с использованием импульсных ионных и лазерных пучков (стенд.)

Чукланов А.П., Зиганшина С.А., Бухараев А.А.: Алгоритм компьютерного анализа АСМ изображений поверхности химических сенсоров с электроосаждёнными наночастицами (стенд.)

X Всероссийская научная школа-семинар “Волны-2006: волновые явления в неоднородных средах”, 22–27 мая 2006, Москва

Латыпов И.З., Петрушкин С.В., Самарцев В.В.: Многоимпульсные оптические последовательности в твёрдых фотонных эхо-процессорах (устн.)

XXI Российская конференция по электронной микроскопии (РКЭМ-2006), 5–10 июня 2006, Черноголовка

Чукланов А.П., Зиганшина С.А., Бухараев А.А.: Компьютерный анализ АСМ изображений наночастиц, сформированных на поверхности со сложной морфологией (устн.)

Зиганшина С.А., Чукланов А.П., Бухараев А.А., Челнокова И.А., Гедмина А.В., Шайдарова Л.Г.: Атомно-силовая микроскопия композитных электродов с каталитическими свойствами (стенд.)

54 конференция Ассоциации автомобильных инженеров “Конструктивная безопасность автомобильных средств”, 7–8 июня 2006, Дмитров

Черников С.К., Файзуллин А.М.: Использование компьютерного моделирования при анализе конструктивной безопасности модернизированного автомобиля “Ока” (устн.)

XIII симпозиум по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул, 19–23 июня 2006, Санкт-Петербург

Лапаев Д.В., Никифоров В.Г., Князев А.А., Лобков В.С., Галяметдинов Ю.Г.: Внутримолекулярный перенос энергии в ориентированном жидкокристаллическом комплексе Eu(DK)₃bpy (стенд.)

Всероссийская научная конференция “Проблемы радиационной безопасности”, 23–24 июня 2006, Казань

Ибрагимов М.И., Петухов В.Ю., Жеглов Е.П., Конюхов Г.В., Низамов Р.Н.: Сравнение закономерностей метаболических изменений, происходящих в крови и тканях органов мышей под действием растительного радиотоксина и облучения: изучение методом ЭПР (устн.)

XIII Всероссийская конференция “Структура и динамика молекулярных систем” (Яльчик-2006), 27 июня–2 июля 2006, Яльчик

Вишневская Г.П., Фролова Е.Н., Константинов В.Н., Фахрутдинов А.Р.: ЭПР ионов Gd³⁺ в универсальных катионах КУ-2 и КУ-1 (стенд.)

Воронкова В.К., Галеев Р.Т., Мингалиева Л.В., Суханов А.А., Андрух М.: ЭПР димера медь-гадолиний (стенд.)

Июдин В.С., Кувшинова Н.В., Обычный А.А., Салихов К.М.: Применение метода ВР ЭПР для исследования поляризации электронных спинов в гематопорфирине IX (стенд.)

Каргин Р.В., Гончаров В.А., Лунев И.В., Сараев Д.В., Гусев Ю.А.: Разработка программного обеспечения для реализации метода временной диэлектрической спектроскопии (стенд.)

Кувшинова Н.В., Обычный А.А., Салихов К.М.: Применение методов радиоспектроскопии для исследования механизма формирования спиновой поляризации триплетных молекул порфиринов (стенд.)

- Мингалиева Л.В., Суханов А.А., Галеев Р.Т., Воронкова В.К., Новицкий Г., Чёрня В.: Исследование обменных взаимодействий в трёхъядерном гетерокластере (стенд.)
- Туранов А.Н., Туранова О.А., Фролова Е.Н., Галяметдинов Ю.Г.: Магнитные свойства жидкокристаллических биядерных комплексов меди с β -аминовинилкетонами (стенд.)
- Хузеева Л.Г., Хейнникель М., Гольбек Дж., Штелих Д., Антонкин М.Л.: Исследование фотосинтетических реакционных центров *Helioobacillus mobilis* методом времязадержанного парамагнитного резонанса (стенд.)
- Юртаева С.В., Обычный А.А., Гнездилов О.И., Гайнутдинов Х.Л., Исмаилова А.И., Муранова Л.Н.: ЭПР исследование образования оксида азота и других парамагнитных частиц при воздействии на сердечно-сосудистую систему (стенд.)

Первая межрегиональная научная школа “Наука и инновации-2006: физика резонансных явлений и её инновационные аспекты”, 6–10 июля 2006, Йошкар-Ола

- Самарцев В.В., Лобков В.С., Сафиуллин Г.М.: Фемтосекундный оптический эхо-процессор, функционирующий при комнатной температуре (устн.)

VIII Всероссийский симпозиум “Растущий организм: адаптация к физической и умственной нагрузке”, 22–24 сентября 2006, Казань

- Гайнутдинов Х.Л., Андрианов В.В., Силантьева Д.И., Тимошенко А.Х.: Роль ионов кальция в обеспечении долговременной памяти у виноградной улитки (устн.)
- Каримов Ф.К., Исмаилова А.И., Юртаева С.В., Обычный А.А., Яфарова Г.Г., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л., Ситдинов Ф.Г.: Изменения содержания оксида азота в органах интактных и десимпатизированных крыс (устн.)
- Тимошенко А.Х., Яфарова Г.Г., Тагирова Р.Р., Гайнутдинова Т.Х., Исмаилова А.И., Гайнутдинов Х.Л., Штарк М.Б., Эпштейн О.И.: Эффекты влияния антител к белку S100 в малых дозах на выработку долговременной сенситизации у виноградной улитки (устн.)
- Гайнутдинова Т.Х., Юртаева С.В., Исмаилова А.И., Обычный А.А., Муранова Л.Н., Гнездилов О.И., Гайнутдинов Х.Л.: Роль оксида азота при выработке долговременной сенситизации у виноградной улитки (стенд.)
- Тагирова Р.Р., Андрианов В.В., Гайнутдинов Х.Л.: Исследование механизмов долговременного сохранения эффектов обучения и влияния нейротоксинов к серотонину и дофамину (стенд.)

XXXIV Всероссийское совещание по физике низких температур (НТ-34), 26–30 сентября 2006, Ростов-на-Дону

Гарифуллин И.А., Гарифьянов Н.Н., Тихонов Д.А., Вестерхолт К., Шпрунгманн Д., Цабель Х., Брукас Р., Хьерварссон Б.: Экспериментальное исследование

возможностей создания спинового клапана на основе эффекта близости сверхпроводник/ферромагнетик (планарн.)

- Водопьянов Б.П.: Баллистический кондактанс точечного контакта сверхпроводник/сильный ферромагнетик (устн.)
- Горьков Л.П., Тейтельбаум Г.Б.: Носители тока различной природы в купратах и их проявление в разнообразных экспериментальных данных (устн.)
- Бадрутдинов А.О., Зарубежнова Е., Таланов Ю.И., Якоб Г., Тейтельбаум Г.Б.: Локальные свойства микроскопического фазового расслоения в монокристаллических плёнках $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (стенд.)
- Иванова Т.А., Овчинников И.В., Туранов А.Н.: О влиянии внешнесферного аниона на свойства спинового перехода в $\text{Fe}(\text{4-OCH}_3\text{-SalEen})_2\text{X}$, $\text{X} = \text{PF}_6, \text{NO}_3$ (стенд.)
- Таланов Ю.И., Бухараев А.Н., Валидов А.А., Гумаров Г.Г., Панарина Н.Ю., Петухов В.Ю., Хасанов Р.И.: Влияние низкоэнергетического облучения на пининг в тонких плёнках ВТСП (стенд.)

XII Всероссийская конференция “Оптика и спектроскопия конденсированных сред”, 1–7 октября 2006, Краснодар

- Аванесов А.Г., Асатрян Г.Р., Шакуров Г.С.: ЭПР ионов Cr^{3+} в кристалле Y_2SiO_5 (устн.)
- Галеев А.А., Низамутдинов Н.М., Хасанова Н.М., Булка Г.Р., Винокуров В.М., Рудович Ч., Шакуров Г.С.: ЭПР Cr^{4+} в кристалле LiScGeO_4 (устн.)
- Коновалов А.А., Тарасов В.Ф.: Высокочастотная перестраиваемая ЭПР спектроскопия синтетического форстерита $\text{Tb}^{3+}:\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ (устн.)
- Лебедев В.А., Шакуров Г.С., Гарипов Н.Р.: Исследование эволюции центров хрома в концентрационно-профилированных примесью магния кристаллах SLN методом ЭПР (устн.)

I Всероссийская конференция “Физические и физико-химические основы ионной имплантации”, 24–27 октября 2006, Нижний Новгород

- Баязитов Р.М.: Фото- и термовозбуждение при импульсном лазерном отжиге имплантированных полупроводников (устн.)
- Хайбуллин Р.И., Ибрагимов Ш.З., Тагиров Л.Р., Попок В.Н., Хайбуллин И.Б.: Динамика и особенности развития ферромагнитного отклика в рутиле (TiO_2), имплантированном ионами кобальта (устн.)
- Баталов Р.И., Баязитов Р.М., Шмагин В.Б., Крыжков Д.И., Ивлёв Г.Д., Гайдук П.И.: Формирование светоизлучающих в ближней ИК области твёрдых растворов и соединений кремния с 3d и 4f элементами с использованием ионной имплантации и импульсных воздействий (стенд.)
- Гатиятов Р.Г., Бородин П.А., Бухараев А.А., Гумаров Г.Г., Галяутдинов М.Ф.: Исследование возможности формирования наноразмерных переключателей посредством ионно-лучевого травления (стенд.)

- Гатиятова Ю.И., Хайбуллин Р.И., Ибрагимов Ш.З., Гатиятов Р.Г., Тагиров Л.Р., Хайбуллин И.Б.: Исследование магнитных свойств корунда (Al_2O_3), имплантированного ионами кобальта (стенд.)
- Гумаров Г.Г., Петухов В.Ю., Бухараев А.А., Бизяев Д.А.: Образование дендритоподобной структуры при имплантации ионов Fe^+ в кремний (стенд.)
- Степанов А.Л., Хайбуллин И.Б.: Формирование металлических наночастиц в диэлектрике при ионной имплантации и лазерном отжиге для приложений в нелинейной оптике (стенд.)
- Файзрахманов И.А., Базаров В.В., Степанов А.Л., Хайбуллин И.Б.: Влияние имплантации ионов меди на оптические свойства и низкотемпературную проводимость углеродных плёнок (стенд.)

- Фаттахов Я.В., Галяутдинов М.Ф., Львова Т.Н., Захаров М.В., Хайбуллин И.Б.: Исследование динамики рекристаллизации кремния, имплантированного ионами фосфора, при быстром термическом отжиге (устн.)
- Хайбуллин Р.И., Лопатин О.Н., Бахтин А.И., Хайбуллин И.Б.: Геммологические аспекты ионной имплантации в минералы и их синтетические аналоги (стенд.)

III Всероссийская конференция Центров коллективного пользования, 25–28 октября 2006, Казань

- Бухараев А.А., Коновалова О.А.: Экспериментальные исследования и подготовка специалистов в области нанотехнологий в отделе сканирующей зондовой микроскопии ФЦКП ФХИ (устн.)

Участие в выставках

Международные выставки

X Петербургский Международный экономический форум, 13–15 июня 2006, Санкт-Петербург

Представлен полноразмерный макет магнитной системы томографа ТМР-0.06-КФТИ.

Международный экономический форум “Презентация инвестиционного потенциала Татарстана”, 10–12 сентября 2006, Казань

Представлен инновационный проект “Разработка и изготовление низкополевых медицинских магнитно-резонансных томографов”.

I Инвестиционный саммит, 19–20 октября 2006, Лондон, Англия

Томографы ТМР-0.06-КФТИ и ТМР-0.12-КФТИ были представлены в виде баннеров и компьютерной презентации в составе экспозиции Республики Татарстан.

Российские выставки

Выставка, приуроченная к съезду предпринимателей Республики Татарстан, 15 декабря 2006, Казань

Низкополевые магнитно-резонансные томографы входили в состав экспозиции Казанского научного центра РАН.

Гости института

- Айххофф Уве, доктор, фирма Брукер БиоСпин, Райнштеттен, Германия (участие в международной конференции)
- Аугустињяк-Яблоков Мария, доктор, Институт молекулярной физики ПАН, Познань, Польша (совместные научные исследования)
- Берку Василе, доктор, Институт химических и физических процессов, Пиза, Италия (участие в международной конференции)
- Боуман Майкл, профессор, Тихоокеанская северо-западная национальная лаборатория, Ричланд, Вашингтон, США (участие в международной конференции)
- Бунтковский Герд, профессор, Институт физической химии, Йена, Германия (участие в международной конференции)
- ван дер Ест Артур, профессор, Университет Брока, Сант-Катаринес, Онтарио, Канада (участие в международной конференции)

- Кок-Шмидт Миеке, супруга профессора Яна Шмидта, Лейден, Нидерланды (участие в работе международного симпозиума)
- Лиджевски Стефан, доктор, Институт молекулярной физики, Познань, Польша (участие в международной конференции)
- Лиджевски Хуберт, доктор, Познань, Польша (участие в международной конференции)
- Любитц Вольфганг, профессор, директор Макс-Планк Института бионеорганической химии, Мюльхайм ан дер Рур, Германия (участие в международной конференции)
- Мёбиус Клаус, профессор, Свободный университет Берлина, Берлин, Германия (совместные научные исследования, участие в международной конференции)
- Мёбиус Ута, супруга профессора Клауса Мёбиуса Берлин, Германия (участие в международной конференции)
- Несмелов Юрий Евгеньевич, доктор, Университет Миннесоты, Миннеаполис, Миннесота, США (участие в международном симпозиуме)
- Охта Хитоши, профессор, Университет Кобы, Коба, Япония (участие в международном симпозиуме)
- Рееерсе Эдвард Джон, доктор, Макс-Планк Институт бионеорганической химии, Мюльхайм ан дер Рур, Германия (участие в международной симпозиуме)
- Сильвен Маркуэ, доктор, Университет Прованса, Марсель, Франция (участие в международной конференции)
- Томас Дэвид, профессор, Университет Миннесоты, Миннеаполис, Миннесота, США (участие в международном симпозиуме)
- Фит Ханс Мартин, профессор, Свободный университет Берлина, Берлин, Германия (участие в международной конференции)
- Хансон Грем Ричард, профессор, Университет Квинсленда, Санта-Лючия, Квинсленд, Австралия (участие в международной симпозиуме)
- Шильгериус Сильвия, редактор издательства Шпрингер, Вена, Австрия (участие в международной конференции)
- Шмидт Ян, профессор, Лейденский университет, Лейден, Нидерланды (участие в международном симпозиуме)
- Шписс Ханс Вольфганг, профессор, Макс-Планк Институт исследования полимеров, Майнц, Германия (участие в международной конференции)
- Штелик Бригитта, супруга профессора Дитмара Штелика, Берлин, Германия (участие в международной конференции)
- Штелик Дитмар, профессор, Свободный университет Берлина, Берлин, Германия (совместные научные исследования и участие в международной конференции)
- Алексеев Аркадий Владимирович, член-корр. РАН, профессор, зам. директора “Агентства по управлению имуществом РАН” Президиума РАН, Москва (участие в праздновании юбилея института)
- Ацаркин Вадим Александрович, профессор, Институт радиотехники и электроники РАН, Москва (участие в международной конференции)
- Багаев Сергей Николаевич, академик, член Президиума РАН, член Бюро ОФН РАН, директор Института лазерной физики СО РАН, Москва (участие в международной конференции)
- Багрянская Елена Григорьевна, профессор, Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Башаров Асхат Максудович, профессор, РНЦ “Курчатовский институт”, Москва (участие в международной молодёжной научной школе)
- Билалов Ренат Харисович, зам. директора Инвестиционно-венчурного фонда РТ, Казань (проведение семинара “Пятьдесят лучших инновационных идей Республики Татарстан”)
- Валиев Камиль Ахметович, академик, советник РАН, Физико-технологический институт РАН, Москва (участие в выездной научной сессии Научного совета РАН по физике конденсированных сред и международной конференции)
- Валиева Венера Салыховна, супруга академика Камиля Ахметовича Валиева, Москва (участие в международной конференции)
- Васильев Николай Александрович, к.ф.-м.н., Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург (участие в семинаре лаборатории нелинейной оптики)
- Воеводская Марианна Владиславовна, к.х.н., аппарат Президиума РАН, Москва (участие в работе международной конференции)
- Горелик Виталий Романович, мл. науч. сотр., Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Дзюба Сергей Андреевич, профессор, директор Института химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Жидомиров Георгий Михайлович, профессор, академик РАЕН, Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Забеднов Павел Владимирович, директор, ФГУП “Внештехника”, Москва (участие в праздновании юбилея института)
- Заяц Виктор Анатольевич, к.ф.-м.н., учёный секретарь ОФН РАН, Москва (участие в выездной сессии ОФН и праздновании юбилея института)
- Кобылин Григорий Николаевич, ст. науч. сотр., Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск (совместные научные исследования)
- Копаев Юрий Васильевич, член-корр. РАН, член Бюро РАН, директор ОФТТ ФИАН, Москва (участие в выездной сессии ОФН и праздновании юбилея института)

- Крохин Олег Николаевич, академик, член Бюро ОФН РАН, директор Отделения физического института им. П. Н. Лебедева РАН, Москва (участие в выездной научной сессии ОФН и праздновании юбилея института)
- Круппа Александр Иванович, ст. науч. сотр., Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Кулик Леонид Викторович, науч. сотр., Институт кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (совместные научные исследования)
- Лёшина Татьяна Викторовна, профессор, зав. лабораторией, Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Маймистов Андрей Иванович, профессор, Московский инженерно-физический институт, Москва (участие в международной молодёжной научной школе)
- Маненков Александр Алексеевич, профессор, Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва (участие в выездной научной сессии Научного совета РАН по физике конденсированных сред и работе международной конференции)
- Марьясов Александр Григорьевич, ст. науч. сотр., Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Масюк Алексей Владимирович, менеджер, фирма “Системы для микроскопии и анализа”, Москва (поставка оборудования)
- Менский Михаил Борисович, профессор, ФИАН им. П. Н. Лебедева, Москва (участие в международной молодёжной научной школе)
- Петров Сергей Валентинович, зам. генерального директора ООО “Брукер”, Москва (участие в праздновании юбилея института)
- Прудников Владимир Васильевич, профессор, зав. кафедрой, Омский государственный университет, Омск (совместные научные исследования)
- Пуртов Пётр Александрович, профессор, Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Русецкий Георгий Александрович, к.ф.-м.н., Институт физики твёрдого тела и полупроводников НАНБ, Минск (участие в международной молодёжной научной школе)
- Сагдеев Ренад Зиннурович, академик, советник РАН, зам. председателя СО РАН, директор Международного томографического центра СО РАН, Новосибирск (участие в работе международной конференции)
- Сазонов Сергей Владимирович, профессор, РНЦ “Курчатовский институт”, Москва (участие в международной молодёжной научной школе)
- Сарваров Фарит Сарварович, проректор по учебно-методической работе, Камская государственная инженерно-экономическая академия, Набережные Челны (участие в работе международной конференции)
- Смирнов Александр Иванович, профессор, Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Москва (участие в выездной научной сессии Научного совета РАН по физике конденсированных сред и праздновании юбилея института)
- Стась Дмитрий Владимирович, ст. науч. сотр., Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Сухоруков Анатолий Петрович, академик РАЕН, заслуженный профессор Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва (участие в международной молодёжной научной школе)
- Тимофеев Владислав Борисович, академик, член Бюро ОФН, Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка (участие в выездной научной сессии ОФН и праздновании юбилея института)
- Хасанов Олег Хайруллович, вед. науч. сотр., Институт физики твёрдого тела и полупроводников НАНБ, Минск (участие в работе Всероссийской школы-семинара)
- Чекалин Сергей Васильевич, профессор, зав. лабораторией, Институт спектроскопии РАН, Москва (участие в выездной научной сессии ОФН и праздновании юбилея института)
- Шакиров Станислав Рудольфович, мл. науч. сотр., Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск (участие в международной конференции)
- Швецова Марина Евгеньевна, гл. специалист аппарата ОФН, Москва (участие в выездной сессии ОФН и праздновании юбилея института)

ФИЗТЕХПРЕСС
2007



www.kfti.knc.ru