

Коуровка—2008

*XXXII Международная
зимняя школа
физиков-теоретиков*

*"Зеленый мыс", Новоуральск
Свердловская обл.
25 февраля - 2 марта 2008 г.*

Тезисы докладов



Екатеринбург - 2008

Российская Академия Наук
Министерство образования Российской Федерации
Институт физики металлов Уральского отделения РАН
Новоуральский государственный технологический институт

XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка—2008»

«Зеленый мыс», Новоуральск, Свердловская обл.
25 февраля—2 марта 2008 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Екатеринбург
2008

Финансовая поддержка

Российский фонд фундаментальных исследований
Фонд некоммерческих программ «Династия»
Институт физики металлов УрО РАН
Уральское отделение Российской академии наук

Программный комитет

Изюмов Ю.А. — академик РАН, ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург (председатель
программного комитета)
Садовский М.В. — академик РАН, Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург
Борисов А.Б. — д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Меньшенин В.В. — д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Скрябин Ю.Н. — д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Коротин М.А. — д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Москвин А.С. — д.ф.-м.н., Уральский государственный университет, г. Екатеринбург
Бучельников В.Д. — д.ф.-м.н., Челябинский государственный университет (ЧелГУ),
г. Челябинск
Куркин М.И. — д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Шавров В.Г. — д.ф.-м.н., Институт радиотехники и электроники РАН, г. Москва

Оргкомитет

Ляпилин И.И. — д.ф.-м.н., Институт физики металлов (ИФМ) УрО РАН,
г. Екатеринбург (председатель организационного комитета)
Кобелев А.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург (заместитель председателя)
Дружинин А.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Умергалина О.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Кулеев И.И. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Зарубин А.В. — к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Агзамова П.А. — ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Бакулина Н.Б. — ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Дерягина И.Л. — ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург
Исупова Н.Н. — ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург

«Коуровка - XXXII»

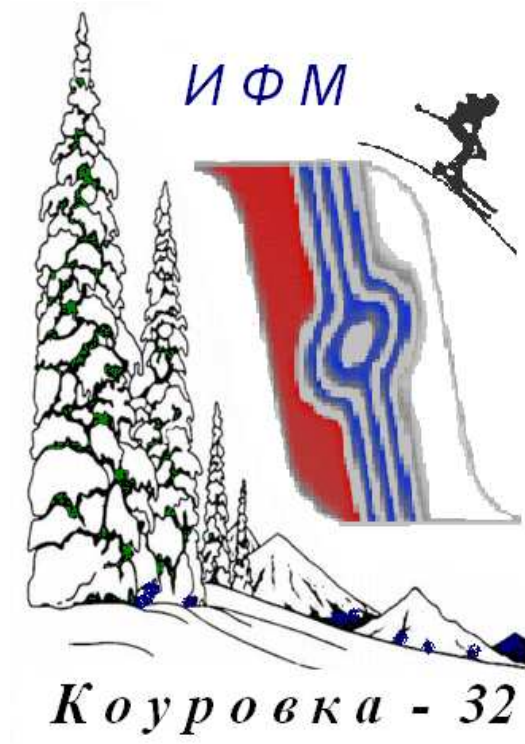
Мы приезжаем на Международную зимнюю школу физиков-теоретиков уже в 32-ой раз. Начиная с 1961 года, первой "Коуровки", школа проводится регулярно, без единого пропуска. Первые 15 "Коуровок" проводились ежегодно, последние — раз в два года. Эта традиция ответственно поддерживается энтузиастами из Института физики металлов УрО РАН, но важен вклад всех участников нашей школы, которые делают ее каждый раз интересной и актуальной. К этому всякий раз добавляет успеха школе замечательная уральская зима и прекрасная природа тех мест, где школа проводится.

На этот раз мы выбрали "Зеленый мыс" в качестве базы нашей школы, на берегу горного озера Таватуй — жемчужины Среднего Урала. Приятно сознавать, что здесь же рядом находится гигантское предприятие — комбинат по обогащению изотопов, сыгравший огромную роль в обороноспособности нашей страны и развитии атомной энергетики. Там все проникнуто духом физики; над созданием этого уникального производства работали наши выдающиеся физики: академик И. К. Кикоин, академик Ю. М. Каган и многие другие. В течение многих десятилетий работники комбината бережно относились к окружающей природе, так что мы, находясь в "Зеленом мысу", не ощущаем никакой физической близости гигантского производства, но мы чувствуем духовные флюиды физики, как бы идущие оттуда, и исполнены чувства гордости за наших легендарных старших коллег, совершивших полвека назад великий научный подвиг.

Время течет неумолимо, и мы всё чаще теряем наших старших товарищей. Недавно на 84-ом году ушел из жизни выдающийся ученый член-корреспондент РАН Евгений Акимович Туров. Он не был участником первой "Коуровки", поскольку находился в это время в командировке во Франции, но все последующие годы он был активным участником и организатором многих "Коуровок". На наших лекциях и семинарах мы почтим его добрую память.

Следующая "Коуровка" будет в 2010 году — в год 100-летия со дня рождения основателя уральской зимней школы академика Сергея Васильевича Вонсовского. Мы должны посвятить её этому замечательному событию. Следующую "Коуровку" можно считать юбилейной, поскольку прошло почти 50 лет с момента первой "Коуровки" 1961 года (формально 50-летний юбилей приходится на время между двумя "Коуровками" 2010 и 2012 года). Сергей Васильевич последний раз участвовал в "Коуровке-25" в 1994 году здесь же в пансионате "Зеленый мыс".

А участникам нынешней "Коуровки-2008" я желаю дальнейших успехов в творческой работе на благо теоретической физики, здоровья и неперемного участия во многих последующих Уральских зимних школах.



Оглавление

«Коуровка - XXXII»	3
------------------------------	---

”S“ Сильно коррелированные системы 17

Материалы с сильными электронными корреляциями, <i>Изюмов Ю.А.</i>	17
Новые результаты в исследовании ВТСП, <i>Плакида Н.М.</i>	18
Переход Мотта - Хаббарда и локализация Андерсона: DMFT+ Σ подход, <i>Садовский М.В., Кучинский Э.З., Некрасов И.А.</i>	19
Спонтанные токи и поляризация в моттовских диэлектриках: верно ли, что электроны локализованы?, <i>Хомский Д.И.</i>	20
Основное состояние и энергетическая структура сильно коррелированных систем при учете межузельного кулоновского взаимодействия, <i>Вальков В.В., Коровушкин М.М.</i>	21
О происхождении пиков нейтронного рассеяния в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, <i>Андреев А.И., Ерёмин М.В., Ерёмин И.М.</i>	22
Образование бесщелевой спиновой жидкости при упорядочении e_g орбиталей, <i>Аплеснин С.С., Москвин А.И.</i>	23
Эволюция одночастичного спектра для решеточной модели взаимодействия электронов с двухуровневыми подсистемами, <i>Анохин А.О., Зарубин А.В., Ирхин В.Ю.</i>	24
Роль затухания спиновых возбуждений при формировании несоизмеримых пиков в купратах, <i>Барабанов А.Ф., Максимов Л.А.</i>	25
Особенности кинетики в двумерном допированном антиферромагнетике, <i>Барабанов А.Ф., Белемук А.М., Максимов Л.А.</i>	26
Влияние спиновых флуктуаций на область реализации сверхпроводящей фазы хаббардовских фермионов, <i>Головня А.А., Вальков В.В.</i>	27
Влияние спин-флуктуационного рассеяния на описание сверхпроводящей фазы в периодической модели Андерсона, <i>Вальков В.В., Дзедзисашвили Д.М.</i>	28
К теории динамической зарядовой восприимчивости слоистых купратов, <i>Ерёмин М.В., Алеев А.А., Ерёмин И.М.</i>	29
Детектирование коллективных движений в диэлектрических спектрах: новая интерпретация обобщенного закона Фогеля-Фалчера-Таммана, <i>Нигматуллин Р.Р.</i>	30
Фермижидкостные явления в модели Хаббарда, <i>Зайцев Р.О.</i>	31

О влиянии межузельных взаимодействий на энергетическую структуру модели Андерсона в режиме сильных корреляций, <i>Вальков В.В., Коровушкин М.М.</i>	32
Свойства систем с тяжелыми фермионами и новые ЭПР-результаты, <i>Кочелаев Б.И.</i>	33
Фазовое расслоение в сильнокоррелированных электронных системах с двумя типами носителей тока, <i>Кугель К.И., Рахманов А.Л., Сбойчаков А.О.</i>	34
Оптическое правило сумм для сильнокоррелированных систем в псевдощелевом состоянии, <i>Кулеева Н.А., Кучинский Э.З., Некрасов И.А., Садовский М.В.</i>	35
Оптическая проводимость сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии, <i>Кучинский Э.З., Некрасов И.А., Садовский М.В.</i>	36
Фуллерен Au_{16} и золотая нанотрубка в модели Хаббарда, <i>Миронов Г.И.</i>	37
Исследование структурных элементов нанотрубок - углеродных колец в модели Хаббарда, <i>Миронов Г.И.</i>	38
Кинетические коэффициенты в модели Хаббарда, <i>Зайцев Р.О., Михайлова Ю.В.</i>	39
Фазовая диаграмма 2D плакетно-деформированного магнетика в магнитном поле, <i>Вальков В.В., Мицкан В.А.</i>	40
Необычные наноскопические носители заряда в квазидвумерных купратах, <i>Москвин А.С., Панов Ю.Д.</i>	41
Отличия "разрушения" поверхности Ферми псевдощелью в дырочных и электронных ВТСП, <i>Некрасов И.А., Кокорина Е.Е., Кучинский Э.З., Пчёлкина З.В., Садовский М.В.</i>	42
Скейлинг и затухание для двумерной фрустрированной модели Гейзенберга, <i>Михеенков А.В., Барабанов А.Ф.</i>	43
Экситоны Френкеля как композитные бозоны: теория многих тел, <i>Погосов В.В., Combescot M.</i>	44
Влияние дальних перескоков на частотную и квазиимпульсную зависимости магнитной восприимчивости в сильно коррелированных системах, <i>Вальков В.В., Пушкарев М.С.</i>	45
Магнитные и спектральные свойства модели Гайзенберга и $t - J$ модели на двумерной треугольной решетке, <i>Рубин П.Э., Шерман А.В.</i>	46
Электронные корреляции и магнитные свойства переходных металлов с учетом вырождения, <i>Шилов В.Е., Шилова Е.В.</i>	47
Метод точной диагонализации с сохранением полного спина и учетом точечной симметрии для двумерного изотропного гайзенберговского антиферромагнетика, <i>Синицын В.Е., Овчинников А.С., Бострем И.Г.</i>	48
Непертурбативная теория экранирования магнитных моментов в неупорядоченном металле, <i>Журавлев А.К.</i>	49
Свойства основного состояния гайзенберговского антиферромагнетика с $S=1$ на гексагональной решетке, <i>Бострем И.Г., Овчинников А.С., Синицын В.Е.</i>	50
Исследование конечных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда, <i>Мурзашев А.И.</i>	51

Модель Бозе-Хаббарда для триплетных бозонов в модельном манганите, <i>Аввакумов И.Л., Москвин А.С.</i>	52
Вычисление температуры Нееля и температурной зависимости подрешеточной намагниченности для слоистого антиферромагнетика с треугольной решеткой в слое, <i>Игнатенко А.Н., Катанин А.А., Ирхин В.Ю.</i>	53
Представление <i>sd</i> -модели точными уравнениями в вариационных производных, <i>Чащин Н.И.</i>	54
Необычный орбитальный порядок e_g -электронов ионов Mn^{3+} в соединении $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$, <i>Коротин М.А., Белозеров А.С., Эктов А.В.</i>	55
Компьютерное моделирование фазового перехода под давлением антиферромагнитный диэлектрик – парамагнитный металл в Fe_2O_3 , <i>Кожевников А.В., Анисимов В.И., Кунеш Я., Коротин Д.М., Коротин М.А.</i>	56
Построение реалистичных моделей для соединений переходных металлов с помощью функций Ванье, <i>Пчёлкина З.В.</i>	57

”N“ Нелинейные явления и неустойчивости

61

Перспективы создания элементной базы полномасштабных квантовых компьютеров на основе твердотельной нанотехнологии, <i>Кокин А.А.</i>	61
Нутационные двумерные структуры в магнетиках, <i>Борисов А.Б., Рыбаков Ф.Н.</i>	62
Модуляционная неустойчивость и Паде-аппроксимация трансцендентов Пенлеве, <i>Новокшенов В.Ю.</i>	63
Сильно вырожденная система уравнений фазового поля, <i>Федоров В.Е.</i> .	64
Нелинейные волны на поверхности диэлектрической жидкости в тангенциальном электрическом поле, <i>Зубарев Н.М., Зубарева О.В.</i>	65
Анализ уравнений циклотронного авторезонанса, <i>Калякин Л.А.</i>	66
Авторезонанс в ферромагнетиках, <i>Шамсутдинов М.А., Калякин Л.А.</i> . .	67
Нелинейная теория экранирования заряженной примеси двумерными электронами в сильном магнитном поле, <i>Васильченко А.А.</i>	68
Анализ неустойчивости системы нелинейных уравнений теории спиновых флуктуаций с приложением к инвару $Fe_{0.65}Ni_{0.35}$, <i>Резер Б.И., Мельников Н.Б.</i>	69
Изучение возбуждения и эволюции магнитных неоднородностей солитонного и пульсонного типа в ферро- и антиферромагнетиках с одно и двумерной модуляцией магнитных параметров, <i>Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р.</i>	70
Нелинейное взаимодействие и поступательное движение связанных осцилляторов, <i>Асадуллин Ф.Ф., Котов Л.Н., Власов В.С., Полешиков С.М., Асадуллина Н.С., Коледов В.В., Шавров В.Г.</i> .	71
Исследование генерации акустических гармоник в феррите при электромагнитном возбуждении, <i>Безносиков Д.С., Котов Л.Н.</i> . .	72

Исследование нелинейной ВЧ и СВЧ магнитоупругой динамики в ферритовой плёнке, <i>Власов В.С., Котов Л.Н., Асадуллин Ф.Ф., Щеглов В.И., Шавров В.Г.</i>	73
Топологические дефекты в слоевых фазах и каркасных наноструктурах, <i>Зинатулина Ю.А., Беленков Е.А.</i>	74
Нелинейные вязко-упругие свойства образцов биологических тканей, <i>Кобелев А.В., Кобелева Р.М., Проценко Ю.Л.</i>	75
Изучение явления структурной самоорганизации и нелинейных явлений в удароопасных массивах горных пород, <i>Хачай О.А., Хачай О.Ю.</i>	76
X_α -ДВМ оценка устойчивости электронной и решеточной подсистем в сложных оксидах меди и железа, <i>Юрьева Э.И.</i>	77
Новые неинвазивные методы "прочтения" произвольной случайной последовательности, <i>Нигматуллин Р.Р.</i>	78
Обзор патентов по квантово-механическим компьютерам, <i>Епифанов С.С.</i>	79
Надежность квантово-механического компьютера - как частного случая СВТ, <i>Епифанов С.С.</i>	80
Расчет надежности квантово-механического компьютера, <i>Епифанов С.С.</i>	80

"F" Фазовые переходы и критические явления

83

Фазовые переходы в манганитах лантана с колоссальным магнитосопротивлением, <i>Бибенин Н.Г., Зайнуллина Р.И., Устинов В.В.</i>	83
Критические свойства спиновых систем с немагнитными примесями, <i>Муртазаев А.К.</i>	84
Магнитные переходы с сопутствующим параметром порядка в оксидах RMn_2O_5 , <i>Меньшенин В.В.</i>	85
Ближний магнитный порядок в трехмерной XXZ - модели выше и ниже температуры магнитного упорядочения, <i>Медведев М.В.</i>	86
Спиновые флуктуации как причина структурных фазовых переходов в 4f- и 5f- металлах, <i>Солонцов А., Мирмельштейн А.</i>	87
Критические индексы из теоретико-полевой ренормгруппы: новые результаты и нерешенные проблемы, <i>Суслов И.М.</i>	88
Теория флуктуирующего поля для ферромагнетиков с локализованными моментами, <i>Гребенников В.И.</i>	89
Локализованные зарядовые состояния и фазовое разделение в рамках феноменологической теории фазовых переходов, <i>Мамин Р.Ф., Кабанов В.В.</i>	90
Магнитная фазовая диаграмма треугольной решетки спиновых цепочек, <i>Кудасов Ю.Б.</i>	91
Фазовые переходы первого рода в простых молекулярных системах: метастабильные состояния, метастабильные фазовые равновесия, конечные критические точки, <i>Байдаков В.Г.</i>	92

Универсальное поведение ферромагнетика $CePd_{1-x}Rh_x$ в окрестности критической точки квантового фазового перехода, <i>Попов К.Г., Шагинян В.Р.</i>	93
Влияние электрического поля на параметры ферроэлектрических переходов первого и второго рода, <i>Куркин М.И., Бакулина Н.Б., Меньшенин В.В., Туров Е.А.</i>	94
Физические модели доменных структур для пластин $ErFeO_3$ с механически напряженным слоем в области спонтанного спин-переориентационного фазового перехода, <i>Беляева А.И., Баранова Е.В.</i>	95
Неизотермические эффекты при молекулярно-динамическом моделировании процессов кристаллизации и плавления, <i>Мирзоев А.А.И., Мальцев И.А.</i>	96
Энергетический спектр фермиевских конфигурационных возбуждений и классификация структурных состояний бинарной атомной системы, <i>Небогатиков Н.М.</i>	97
Описание переходов золь – слабый гель с использованием ультраметрической динамической теории молекулярного поля, <i>Васин М.Г.</i>	98
Точные решения для равновесных конфигураций капли проводящей жидкости в электрическом поле, <i>Зубарев Н.М., Зубарева О.В.</i>	99
О связи атомной и электронной структуры в расплавах металлов при высоких температурах, <i>Воронцов А.Г., Куц Д.А.</i>	100
Межфазное натяжение на границе жидкого металла с ионным расплавом: термодинамический подход, <i>Кобелев А.В., Кобелев О.А.</i>	101
Термодинамика бинарных ассоциированных систем с направленными связями, <i>Рыльцев Р.Е., Сон Л.Д., Тутынина О.И.</i>	102
Статические свойства магнитных дипольных спиновых стекол, <i>Бузиелло Г., Газеева Е.В., Усманова С.М., Хайбутдинова И.Р., Самородов И.В.</i>	103
Фазовые превращения в сплавах Гейслера с инверсией обменного взаимодействия в магнитном поле, <i>Загребин М.А., Бучельников В.Д., Таскаев С.В., Энтель П.</i>	104
Полиморфизм допированных антимоанатов, <i>Захарьевич Д.А., Бурмистров В.А.</i>	105
Энергия образования сигма-фазы сплава Cr-Fe, <i>Каблиман Е.А., Мирзоев А.А.</i>	106
Твёрдофазный синтез на основе сложных оксидов сурьмы в системе $(1-X)K_2CO_3 - X Na_2CO_3 - Sb_2O_3 - WO_3$ при нагревании, <i>Луцицкая Ю.А., Бурмистров В.А.</i>	107
Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры сплава Гейслера Co_2CrAl , <i>Марченков В.В., Свяжин А.Д., Коротин М.А., Шредер Е.И., Герасимов Е.Г., Воронин В.И.</i>	108
Структурные фазовые превращения в сплавах на основе Ni_2MnGa с магнитоуправляемым эффектом памяти формы, <i>Марченкова Е.Б., Укусников А.Н., Юрченко Л.И., Королев А.В., Коуров Н.И., Пушин В.Г.</i>	109
Моделирование процессов фазообразования в SiC, <i>Агалямова Э.Н., Беленков Е.А.</i>	110

Моделирование структуры углеродных фаз из фуллеренов и нанотрубок, <i>Али-Паша В.А., Беленков Е.А., Каримов О.И.</i>	111
Закономерности формирования структуры карбинокубановых, карбиноректангулановых и карбиноалмазных фаз, <i>Беленков Е.А., Грешняков В.А., Мавринский В.В.</i>	112
Изменение структурных параметров фазы переменного состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$) при ионном обмене, <i>Меженина О.А., Бурмистров В.А.</i>	113
Методы анализа формы профилей рентгеновских дифракционных линий для исследования фазовых переходов в углеродных материалах, <i>Некраш Е.В., Беленков Е.А.</i>	114
Плато намагниченности и смена знака магнетокалорического эффекта в ферримагнитной спиновой цепочке, <i>Боярченков А.С., Бострем И.Г., Овчинников А.С.</i>	115
Влияние дефектов структуры на динамические характеристики распространения ультразвука при фазовых переходах второго рода, <i>Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А.</i>	116
Влияние дефектов структуры на критические характеристики твердых тел при фазовых переходах второго рода, <i>Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А.</i>	117
Ренорм-групповое описание неравновесной критической релаксации, <i>Прудников В.В., Прудников П.В., Калашников И.А.</i>	118
Расчет электронной структуры поливинилиденфторида и продуктов его карбонизации, <i>Сапожникова Т.С., Мирзоев А.А.</i>	119
Моделирование карбонизации полимерных пленок, <i>Шахова И.В., Беленков Е.А.</i>	120
Влияние примеси алюминия на зонную структуру и некоторые свойства гексагонального карбида вольфрама, <i>Суетин Д.В., Шейн И.Р., Ивановский А.Л.</i>	121
Моделирование магнетокалорического эффекта в сплавах Ni – Mn – Ga методом Монте – Карло, <i>Соколовский В.В., Бучельников В.Д., Таскаев С.В.</i>	122
Моделирование антиферромагнитных кластеров в сплавах Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) методом Монте-Карло, <i>Таскаев С.В., Бучельников В.Д., Соколовский В.В.</i>	123
Изоструктурные фазовые переходы в ОЦК цирконии, связанные с особенностями динамики решетки под давлением, <i>Трубицын В.Ю., Долгушева Е.Б.</i>	124
Исследование нанокompозитных пленок методами рентгеновской рефлексометрии и ФМР, <i>Турков В.К., Власов В.С., Ефимец Ю.Ю., Котов Л.Н., Носов Л.С., Петраков А.П., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.</i>	125
Решение краевых задач теории фильтрации в неоднородной среде, <i>Усманова С.М., Сабурова Р.В.</i>	126
Решение краевых задач вытеснения нефти и газа водой, <i>Усманова С.М., Сабурова Р.В.</i>	127

Неравновесные динамические эффекты (старение, омоложение и память) в одномерных классических спиновых цепочках, Бузиелло Г., Газеева Е.В., Сабурова Р.В., Хайбутдинова И.Р., Чугунова Г.П.	128
Исследование фазовых переходов в моделях магнитных сверхрешеток методами Монте-Карло, Хизриев К.Ш., Муртазаев А.К., Уздин В.М.	129
Различные типы температурных зависимостей деформационных характеристик и пространственная анизотропия ядра сверхдислокаций в интерметаллиде Ti_3Al , Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е.	130

”Е“ Электронные свойства низкоразмерных систем

133

Макроскопический симметричный подход в теории магнетизма, Меньшенин В.В., Куркин М.И., Николаев В.В.	133
Неравновесный статистический оператор и его приложения к кинетике парамагнитных явлений в проводящих кристаллах, Ляпилин И.И.	134
О формировании косвенного обменного взаимодействия через спиновые димеры в квазинизкомерных магнетиках, Вальков В.В., Гуськов Д.А.	135
Исследование магнитных свойств пироксенов - нового класса низкоразмерных магнетиков, Стрельцов С.В., Хомский Д.И.	136
Магнитооптика одномерных фотонных кристаллов, Виноградов А.П., Дорофеев А.В., Мерзликин А.М., Грановский А.Б., Лисянский А.А., Иноуэ М.	137
Взаимосвязь оптического эффекта Магнуса, оптического эффекта Холла и геометрического двулучепреломления. Связь фазы Берри с обратным оптическим эффектом Магнуса, Садыков Н.Р.	138
Вывод системы материальных уравнений при взаимодействии излучения с удлиненными наночастицами, Садыков Н.Р.	139
О возможности обнаружения эффектов киральности магнитооптическим методом, Дружинин А.В., Варенков В.И., Кузьмин Ю.И.	140
Резонансное туннелирование электрона через потенциальный рельеф спинового димера, Вальков В.В., Аксенов С.В.	141
Влияние ян-теллеровских ионов на упругие, магнитные и транспортные характеристики слаболегированных лантан-стронциевых манганитов, Богданова Х.Г., Булатов А.Р., Голенищев-Кутузов В.А., Потапов А.А.	142
Исследование вклада одноионной анизотропии в ширину линии ЭПР манганитов $La_{1-x}Ca_xMnO_3$, Яцык И.В., Еремина Р.М., Муковский Я.М.	143
Парамагнитные центры в $CuTe_2O_5$, Гаврилова Т.П., Еремина Р.М.	144
Фотонные кристаллы с контрастом на затухании, Ерохин С.Г., Лисянский А.А., Дейч Л.И., Мерзликин А.М., Виноградов А.П., Грановский А.Б.	145
Спиновые состояния иона Co^{3+} в кристалле $LaCoO_3$, Ефремов А.В., Ларин А.В., Никифоров А.Е., Попов С.Э., Агзамова П.А.	146

Магнитные свойства $RTiO_3$ и RVO_3 , <i>Можегоров А.А., Ларин А.В., Никифоров А.Е., Гончарь Л.Э.</i>	147
Магнитные сверхтонкие взаимодействия на изотопе ^{17}O в манганитах, <i>Агзамова П.А., Никифоров А.Е.</i>	148
Особенности антиферромагнитного упорядочения в $CaMnO_3$ по данным ЯМР ^{17}O , <i>Михалев К.Н., Бузлуков А.Л., Литвинов И.Е., Нигаматьянова З.Н., Верховский С.В., Якубовский А.Ю., Кауль А.Р., Кумагаи К., Фурукава Ю., Трокинер А.</i>	149
Гигантский динамический изотоп-эффект в $(La_{0.25}Pr_{0.75})_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ по данным ЯМР ^{139}La , <i>Михалев К.Н., Литвинов И.Е., Нигаматьянова З.Н., Якубовский А.Ю., Кауль А.Р.</i>	150
Необычное поведение контактов Джозефсона с ферромагнитной прослойкой, неоднородных в плоскости, <i>Куприянов М.Ю., Пугач Н.Г., Ведяев А.В.</i>	151
Исследование зависимости магнитных и магнитооптических свойств наномультислойной системы $[(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_{35}(Al_2O_3)_{65}(X)/\alpha-Si:H(Y)]_{30}$ от толщины полупроводникового слоя, <i>Ганьшина Е.А., Перов Н.С., Пхонгхирун С., Мигунов В.Е., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.</i>	152
Моделирование магнитной структуры сверхрешеток Fe/V с переменной толщиной слоев железа, <i>Маслов Д.А., Кудасов Ю.Б.</i>	153
Квантовый спектр возбуждений конечнослоистого ферромагнетика на закреплённой антиферромагнитной подложке, <i>Вальков В.В., Шкляев А.А.</i>	154
Эффект близости в би-пленке ферромагнитный металл/сверхпроводник в продольном магнитном поле, <i>Авдеев М.В., Прошин Ю.Н., Хусаинов М.Г., Царевский С.Л.</i>	155
Эффект близости в несоразмерных структурах ферромагнетик-сверхпроводник, <i>Прошин Ю.Н., Лучкин Р.Г., Хусаинов М.Г.</i>	156
Критическая температура сверхрешетки ферромагнетик-сверхпроводник с учетом межэлектронного взаимодействия, <i>Попов И.И., Хусаинов М.М., Хусаинов М.Г., Прошин Ю.Н.</i>	157
Триpletное спаривание и геликоидальные фазы в сверхпроводниках, <i>Кабанов В.В.</i>	158
Магнитная структура поверхностей и интерфейсов во внешнем магнитном поле, <i>Уздин С.В.</i>	159
Неколлинеарный магнетизм в спиновых пружинах, <i>Уздин В.М., Молчанова М.В.</i>	160
Особенности классического эффекта Холла в тонких металлических пленках, <i>В.М. Березин, А.А. Соловьев</i>	161
Поглощение электромагнитных волн в структуре немагнитный проводник-ферромагнетик, <i>Буцько Л.Н., Бучельников В.Д., Бычков И.В.</i>	162
Аномалии отражения и преломления электромагнитных волн на границе раздела “немагнитный диэлектрик – легкоосный антиферромагнетик” в скрещенных магнитном и электрическом полях, <i>Кулагин Д.В., Савченко А.С., Тарасенко С.В.</i>	163

Поверхностные поляритоны в 1-D гиротропном магнитном фотонном кристалле в постоянном внешнем электрическом поле, Кулагин Д.В., Савченко А.С., Тарасенко С.В.	164
Резонансное изменение кинетических коэффициентов в двумерных системах со спин-орбитальным взаимодействием в присутствии СВЧ излучения, Ляпилин И.И., Патраков А.Е.	165
Магнитостатическая задача для бесконечной полосы с конечной полостью, Дякин В.В., Раевский В.Я., Умергалина О.В.	166
Восстановление магнитной проницаемости по спектрам отражения и прохождения ЭМ волны методом Галёркина, Емец В.Н., Бычков И.В., Бучельников В.Д.	167
Диэлектрические и магнитные спектры композитных плёнок $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$, Уляшев А.М., Беляев Ю.Н., Котов Л.Н., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.	168
Исследование отражения СВЧ-волн от металл-диэлектрических и металл-сегнетоэлектрических пленок, Гуцин Н.Н., Котов Л.Н., Петрунёв С.Н., Антонец И.В., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.	169
Особенности ФМР-спектров пленок с фазами: металл-диэлектрик, сегнетоэлектрик, Ефимец Ю.Ю., Котов Л.Н., Власов В.С., Турков В.К., Носов Л.С., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.	170
Расчет средних полей в поликристаллическом феррите, Асадуллин Ф.Ф., Котов Л.Н., Власов В.С., Гольчевский Ю.В., Носов Л.С., Полещиков С.М., Асадуллина Н.С.	171
Высокочастотная переориентация тонких ферромагнитных пленок: однородная и неоднородная, Носов Л.С., Устюгов В.А.	172
Высокочастотная переориентация намагниченности однодоменных частиц путем частичного захвата в резонанс, Носов Л.С., Котов Л.Н., Асадуллин Ф.Ф.	173
Релаксация намагниченности в композитных пленках и их наноструктура, Котов Л.Н., Власов В.С., Носов Л.С., Петраков А.П., Турков В.К., Калинин Ю.Е.	174
Об изменении магнитной структуры ферромагнитных пластин высокочастотным полем, Голов А.В., Котов Л.Н., Носов Л.С.	175
Использование комбинаций полиномов для расчета магнитных спектров ферритов, Гольчевский Ю.В., Котов Л.Н.	176
Магнетизм бинарных и тройных диамагнитных ионных соединений, содержащих немагнитные <i>sp</i> -примеси в анионной подрешетке, Банников В.В., Шейн И.Р., Ивановский А.Л.	177
Исследование магнитной структуры цепочки с орбитальным упорядочением, Пискунова Н.И., Аплеснин С.С.	178
Влияние анизотропии четырехспинового обменного взаимодействия на свойства 2D квантовых магнетиков, Вальков В.В., Жолобова Н.Н., Валькова Т.А.	179
Условия формирования спиральных спиновых структур в магнетиках с коллективизированными электронами, Тимиргазин М.А., Аржников А.К.	180

Критическая температура наносистемы ферромагнетик / сверхпроводник / ферромагнетик с несоразмерными толщинами, <i>Лучкин Р.Г., Хусаинов М.Г., Прошин Ю.Н.</i>	181
Расчет коэффициента поглощения электромагнитного излучения неоднородной композитной структурой, <i>Анзулевич А.П., Бычков И.В., Бучельников В.Д.</i>	182
Отражение свч-излучения композитами с металло - ферритовым наполнителем, <i>Федий А.А., Бычков И.В., Бучельников В.Д.</i>	183
Отражение электромагнитной волны от слоистой структуры с бигиротропными слоями, <i>Бычков И.В., Селиванова Е.М., Бучельников В.Д.</i>	184
Исследование отражения СВЧ волн от тонких композитных плёнок, <i>Беляев Ю.Н., Котов Л.Н., Карпушов Е.Н.</i>	185
Отражающие и пропускающие свойства тонких слоев и многослойных структур при произвольных углах падения СВЧ волн, <i>Антонец И.В., Щеглов В.И.</i>	186
Исследование рельефа поверхности тонких металлических пленок, <i>Антонец И.В., Голубев Е.А.</i>	187
Электронная структура низкоразмерных координационных полимеров меди с лигандами тетразинового ряда, <i>Швачко Ю.Н., Бухвалов Д.В., Стариченко Д.В., Королев А.В., Курмаев Э.З., Устинов В.В., MacNaughton J.B., Moewes A.</i>	188
Парамагнитные комплексы с переносом заряда в мелано-протеиновых волокнах, <i>Байтмиров Д.Р., Стариченко Д.В., Конев С.Ф., Швачко Ю.Н.</i>	189
Влияние магнитного поля на смещение температуры структурного перехода в ферромагнетике с зонным эффектом Яна-Теллера типа сплава Ni_2MnGa , <i>Попков А.Ф., Шавров В.Г., Коледов В.В., Горячев А.В.</i>	190
Авторский указатель	191

Дополнение

197

Нелинейные возбуждения и паттерны на поверхности гидростатически сжатой оболочки, <i>Киселёв В.В., Долгих Д.В.</i>	197
Эффект "первого измерения" и магнитокалорические свойства сплава Гейслера $Ni_{2,19}Mn_{0,81}Ga$, <i>Коледов В.В., Ховайло В.В., Шавров В.Г., Кошкидько Ю.С., Скоков К.П.</i>	198
Список опечаток	199

”S“

Сильно коррелированные системы

МАТЕРИАЛЫ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Изюмов Ю.А.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. Ковалевской, 18
E-mail: yuri.izyumov@imp.uran.ru

Предлагается обзор [1] электронной структуры и основных физических свойств сильно коррелированных систем, построенных с участием элементов с незаполненными $3d$ -, $4d$ - и $5f$ - оболочками. К ним относятся чистые переходные, редкоземельные элементы, актиноиды, а также многочисленные классы химических соединений на их основе, включая различные окислы, в которых реализуются фазовые переходы металл-изолятор, купраты – высокотемпературные сверхпроводники, манганиты с колоссальным магнитоэлектрическим эффектом, f - системы с тяжелыми фермионами и кондо-изоляторами. Показывается, что низкоэнергетическая физика этих веществ описывается тремя базовыми моделями: моделью Хаббарда, sd -обменной моделью и периодической моделью Андерсона в условиях, когда энергия кулоновского отталкивания электронов на узле U , или sd - обменная энергия J порядка ширины зоны проводимости W . В этой ситуации нет малого параметра и требуются непертурбативные подходы. В лекции излагается один из таких подходов – теория динамического среднего поля ($DMFT$), в котором игнорируются пространственные и учитываются только динамические корреляции в системе. Показано, что такой подход, имеющий полное обоснование в пределе большой размерности пространства ($d \rightarrow \infty$), ухватывает всю физику сильнокоррелированных систем, позволяя описать совокупность наблюдаемых в них явлений. Расширение $DMFT$ по мере учета пространственных корреляций, а также зонной структуры конкретного вещества, позволяет получить количественное описание различных d - и f - систем. Бурно развивающаяся в последнее время $DMFT$ является универсальным и наиболее эффективным методом исследования самых различных веществ с сильной электронной корреляцией.

1. Ю.А.Изюмов, Э.З. Курмаев, Материалы с сильной электронной корреляцией, УФН, январь, (2008).

НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ В ИССЛЕДОВАНИИ ВТСП

Плакида Н.М.

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Моск. обл.

E-mail: : plakida@theor.jinr.ru

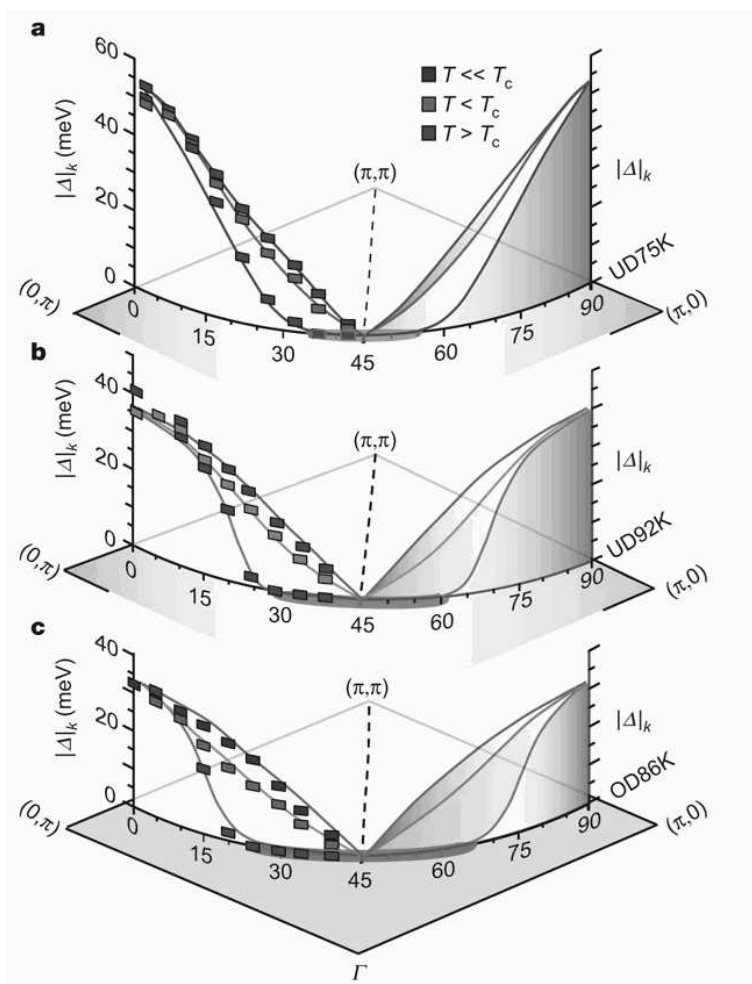


Рис. 1: Схематическая иллюстрация температурной зависимости энергетической щели и Ферми-дуги в k -пространстве для кристаллов Bi-2212: “underdoped” UD75K (a), UD92K (b), и “overdoped” OD86K (c). (T_c обозначены цифрой). Температура увеличивается от $T \ll T_c$ (верхняя кривая) до $T < T_c$ (средняя кривая) и $T > T_c$ (нижняя кривая). Ферми-дуги показаны жирными линиями вблизи угла 45° [1].

В докладе обсуждаются результаты недавних исследований энергетической щели в купратных сверхпроводниках методами рамановского рассеяния, фотоэмиссии с угловым разрешением, сканирующей туннельной спектроскопии, которые подтвердили картину **двух независимых щелей**: сверхпроводящей и псевдощели, как это показано на рисунке. Предложена теория, качественно описывающая наличие двух щелей [2].

1. Lee, W.S., et al., Nature **450**, 81 (2007).
2. Плакида Н.М., Удовенко В.С., ЖЭТФ **104**, 230 (2007).

ПЕРЕХОД МОТТА – ХАББАРДА И ЛОКАЛИЗАЦИЯ АНДЕРСОНА: DMFT+ Σ ПОДХОД

Садовский М.В., Кучинский Э.З., Некрасов И.А.

Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
E-mail: sadovski@iep.uran.ru

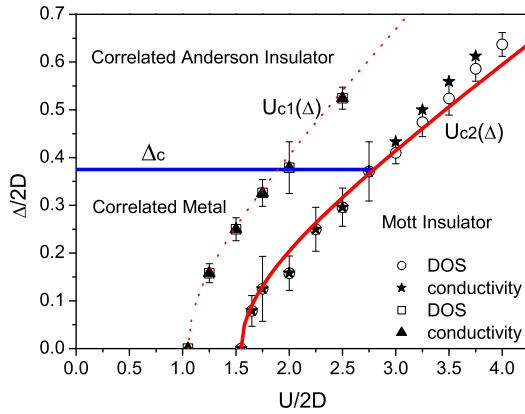


Рис. 1: Фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона – Хаббарда при $T = 0$. Δ – амплитуда случайного поля на узлах решетки, U – хаббардовское отталкивание, D – полуширина зоны. Точками показана граница области метастабильности, возникающей при уменьшении U из моттовского диэлектрика.

$\mathcal{P}(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\Delta^2}\right)$. Сильные электронные корреляции (хаббардовское отталкивание U) учитываются в рамках DMFT (NRG), а эффекты разупорядочения – в рамках соответствующего обобщения *самосогласованной теории локализации*. На фазовой диаграмме модели (при $T = 0$) выявлены фазы коррелированного металла, моттовского диэлектрика и коррелированного андерсоновского изолятора, определены границы устойчивости этих фаз. Границы существования фазы моттовского диэлектрика определяются как из характерного поведения плотности состояний, так и из особенностей динамической проводимости (образование моттовской щели). Граница области андерсоновского диэлектрика определяется обращением в нуль статической проводимости при $T = 0$ и в DMFT+ Σ приближении *не зависит* от величины хаббардовского отталкивания U . Дана полная картина эволюции плотности состояний и динамической проводимости с изменением основных параметров модели. Новым и необычным оказывается существование области параметров модели, где *увеличение беспорядка* вызывает переход из состояния моттовского диэлектрика в коррелированную *металлическую* фазу. Кратко обсуждается роль легирования и возможные обобщения для двумерного случая.

Работа поддержана грантами РФФИ 05-02-16301, 05-02-17244, 06-02-90537 и выполнялась в рамках программ фундаментальных исследований Президиума РАН “Квантовая макрофизика” и ОФН РАН “Сильно коррелированные электроны”.

1. Кучинский Э.З., Некрасов И.А., Садовский М.В. ЖЭТФ, **133** (2008).

Рассматривается общая проблема теоретического описания перехода металл – диэлектрик в сильно коррелированных и неупорядоченных системах, где конкурируют два основных физических механизма такого перехода – переход Андерсона и переход Мотта – Хаббарда. Обобщенный DMFT + Σ подход, пренебрегающий интерференцией межэлектронного взаимодействия и рассеяния на беспорядке, применен к расчетам плотности состояний и динамической (оптической) проводимости в сильно неупорядоченной трехмерной модели Хаббарда с полузаполненной зоной [1]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

Локальные уровни на узлах решетки ϵ_i независимо распределены по Гауссу:

СПОНТАННЫЕ ТОКИ И ПОЛЯРИЗАЦИЯ В МОТТОВСКИХ ДИЭЛЕКТРИКАХ: ВЕРНО ЛИ, ЧТО ЭЛЕКТРОНЫ ЛОКАЛИЗОВАНЫ?

Хомский Д.И.

Университет г. Кёльн, Германия

При рассмотрении систем с сильными электронными корреляциями всегда принимается, что при сильном взаимодействии, в фазе моттовского изолятора электроны локализованы, зарядовые степени свободы не играют никакой роли, и только спиновые эффекты остаются в основном и низко лежащих возбужденных состояниях. Мы показываем что эта общепринятая точка зрения неверна. Во многих системах, в особенности в магнитных диэлектриках с фрустрированной решеткой, при определенных спиновых конфигурациях могут существовать круговые спонтанные токи в основном состоянии и соответствующие орбитальные моменты. При других спиновых текстурах возможно реальное перераспределение зарядов, так что в основном состоянии $\langle n \rangle$ на центре не равно 1. В частности, это может привести к возникновению дипольных моментов электронной природы и к возможности электронного сегнетоэлектричества. Это представляет собой новый, чисто электронный механизм возникновения мульти-ферроиков. В динамических свойствах подобных систем также появляются новые нетривиальные эффекты, такие как дипольно-активные "ЭПР" переходы, вращение электрической поляризации магнитной структурой, возможность появления режимов с одновременно отрицательными диэлектрической и магнитной проницаемостями, и т.д.

Доклад основан на совместных исследованиях с Л.Н. Булаевским, Ч. Батистой и М.В. Мостовым [1].

1. Л.Н. Булаевский, Ч. Батиста, М.В. Мостовой и Д.И. Хомский, arXiv:0709.0575

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СИЛЬНО
КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ ПРИ УЧЕТЕ МЕЖУЗЕЛЬНОГО
КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯВальков В.В.^{1,2,3}, Коровушкин М.М.¹¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38,²Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79,³Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, 660014 Красноярск, пр. Красноярский раб., 31, E-mail: vvv@iph.krasn.ru

При исследовании свойств сильно коррелированных систем обычно считается, что источником сильных корреляций является хаббардовское отталкивание двух электронов с противоположными проекциями спиновых моментов. Между тем, во многих случаях характерная энергия кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на соседних узлах, может не существенно отличаться от хаббардовской энергии. Для таких систем можно ожидать, что учет межузельных корреляций при расчете электронной структуры может оказаться столь же существенным, что и учет одноионных взаимодействий. В данной работе в рамках модели Эмери [1] и модели Андерсона [2] показывается, что роль межузельных корреляций может иметь принципиальное значение для интерпретации как электронных, так и магнитных свойств. В частности, для эффективного гамильтониана, построенного на основе модели Эмери с точностью до членов четвертого порядка по параметру медь – кислородной гибридизации, показано, что при вычислении константы эффективного обменного взаимодействия межузельные кулоновские корреляции приводят к снятию вырождения для многоэлектронных конфигураций. Это существенным образом сказывается на зависимости обменного интеграла от величины дырочного допирования в купратных сверхпроводниках. Следует подчеркнуть, что при вычислении этой зависимости корректный учет межузельных корреляций привел к необходимости классификации кислородных конфигураций, окружающих обменно связанные ионы меди. Это обусловлено снятием вырождения этих конфигураций. Существенно, что такие эффекты не могут быть отражены в рамках однокластерного подхода, поскольку явно учитываются разнотузельные конфигурации. В тяжелофермионных интерметаллидах включение межузельного кулоновского отталкивания приводит к расщеплению локализованного уровня на два уровня с перераспределенной спектральной интенсивностью. Это качественно меняет электронную структуру, рассчитанную в рамках периодической модели Андерсона, включающей межузельные взаимодействия. Физическая причина возникновения смещенного на величину межузельного кулоновского взаимодействия нового уровня достаточно очевидна. Дело в том, что гибридизационные процессы приводят к появлению в окрестности локализованного состояния иона с заполненным электронным состоянием. В этом случае энергия возбуждения соседнего локализованного уровня будет увеличена именно на отмеченную выше величину. Другой эффект заключается в возникновении сильной ренормировки константы гибридизационного взаимодействия, что, в свою очередь, приводит к формированию пиков в плотности электронных состояний. Следует подчеркнуть, что этот результат получен без привлечения слэив-бозонного представления.

Работа выполнена при поддержке Программы Отделения физических наук РАН, РФФИ (грант № 06-02-16100), а также Интеграционного проекта СО РАН № 3.4.

[1] Emery V.J., Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987) [2] Anderson P.W., Phys. Rev. **124**, 41 (1961).

О ПРОИСХОЖДЕНИИ ПИКОВ НЕЙТРОННОГО РАССЕЙЯНИЯ В $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

Андреев А.И., Ерёмин М.В., Ерёмин И.М.

Марийский государственный университет
Казанский государственный университет

Недавние эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов на ВТСП типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ показали, что в интегральной интенсивности неупругого рассеяния нейтронов имеются два пика [1, 2]. Один из них (низкочастотный) наиболее четко выражен в сверхпроводящей фазе. В образцах, соответствующих оптимальному допированию ($x=0.16$), он расположен на энергиях порядка 18 meV [1]. Положение высокочастотного пика при ($x=0.16$) соответствует энергии 45 meV. Происхождение нижнего пика, в рамках приближения РРА, может быть интерпретировано, как проявление коллективных спиновых колебаний внутри сверхпроводящей щели спиновых экситонов [3]. Дисперсия же высокочастотного пика около волнового вектора $Q = (\pi/a, \pi/a)$ напоминает магннное рассеяние в двумерной системе локализованных спинов с сильными антиферромагнитными корреляциями.

Цель данного сообщения – обсудить возможный вариант усовершенствования феноменологической схемы РРА для учета двойственного характера магнетизма в ВТСП.

Применительно к соединению $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ подобного рода вариант был предложен и просчитан в работе [4]. Однако в соединениях типа $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$, картина рассеяния нейтронов несколько иная по сравнению с $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. В частности, высокочастотный пик не наблюдается и “a priori”, было не ясно может ли быть он получен в рамках аналогичной схемы расщепления для функций Грина. Численные расчеты мнимой части динамической восприимчивости были проведены с использованием фотоэмиссионных данных о дисперсии зоны проводимости в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ из работы [5]. Наш расчет воспроизводит общий вид интегральной интенсивности рассеяния нейтронов, состоящей из двух пиков в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, однако тонкие детали дисперсии низкочастотного пика не воспроизводятся. Возможно, это связано с тем, что нами не учтены особенности динамической восприимчивости, связанные с псевдощелью.

1. В. Vignole, S. M. Hayden, D. F. McMorrow, et. al. Nature Phys., **3**, 163 (2007)
2. M. Kofu, T. Yokoo, F. Trouw, and K. Yamada, cond-mat 0710.5766v1
3. I. Eremin, D. Morr, A. Chubukov et. al., Phys. Rev. Lett., **94**, 147001 (2005)
4. М. В. Еремин, А. А. Алеев и И. М. Еремин, Письма в ЖЭТФ, **84**, 197 (2006)
5. T. Yoshida, X. J. Zhou, K. Tanaka et al. Phys. Rev. B. **74**, 224510 (2006)

ОБРАЗОВАНИЕ БЕСЩЕЛЕВОЙ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ УПОРЯДОЧЕНИИ e_g ОРБИТАЛЕЙ

Аплеснин С.С.^{1,2}, Москвин А.И.¹

¹) Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева,
660014, Красноярск

E-mail: apl@iph.krasn.ru

²) Институт физики СО РАН им. Л.В. Киренского, 660036, Красноярск

Магнетики с двухкратным орбитальным квазивырождением обнаруживают зависимость интеграла обмена от взаимного расположения орбиталей [1]. Цель нашего исследования - определить влияние обменного взаимодействия между e_g электронами на упорядочение $d_{2x^2-z^2-y^2}$, $d_{x^2-y^2}$ орбиталей в Мотовском диэлектрике и оценить область параметров, при которых наблюдается изменение размерности магнитного порядка от квазидвумерного к квазидвумерному антиферромагнитному состоянию.

Мы предлагаем новый механизм образования бесщелевой квантовой спиновой жидкости. Рассмотрим модель Гейзенберга с альтернированием обмена для спина $S = 1/2$ на квадратной решетке. Гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_{i,j,\alpha} (1 + \delta) J^{\alpha\alpha} S_{i+1,j}^{\alpha} S_{i+2,j}^{\alpha} + K^{\alpha\alpha} (S_{i+1,j}^{\alpha} S_{i+1,j+1}^{\alpha} + S_{i+2,j}^{\alpha} S_{i+2,j+1}^{\alpha}) + J^{\alpha\alpha} S_{i,j}^{\alpha} S_{i+1,j}^{\alpha} + (1 - \delta) J^{\alpha\alpha} S_{i,j}^{\alpha} S_{i,j+1}^{\alpha} + J^{\alpha\alpha} S_{i+2,j}^{\alpha} S_{i+3,j}^{\alpha} + (1 - \delta) J^{\alpha\alpha} (S_{i+3,j}^{\alpha} S_{i+4,j}^{\alpha} + S_{i+3,j}^{\alpha} S_{i+3,j+1}^{\alpha}) - \sum_i H_i S_i^z, \quad (1)$$

где $J(1+\delta)$ и $J(1-\delta)$ - обменные взаимодействия между электронами, расположенными на ближайших $d_{2x^2-z^2-y^2} - d_{2x^2-z^2-y^2}$ и $d_{x^2-y^2} - d_{x^2-y^2}$ орбиталях, δ - параметр альтернирования антиферромагнитного обмена, H - внешнее магнитное поле, $\eta = (J^z - J^x)/J^z$ - анизотропия обмена, K - межцепочечное обменное взаимодействие, имеющее фиксированное значение $K/J = 0.07$.

В качестве метода расчета выбран квантовый метод Монте-Карло на квадратной решетке с $L = 40, 48, 60, 68$ с периодическими граничными условиями. Чередование пар орбиталей $d_{2x^2-z^2-y^2} - d_{2x^2-z^2-y^2}$, $d_{x^2-y^2} - d_{x^2-y^2}$ формирует страйпы вдоль одного направления и альтернирование обменного взаимодействия в ортогональном направлении. Анализ магнитных свойств систем с двумя типами орбитального упорядочения выполнен на основе спин-спиновой корреляционной функции $\langle S^z(0) S^z(r) \rangle$, подрешеточной намагниченности, магнитного структурного фактора $S(q)$ и энергии.

Найдены параметры альтернирования обмена, связанные с отношением обменного взаимодействия электронов на $d_{2x^2-z^2-y^2}$, $d_{x^2-y^2}$ орбиталях, и анизотропии обмена, при которых упорядочение пар орбиталей образует бесщелевую квантовую спиновую жидкость с конечным радиусом корреляции, и квази-низкомерное антиферромагнитное состояние. На плоскости магнитное поле - альтернирование обмена определена фазовая граница перехода из спиновой жидкости в антиферромагнитное состояние, индуцированное подавлением квантовых спиновых флуктуаций в магнитном поле. Вычислены области существования антиферромагнетика со страйп структурой и квантовой спиновой жидкости в зависимости от соотношения параметров анизотропии обмена и альтернирования обменного взаимодействия.

1. Кугель К.И., Хомский Д.И., УФН, **136**, 621 (1982)

ЭВОЛЮЦИЯ ОДНОЧАСТИЧНОГО СПЕКТРА ДЛЯ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С ДВУХУРОВНЕВЫМИ ПОДСИСТЕМАМИ

Анохин А.О., Зарубин А.В., Ирхин В.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: Anatolii.Anokhin@imp.uran.ru.ru

Одной из важных проблем физики твердого тела является взаимодействие носителей тока с локальными возбуждениями. Задачи такого типа возникают при описании динамических и термодинамических свойств металлов и полупроводников, где такое взаимодействие может приводить к существенной перестройке одночастичного электронного спектра. В последнее время эти задачи вновь стали актуальными в связи с открытием ряда интересных физических явлений и развитием теоретических методов описания решеточных систем с сильными корреляциями. Сюда относится открытие высокотемпературной сверхпроводимости, исследование двухуровневых систем с диссипацией, а также развитие методов теории динамического эффективного поля (DMFT).

Формально локальные возбуждения могут быть описаны в терминах многоуровневого спектра сильно ангармонической системы, а взаимодействие носителей тока с локальными возбуждениями в кристалле — как взаимодействие с многоуровневыми локальными системами. В простейшем случае можно использовать модель двухуровневых систем, описываемых на языке операторов псевдоспина. Такая модель широко использовалась для описания двухуровневых подсистем в металлических стеклах, диссипативных систем с туннельными состояниями, возбуждений кристаллического поля.

В электронных спектрах металлов могут также возникать особенности кондовского типа, которые обусловлены взаимодействием с орбитальными и/или псевдоспиновыми степенями свободы. Так, для описания взаимодействия носителей тока с сильно ангармоническими решеточными колебаниями апиального кислорода в высокотемпературных сверхпроводниках была использована модель псевдоспинового ферромагнетика.

В настоящей работе мы исследуем движение одного электрона, взаимодействующего с двухуровневыми системами на решетке в рамках простой модели бесспиновых фермионов с гамильтонианом

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j - \sum_i (\gamma \tau_i) n_i - \sum_i (h_z \tau_z). \quad (1)$$

При различном выборе параметров данный гамильтониан можно отобразить на гамильтониан модели Фаликова–Кимбала, а при большом значении псевдоспина с использованием преобразования Гольдштейна–Примакова — на модель Гольдштейна полярона малого радиуса.

В рамках одноузельного приближения (вариант DMFT) вычислены одночастичные функции Грина. Построены плотности состояний для различных значений константы связи электрона с двухуровневыми подсистемами и локального туннельного расщепления. В рамках развитой сплавной аналогии дана классификация электронных состояний и прослежена эволюция электронного спектра; вычислены критические значения константы связи при которых впервые в спектре появляются связывающие/антисвязывающие состояния. В отличие от рассеяния на локальном статическом потенциале, динамический характер эффективного локального эффективного потенциала рассеяния приводит к появлению как связывающих, так и антисвязывающих состояний (последних — при больших значениях константы связи чем первых) в одночастичном электронном спектре.

РОЛЬ ЗАТУХАНИЯ СПИНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ НЕСОИЗМЕРИМЫХ ПИКОВ В КУПРАТАХ

Барabanов А.Ф.¹, Максимов Л.А.²

¹Институт физики высоких давлений РАН, 142190, г. Троицк Моск.обл.

²РНИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 46, Россия

Известно, что для нормального состояния купратов целый ряд экзотических экспериментальных данных по спиновой восприимчивости $\chi(q, \omega)$ (см. обзор [1]) воспроизводится в широком диапазоне по допированию и температуре на основе самосогласованного сферически-симметричного подхода для фрустрированной АФМ модели Гейзенберга на квадратной решетке с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} J_1 \sum_{r,g} S_{r+g}^\alpha S_r^\alpha + \frac{1}{2} J_2 \sum_{r,d} S_{r+d}^\alpha S_r^\alpha$$

(J_1, J_2 - константы АФМ обмена между 1- и 2- ми ближайшими соседями) [2-4]. Для этого надо:

- 1) учесть, что $\chi(q, \omega)$ имеет общий вид $\chi(q, \omega) = -2F(q)/(\omega^2 - \omega^2(q) - R(q, \omega))$, где $R(q, \omega)$ неприводимая функция Грина, описывающая распад спиновой волны на спионы;
- 2) принять для последней простейший вид $-R(q, \omega) = i\omega\gamma$;
- 3) предположить, что увеличение допирования приводит к росту параметра фрустрации J_1/J_2 .

Оказывается, что упомянутый подход позволяет (в интервале фрустраций $J_1/J_2 = 0.15 \div 0.2$) также воспроизвести важные экспериментальные черты $\chi(q, \omega)$, возникающие в сверхпроводящем состоянии, такие как несоизмеримые пики и наличие так называемой “silent band” [1], [6]. Для этого достаточно принять для $R(q, \omega)$ более общий и реалистичский вид $-R(q, \omega) = i\omega\gamma + \frac{\Phi(q)}{\omega^2 - \varepsilon^2 + i\omega\lambda}$, обладающий правильными аналитическими свойствами. Значения параметров ε и Φ качественно правильно связываются с величинами сверхпроводящей щели и магنونным импульсом, ответственным за распад сверхпроводящей пары. Решающим оказываются не только мнимые, но и действительные перенормировки, отвечающие $R(q, \omega)$.

1. R.J. Birgeneau *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn., 75, 111003 (2006).; cond-mat/0604667.
2. A.F. Barabanov *et al.*, Phys. Lett. **A365**, 469 (2007).
3. А.В. Михеенков, А.Ф. Барabanов, ЖЭТФ **132**, 392-405 (2007).
4. Н.А. Козлов, А.Ф. Барabanов, Письма ЖЭТФ, **86**, 673 (2007).
5. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, Phys. Lett. **A207**, 390 (1995).
6. S. Pailhes *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 167001 (2004).

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ В ДВУМЕРНОМ ДОПИРОВАННОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Барабанов А.Ф.¹, Белемук А.М.¹, Максимов Л.А.²

¹Институт физики высоких давлений РАН, 142190, г. Троицк Моск. обл.

²РНИЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 46, Россия

В рамках регулярной антиферромагнитной s-d модели на квадратной решетке рассматривается задача построения кинетического уравнения с рассеянием на магнитной подсистеме и с учетом того, что в системах с сильным спин-дырочным взаимодействием (в частности, в высокотемпературных сверхпроводниках) движение дырки определяется структурой спин-поляронных зон [1].

Носители описываются проекционным методом Мори - Цванцига для функций Грина на языке спинового полярона в шестиполосном приближении с учетом спаривания локальных поляронных операторов со спиновыми волнами, обладающими импульсами q близкими к антиферромагнитному вектору $Q = (\pi, \pi)$. Только подобное спаривание позволяет реалистично передать спектр нижней квазичастичной поляронной зоны (ответственной за кинетику) и отвечающей этой зоне функции вычетов голой дырки $Z(\mathbf{k})$. В частности, в интересующем нас случае спиновой восприимчивости с резким пиком $Im \chi(q, \omega)$ при малых частотах и q близких к Q , это обеспечивает при малом допировании $n_h \leq 0.2$ "большую" поверхность Ферми, расположенную вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна [2].

Считая, что допирование стимулирует фрустрацию спиновой подсистемы, т.е. изменение $Im \chi(q, \omega)$ (последняя трактуется самосогласованным подходом с учетом действительных и мнимых перенормировок [3]), рассматриваются случаи малого и оптимального допирования плоскости CuO_2 .

Одновременное рассмотрение этих случаев оказывается возможным лишь при учете сильной перестройки функции вычетов $Z(\mathbf{k})$ с допированием.

При получении выражения для электросопротивления использован вариант теории линейного отклика для матрица плотности с выходом за традиционное одномоментное приближение при решении кинетического уравнения (последнее принципиально необходимо для учета сильной анизотропии рассеяния носителей на спиновой моде с АФМ вектором Q).

Показано, что аномальная по температуре кинетика определяется свойствами зон именно спинового полярона (а не "голой дырки") и их квазичастичными вычетами $Z(\mathbf{k})$.

1. А.М. Белемук, А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, Письма ЖЭТФ, **86**, 374 (2007).
2. А. Ф. Барабанов *et al.*, ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
3. A.F. Varabanov *et al.*, Phys. Lett. **A365**, 469 (2007).

ВЛИЯНИЕ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА ОБЛАСТЬ РЕАЛИЗАЦИИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ ХАББАРДОВСКИХ ФЕРМИОНОВ

Вальков В.В.^{1,2,3}, Головня А.А.¹

¹)Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок

²)СФУ, ³)СибГАУ, Красноярск

E-mail: vvv@iph.krasn.ru, algol@hotmail.ru

Развитие микроскопической теории высокотемпературной сверхпроводимости чаще всего осуществляется в рамках модельных гамильтонианов, описывающих сильно коррелированные системы (СКС). С этим обстоятельством связана высокая популярность $t - J$ - модели, способной, как известно, описать обменный и спин-флуктуационный механизмы синглетного спаривания электронов с d - типом симметрии параметра порядка [1-3].

При рассмотрении сверхпроводящей фазы СКС методом диаграммной техники для операторов Хаббарда возникает ряд особенностей, связанных с наличием концевых диаграмм [4,5]. Их полную совокупность называют концевым множителем или силовым оператором. Важная роль этой структуры в квантовой теории магнетизма была установлена достаточно давно [5]. Для сверхпроводящей фазы силовой оператор характеризуется нормальными $P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_m)$ и аномальными $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\omega_m)$ компонентами. Через них проявляются спин-флуктуационные вклады. В данной работе в рамках $t - t' - t'' - J^*$ - модели в однопетлевом приближении исследовано взаимное влияние дальних перескоков, трехцентровых взаимодействий и спин-флуктуационных процессов на концентрационную зависимость критической температуры. В уравнениях самосогласования для сверхпроводящей фазы бозевские функции Грина, описывающие спиновые и зарядовые флуктуации, заменялись на усредненные по зоне Бриллюэна значения поляризационного оператора. При выводе уравнения на критическую температуру было использовано еще одно приближение, основанное на разнесенности энергий, характеризующих скорость спадания по мацубаровской частоте бозевских и фермиевских функций. В рамках такого приближения для d -типа симметрии параметра порядка сверхпроводящей фазы, были получено уравнение для T_c . При его анализе зависимость $P_{0\sigma,0\sigma}(\omega_m)$ от ω_m находилась точно на основе численного алгоритма.

Показано, что учет спин-флуктуационных вкладов через компоненты силового оператора приводит к уменьшению критической температуры в области предельно слабого допирования и увеличению температуры перехода в сверхпроводящую фазу при относительно высоком уровне допирования. В результате точка, соответствующая максимуму на концентрационной зависимости $T_c(n)$ смещается в область, меньших концентраций дырок и лучше соответствует экспериментальным данным. Из результатов расчета следует, что совместное влияние дальних перескоков, трехцентровых взаимодействий и спин-флуктуационных процессов значительно сказывается на области реализации сверхпроводящей фазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая макрофизика", РФФИ (грант N 06-02-16100) и Интеграционного проекта СО РАН.

1. Anderson P.W., Science, **235**, 1196 (1987)
2. Плакида Н.М., Антон Л., Адам С., Адам Г., ЖЭТФ, **124**, 367 (2003)
3. Изюмов Ю.А., УФН, **169**, 3, 225 (1999)
4. Зайцев Р.О., Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма, УРСС, (2004)
5. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н., Магнетизм коллективизированных электронов, Наука (1994)

ВЛИЯНИЕ СПИН-ФЛУКТУАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ НА ОПИСАНИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Вальков В.В.^{1,2}, Дзедзисашвили Д.М.^{1,2}¹) Институт физики СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок²) Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск

E-mail: vvv@iph.krasn.ru , E-mail: ddm@iph.krasn.ru

Одной из фундаментальных моделей систем с сильными электронными корреляциями является периодическая модель Андерсона (РАМ). Эта модель, в зависимости от соотношения между параметрами, позволяет описывать низкотемпературную термодинамику интерметаллических тяжёлофермионных (ТФ) систем, соединений со смешанной валентностью, а также кондо-решеток. При низких температурах многие из ТФ интерметаллидов переходят в сверхпроводящую фазу. Особенность сверхпроводящего состояния этих соединений связана с тем, что куперовское спаривание происходит между тяжелыми квазичастицами, причем значительные ренормировки электронных масс обусловлены сильными корреляционными эффектами. К настоящему времени установлено, что механизм куперовского спаривания возникает не в результате электрон-фононного взаимодействия, а имеет спин-флуктуационную природу. С этим фактом обычно связывают анизотропный характер сверхпроводящего параметра порядка (ПП). Недавно был изучен тяжелофермионный скуттерудит $LaFe_4P_{12}$, который в режиме развитых спиновых флуктуаций при $T_c = 4.1$ К переходит в сверхпроводящее состояние с симметрией ПП s -типа [1].

В данной работе на основе РАМ методом диаграммной техники для операторов Хаббарда исследовано формирование s -волнового сверхпроводящего состояния в ТФ соединениях при учете процессов рассеяния носителей тока на спиновых флуктуациях. Уравнение на критическую температуру получено двумя способами: 1) из анализа полюсов амплитуды рассеяния в куперовском канале с учетом процессов релаксации на спиновых и зарядовых флуктуациях; 2) из рассмотрения сверхпроводящей фазы с введением нормальных и аномальных компонент массового и силового операторов. Во втором случае была получена модифицированная система уравнений Дайсона-Горькова. Расчеты проводились в однопетлевом приближении методом диаграммной техники для операторов Хаббарда. Показано, что в рассматриваемом приближении вклады для компонент силового оператора в явном виде содержат динамическую спиновую восприимчивость локализованной подсистемы. Для самосогласованного вычисления восприимчивости были получены уравнения на спиновые функции Грина в однопетлевом приближении. На основе численных расчетов построена фазовая диаграмма РАМ, которая дополняет фазовую диаграмму, полученную в работе [2], областью существования сверхпроводимости s -типа. При вычислении концентрационной зависимости T_c показано, что учет спиновых флуктуаций приводит к существенному подавлению критической температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 07-02-00226), программы отделения физических наук РАН, а также интеграционного проекта СО РАН № 3.4.

1. Nakai Y., Ishida Y., Kikuchi D., Sugawara H., Sato H., JPSJ, **74**, 3370 (2005)
2. Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С., Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. РХД, (2006)

К ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАРЯДОВОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ
СЛОИСТЫХ КУПРАТОВ

Ерёмин М.В., Алеев А.А., Ерёмин И.М.

Казанский государственный университет, 420008, Кремлевская 18

Формула для динамической зарядовой восприимчивости слоистых купратов по схеме расщепления уравнений движения Хаббард-I, получена в работе [1]. В настоящей работе применяется улучшенный вариант расщепления уравнений для функций Грина, когда явным образом учитывается перенормировка интегралов перескока из-за спин-спиновых корреляций. В отличие от схемы Хаббард-I, в данном варианте, для диэлектрической фазы ширина зоны получается реально узкой. По сравнению со схемой L. Roth, новым является учёт членов типа молекулярного поля, в духе приближения случайных фаз (RPA). Можно сказать, что использованный нами вариант расщепления – есть некий синтез техники проектирования Цванцига-Мори и приближения случайных фаз. Ранее он применялся в [2] при выводе формулы для динамической спиновой восприимчивости.

В качестве приложения полученной формулы для зарядовой восприимчивости, нами рассчитаны особенности поведения плазмонных мод в слоистой системе (купраты). Из условия равенства нулю знаменателя (или появления пиков в мнимой части восприимчивости) анализируются возможные неустойчивости типа динамических (скользящих) волн зарядовых плотностей (ВЗП).

Численные расчеты проведены в двух вариантах выбора кулоновского псевдопотенциала; как в работе [3] и как в [4]. Как и в [3] мы имеем ветвь акустических плазмонов. Предположение о существовании такой ветви лежит в основе плазмонного механизма спаривания (см. [3] и ссылки, приведенные там). При обоих вариантах выбора кулоновского псевдопотенциала, главный пик в мнимой части восприимчивости приходится на область волновых векторов около $Q_1 = (\pm\pi, \pm\pi)$, что свидетельствует о неустойчивости электронной подсистемы к возникновению динамических волн зарядовых плотностей. Пики восприимчивости, соответствующие волновым векторам $Q = (0, \pm\pi/2)$ и $Q = (\pm\pi/2, 0)$, (они ожидалось в ряде работ, исходя из топологических особенностей поверхности Ферми) оказались относительно малыми.

1. M. Eremin, I. Eremin, S. Varlamov, Phys. Rev. B **64**, 214512 (2001)
2. М. Еремин, А. Андреев, И. Еремин, Письма в ЖЭТФ, **86**, 386 (2007)
3. A. Bill, H. Morwatz, V. Z. Kresin, Phys. Rev. B **68**, 144519 (2003)
4. D. N. Aristov, G. Khaliullin, Phys. Rev. B **74**, 045124 (2006)

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ ДВИЖЕНИЙ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ: НОВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ОБОБЩЕННОГО ЗАКОНА ФОГЕЛЯ-ФАЛЧЕРА-ТАММАНА

Нигматуллин Р.Р.

Казанский государственный университет, кафедра теоретической физики

Основываясь на редуцированных свойствах диэлектрических спектров, связанных с появлением степенных зависимостей $[\sim (j\omega\tau)^{\pm\nu}]$ для комплексной восприимчивости в частотной области, можно развить и обосновать эффективную процедуру по обнаружению различных коллективных движений, описываемых некоторой степенной зависимостью. Оригинальная процедура разделения степеней помогает отделять коллективные движения друг от друга в случаях, когда точка экстремума в частотной области визуально не выделена. Если степень ν связана с характеристическим временем релаксации τ соотношением: $\nu \sim \ln(\tau/\tau_s) / \ln(\tau/\tau_0)$ (здесь τ_s, τ_0 - характеристические времена, определяющие движение по фрактальному кластеру [1],) и температурная зависимость $\tau(T) = \tau_A \cdot \exp(E/T)$ подчиняется закону Аррениуса, то можно строго показать, что температурная зависимость произвольной точки экстремума, появляющейся в частотной зависимости комплексной восприимчивости и характеризуемая параметрами $[\omega_m, y(\omega_m)]$, подчиняется обобщенному закону Фогеля-Фалчера-Таммана (ФФТ). Это важное утверждение подтверждает существование явления "универсального" отклика (УО), обнаруженном и систематизированным А.К. Джоншером [2]. Эта дифференциация сильно-коррелированных движений на мезоскейле (промежуточной области масштабов) позволяет обосновать выбор подгоночной функции, содержащей линейную комбинацию степенных функций, и описать спектр комплексной восприимчивости некоторой сложной системы в ограниченной области частот. Этот важный вывод позволяет также определить диэлектрическую спектроскопию как *спектроскопию коллективных движений* и обосновать применимость кинетических уравнений, содержащих дробные интегралы и производные для описания такого рода движений [3]. Сравнение с экспериментом (данные по этилен-гликолю, допированному ионами щелочных металлов) подтверждает основной вывод автора, что открывает новые возможности по общей классификации и детектированию коллективных движений в диэлектрической спектроскопии.

1. Ya. E. Ryabov, Yu. Feldman. J. Chem. Phys. **116**, 8610 (2002).
2. A.K. Jonscher *Dielectric Relaxation in Solids*. Chelsea Dielectric Press, (London) (1983).
3. R.R. Nigmatullin. Physica B **358** 201 (2005); Physica A **363** 282 (2006).

ФЕРМИЖИДКОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Зайцев Р.О.

¹⁾Российский научный центр "Курчатовский Институт", 123182 Москва, пл. Курчатова, 1
E-mail: zaitsev_rogdai@mail.ru

Изучаются свойства электронной системы с предельно сильным электрон-электронным взаимодействием. Получено уравнение состояния, вычислены температурная и концентрационная зависимости гидродинамического звука и магнитной восприимчивости. Обнаружена низкотемпературная область неустойчивости, соответствующая расслоению на фазы. Уравнение для нульзвуковых колебаний получено с учётом существенной анизотропии энергетического спектра.

Основные постулаты, на которых основана теория Ферми-жидкости Ландау и которые фактически сводятся к предположению о существовании слабо-затухающих и слабо-взаимодействующих квазичастиц, подчиняющихся статистике Ферми, находят формальное обоснование введением одночастичной гриновской функции, имеющей полюсную особенность. При этом основные ферми-жидкостные эффекты рассчитываются на основе дополнительного предположения о существовании взаимно-однозначной связи между частичными и квазичастичными состояниями. В модели Хаббарда это соответствие заведомо отсутствует, поскольку уже в нулевом приближении возникают перестановочные соотношения, отличающиеся от известных антикоммутиационных соотношений, относящихся к идеальному газу квазичастиц.

Производную от плотности числа частиц по химическому потенциалу находим с помощью дифференцирования уравнения состояния $n = n(\mu, T)$. Это соотношение определим с помощью вариации одночастичной функции Грина $D_\omega(\vec{p})$, выражающейся через произведение динамической функции Грина $G_\omega(\vec{p})$ на концевой множитель f . В предельном случае бесконечной энергии Хаббарда, учитывая уравнение состояния, записанное при нулевом внешнем магнитном поле, получим:

$$D_\omega(\vec{p}) = G_\omega(\vec{p})f, \quad n = 2fT \sum_{\omega, \vec{p}} e^{i\omega\delta} G_\omega(\vec{p}), \quad f = 1 - \frac{n}{2}, \quad (1)$$

где $\omega = (2k + 1)\pi T$, а δ – бесконечно малая положительная постоянная, T – температура.

Уравнение Дайсона определяет функцию Грина $G_\omega(\vec{p})$ через собственно энергетическую часть Σ и фурье-компоненты интеграла перескока $t(\vec{p})$. Ограничиваясь однопетлевым приближением, получим:

$$G_\omega(\vec{p}) = (i\omega - ft(\vec{p}) - \Sigma + \mu)^{-1}, \quad \Sigma = -T \sum_{\omega, \vec{p}} t(\vec{p})G_\omega(\vec{p}). \quad (2)$$

Перестановочные соотношения, соответствующие \hat{X} -операторам Хаббарда, приводят к возникновению новых физических величин $f_{1,2}^\sigma$, определяющих средние числа заполнения, связанные с наличием нефермижидкостных перестановочных соотношений. Используя это обстоятельство, удаётся рассмотреть все явления, связанные с наличием взаимодействия в модели Хаббарда, и сравнить их классическими результатами теории Ландау.

1. Самохвалов И.Г., Карповский А.Б., Квантовые жидкости, **100**, 25 (2000)
2. Вонсовский С.В., Магнетизм, Наука (1971)

О ВЛИЯНИИ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Вальков В.В.^{1,2}, Коровушкин М.М.¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок,
50/38, E-mail: vvv@iph.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79.

Модель Андерсона [1] активно используется для теоретического исследования проблемы смешивания коллективных и локализованных электронных состояний в условиях сильных корреляций (СК). В зависимости от соотношения между параметрами модели реализуются различные сценарии основного состояния [2], что позволяет рассматривать периодическую модель Андерсона (РАМ) как базовую при интерпретации уникальных свойств соединений на основе актинидных и редкоземельных элементов. В классической РАМ кулоновское взаимодействие между двумя группами электронов не учитывается и происхождение СК обусловлено внутриатомным отталкиванием электронов. В действительности же, характерная величина кулоновского взаимодействия между электронами (U_{fd}), находящимися на разных узлах, может быть ненамного меньше параметра внутриатомного взаимодействия. В этой связи представляется актуальным исследование роли межузельных корреляций (МК) в проблеме основного состояния и спектра возбуждений редкоземельных и актинидных интерметаллидов. В настоящей работе представлены результаты такого исследования. Вычисления проводились на основе РАМ с дополнительным слагаемым, описывающим кулоновское взаимодействие между двумя группами электронов. Предполагалось, что f -электроны локализованы, тогда как d -электроны коллективизированы и в представлении Ванье описываются посредством перескоков по узлам, принадлежащим другой подрешетке.

При описании МК использовалось приближение, выходящее за рамки приближения Хартри - Фока. В условиях, когда в расчете на одну ячейку решетки число локализованных электронов $n_f \simeq 1$, а число коллективизированных — $n_d \ll 1$, существенным является взаимодействие между этими двумя группами, тогда как взаимодействием между коллективизированными электронами можно пренебречь. Таким образом, задача содержит малый параметр $n_d \ll 1$, позволяющий провести корректный учет МК.

В работе был введен расширенный набор двухвременных температурных функций Грина, построенных на операторах Хаббарда. При замыкании уравнений движения для этих функций использовался отмеченный выше параметр малости. Показано, что включение МК привело к расщеплению нижней зоны на две подзоны, разнесенных на величину U_{fd} . Вторая особенность, индуцированная МК, проявилась посредством сильной ренормировки параметров модели. Причем эта ренормировка существенно зависит от той энергетической области, в которой реализуются фермиевские возбуждения. В частности, в окрестности нижнего полюса $E \simeq E_0$ при $U_{fd} \neq 0$ гибридизация между двумя группами электронов подавляется по сценарию $V \rightarrow \tilde{V} = V(1 - n_f)$. Это приводит к существенному увеличению плотности электронных состояний без привлечения слэив-бозонного представления.

Работа выполнена при поддержке Программы Отделения физических наук РАН, РФФИ (грант № 06-02-16100), а также Интеграционного проекта СО РАН.

1. Anderson P.W., Phys. Rev. **124**, 41 (1961)
2. Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала, РХД (2006)

СВОЙСТВА СИСТЕМ С ТЯЖЕЛЫМИ ФЕРМИОНАМИ И НОВЫЕ
ЭПР-РЕЗУЛЬТАТЫКочелав Б.И.

Казанский государственный университет, 420008 Казань, Кремлевская 18

Дан краткий обзор основных свойств и теоретических моделей систем с тяжелыми фермионами. Основное внимание уделено соединениям, содержащим редкоземельные ионы. На основе этого обзора обсуждаются новые ЭПР-результаты, вызвавшие в последнее время острую дискуссию. Ранее было установлено, что сигнал ЭПР от примесных редкоземельных ионов в металлах исчезал при температурах ниже характерной T_K (Кондо-температура), что находило естественное объяснение вследствие образования синглетного состояния редкоземельного иона с локальным облаком электронов проводимости и уширения линии ЭПР до величины, много большей ларморовой частоты. До недавнего времени казалось вполне естественным, что сигнал ЭПР не наблюдался ниже T_K (которая определялась независимо из кинетических и термодинамических характеристик) также в системах с тяжелыми фермионами, в которых ионы редких земель образуют периодическую решетку. Однако, в недавних экспериментах группы Зихельшмидта в Дрездене был обнаружен и исследован сигнал ЭПР именно в таких соединениях YbRh_2Si_2 ($T_K = 25$ К) и YbIr_2Si_2 ($T_K = 40$ К) в большом диапазоне температур $T < T_K$ [1,2]. Особый интерес эти соединения вызывают еще и потому, что их относят к системам, близким к квантовой критической точке, разделяющей на фазовой диаграмме области с обычным ферми-жидкостным и не-ферми-жидкостным поведением. Теория всех этих явлений в настоящее время еще только разрабатывается.

1. J. Sichelschmidt *et al.*, Phys. Rev. Lett., **91**, 156401 (2003).
2. J. Sichelschmidt, *et al.*, J. Condens. Matter, **19**, 016211 (2007).

ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ С ДВУМЯ ТИПАМИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

Кугель К.И., Рахманов А.Л., Сбойчаков А.О.

Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН,
125412, Москва, ул. Ижорская, 13
E-mail: kugel@orc.ru

Рассматривается ситуация, типичная для систем с ян-теллеровскими ионами (таких, как манганиты), где возникает конкуренция между локализацией электронов за счет искажений кристаллической решетки и выигрышем в кинетической энергии при делокализации электронов. Рассмотрение проводится на основе "минимальной модели", описывающей такую конкуренцию между локализацией и делокализацией. Показано, что число подвижных носителей тока может быть значительно меньше, чем то, которое определяется уровнем допирования. Выявлена заметная тенденция к фазовому расслоению в широкой области фазовой диаграммы. Исследована фазовая диаграмма рассматриваемой модели в плоскости уровень допирования - температура, включающая в себя как однородные, так и неоднородные состояния [1,2].

Рассмотрена также более общая модель, отвечающая системе, где носители тока принадлежат двум энергетическим зонам разной ширины. Показано, что в случае сильного одноцентрового кулоновского отталкивания носителей тока тенденция к фазовому расслоению сохраняется даже в отсутствие магнитного или какого-либо другого параметра порядка, если ширины зон заметно отличаются [3]. Обсуждается возможность применения такого подхода и к описанию мелкомасштабного фазового расслоения в купратных сверхпроводниках [4].

1. Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Sboychakov A.O., Phys. Rev. Lett. **95**, 267210 (2005)
2. Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Phys. Rev. B **74**, 014401 (2006)
3. Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Phys. Rev. B **76**, 195113 (2007)
4. Sboychakov A.O., Savel'ev S.E., Rakhmanov A.L., Kugel K.I., Nori F., arXiv:0706.0082

ОПТИЧЕСКОЕ ПРАВИЛО СУММ ДЛЯ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ

Кулеева Н.А.¹, Кучинский Э.З.², Некрасов И.А.³, Садовский М.В.⁴

Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
E-mail: ¹ strigina@iep.uran.ru, ² kuchinsk@iep.uran.ru, ³ nekrasov@iep.uran.ru, ⁴ sadovski@iep.uran.ru

Оптическое правило сумм в модели одной зоны имеет вид [1,2]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \sigma_{xx}(\omega) = \pi e^2 \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{p}}}{\partial p_x^2} n(\varepsilon_{\mathbf{p}}), \quad (1)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ - спектр квазичастиц, $n(\varepsilon_{\mathbf{p}}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$ - функция распределения, здесь $G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$ - запаздывающая функция Грина, а $f(\varepsilon)$ - функция Ферми.

Продемонстрировано, что оптическое правило сумм (1) выполняется для оптической проводимости, рассчитанной в DMFT+ Σ_p приближении [3] для двумерной модели псевдощелевого состояния в модели Хаббарда, учитывающей рассеяние квазичастиц на флуктуациях ближнего антиферромагнитного порядка (модель “горячих точек”). Показано, что правая часть оптического правила сумм (1) слабо зависит от температуры, величины псевдощели, корреляционной длины флуктуаций, но обладает заметной зависимостью от величины кулоновского взаимодействия U . Эти зависимости соответствуют “нарушению” стандартного оптического правила сумм в нормальном состоянии [4].

1. Kubo R., J.Phys.Soc.Japan **12**,570(1957).
2. Norman M.R., Pepin, Phys.Rev.B **66**, 100506 (2002).
3. Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V., Phys.Rev.B **75**, 115102 (2007).
4. Norman M.R., Chubukov A.V., E. van Heumen, Kuzmenko A.B., D. van der Marel, cond-mat/0709.3516v1.

ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ
В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ.

Кучинский Э.З., Некрасов И.А., Садовский М.В.

Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амурдсена, 106

E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru, nekrasov@iep.uran.ru, sadovski@iep.uran.ru

В DMFT+ Σ_k приближении [1] рассчитана оптическая (динамическая) проводимость в слабо легированной двумерной модели Хаббарда, с полным учетом вершинных поправок от псевдощелевых флуктуаций (AFM, CDW типа) [2]. DMFT+ Σ_k подход включает в уравнения DMFT характерный масштаб длины через зависящую от импульса собственно - энергетическую часть Σ_k , вызванную нелокальными поправками от (псевдощелевых) флуктуаций антиферромагнитного (AFM) или CDW - типа. Эффективная примесная задача DMFT решалась методом численной ренормгруппы (NRG). Рассмотрены случаи сильно коррелированного металла ($U \sim W$) и легированного моттовского диэлектрика ($U \gg W$), где U - параметр кулоновского отталкивания, а W - ширина зоны проводимости. В ходе основанных на этом новом подходе расчетов оптической проводимости псевдощелевого состояния получены типичные псевдощелевые аномалии проводимости, вызванные рассеянием электронов на этих флуктуациях, качественно соответствующие многочисленным экспериментам на ВТСП оксидах [3,4]. С ростом электронных корреляций (локального хаббардовского взаимодействия U) происходит заметное подавление псевдощелевых аномалий оптической проводимости.

1. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, V. I. Anisimov, Phys. Rev. **B 72**, 155105 (2005)
2. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, M. V. Sadovskii, Phys. Rev. **B 72**, 115102 (2007)
3. Садовский М.В., УФН **171**, 539 (2001)
4. D. N. Basov, T. Timusk, Rev. Mod. Phys. **77**, 721 (2005)

ФУЛЛЕРЕН Au_{16} И ЗОЛОТАЯ НАНОТРУБКА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Миронов Г.И.

Марийский государственный педагогический институт, 424002, г. Йошкар-Ола, ул. Коммунистическая, 40

Нанокластеры из атомов золота [1] являются важными объектами исследований из-за их важной роли в нанoeлектронике, электронных устройствах, конструировании наноматериалов, в катализе. Согласно материаловедческой триаде не только состав, но и новая структура, в частности наноструктура, придает новые свойства материалу [2].

Атом золота принадлежит подгруппе меди группы переходных металлов. В [2, 3] было показано, что для теоретического анализа наносистем, состоящих из атомов переходных металлов, в которых электроны находятся частично в локализованном, частично в делокализованном состояниях, можно использовать модель Хаббарда [4]. Модель Хаббарда позволяет описать такие интересные свойства наносистем, как магнетизм (наноматематизм) [2], электронные корреляции, а также влияние электронных корреляций на другие свойства наносистемы [3].

Цель настоящей работы – вычисление и исследование антикоммутирующей функций Грина, термодинамических средних, энергии основного состояния, энергии ионизации и сродства к электрону [5] в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций [2, 3] для фуллерена Au_{16} и энергетического спектра нанотрубки из атомов золота.

Гамильтониан модели для фуллерена Au_{16} Хаббарда представим в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^{16} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}), \hat{V} = U \sum_{i=1}^{16} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1)$$

Здесь ε – собственная энергия электрона; U – энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле с разными проекциями спинов; B – интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с одного узла на другой узел за счет тепловых флуктуаций и энергии поля наносистемы; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ – оператор числа частиц, $a_{i\sigma}^+, a_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов на узле i молекулы фуллерена со спином σ , соответственно.

Записав уравнения движения для операторов рождения электронов, решив системы уравнений в приближении статических флуктуаций, мы можем вычислить фурье-образы антикоммутирующих функций Грина, корреляционные функции, описывающие свойства рассматриваемых моделей.

1. J. Zhao, J. Yang, J.G. Hou, Phys. Rev. B. **67**, 8, 085404, (2003).
2. Г.И. Миронов. ФММ **102**, 6, 611 (2006).
3. Г.И. Миронов. ФТТ **48**, 7, 1299 (2006).
4. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 1365, 238, (1963).
5. Г.И. Миронов. ФТТ **50**, 1, 182 (2008).

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НАНОТРУБОК - УГЛЕРОДНЫХ КОЛЕЦ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Миронов Г.И.

Марийский государственный педагогический институт, 424002, г. Йошкар-Ола, ул.
Коммунистическая, 40

Углеродные нанотрубки оказались перспективными элементами для получения новых наноматериалов и наноустройств. Отличительной особенностью нанотрубок является возможность регулирования проводимости нанотрубки путем определения ее структуры при росте нанотрубки. Однослойные нанотрубки типа кресло и зигзаг обладают различными физическими свойствами [1,2]. Нанотрубки типа "кресло" с хиральностью (5,5) или (10,10) обладают металлической проводимостью, тогда как нанотрубки со структурой зигзаг хиральностью (9,0) обладают полупроводниковыми свойствами [1,2]. Практическое применение нанотрубок требует исследования энергетического спектра, а также характеристик, свидетельствующих о степени делокализации электронов в нанотрубке. В [3] было проведено теоретическое исследование структурных элементов фуллерена C_{60} в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Было показано, что особые свойства фуллерена можно объяснить в рамках модели Хаббарда. Цель настоящей работы - вычисление и исследование антикоммутаторной функций Грина для различных структурных элементов нанотрубок с различными хиральностями, корреляционных функций, характеризующих перескоки электронов и вероятности нахождения двух электронов на одной обитали в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций [3]. Гамильтониан Хаббарда для углеродного кольца зигзажной нанотрубки с 36 атомами запишем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^{36} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}), \hat{V} = U \sum_{i=1}^{36} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1)$$

Здесь ε - собственная энергия электрона; U - энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле с разными проекциями спинов; B - интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с одного узла на другой узел за счет тепловых флуктуаций и энергии поля наносистемы. В работе получены решения для различных углеродных колец нанотрубок хиральностей "зигзаг" и "кресло", показано, что появление "лишних" электронов в нанотрубке приводит к увеличению степени делокализации электронов в нанотрубке и, как следствие, - к уменьшению энергии основного состояния нанотрубок.

1. И.П. Суздалев. Нанотехнология. М: URSS, 2006 - 592 с.
2. Пул. Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М.: "Техносфера 2006.
3. Г.И. Миронов. ФТТ **49**, 3, 527 (2007).

КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Зайцев Р.О.¹, Михайлова Ю.В.²¹Российский научный центр "Курчатовский Институт", 123182 Москва, пл. Курчатова, 1

E-mail: zaitsev_rogdai@mail.ru

²Государственный научный центр "Ниителлоприбор", 129085, Москва, просп. Мира, 95

E-mail: agydel@mig.mail.ru

Изучается проблема построения кинетического уравнения для электронной системы с бесконечно большой энергией Хаббарда. Кинетическое уравнение имеет общий вид, соответствующий теории Ландау–Силина, когда энергия возбуждений ξ зависит от импульса и координаты:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \xi}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial \psi}{\partial \vec{p}} \frac{\partial \xi}{\partial \vec{r}} = \hat{S}t(\psi). \quad (1)$$

В нульпетлевом приближении энергия возбуждений зависит от произведения конечного множителя $f = 1 - n/2$, где n - электронная плотность, на компоненту-Фурье интеграла перескока $t(\vec{p})$: $\xi(\vec{p}, \vec{r}) = ft(\vec{p}) - \mu$.

Интеграл столкновений $\hat{S}t(\vec{p})$ возникает только в двухпетлевом приближении и состоит из двух слагаемых, одно из которых имеет стандартный вид:

$$\begin{aligned} \hat{S}t_1(\vec{p}) = f \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}', \vec{p}'_1} \left\{ w(\vec{p}, \vec{p}_1 | \vec{p}', \vec{p}'_1) \left[-n_{\vec{p}} n_{\vec{p}_1} (1 - n_{\vec{p}'}) (1 - n_{\vec{p}'_1}) + (1 - n_{\vec{p}}) (1 - n_{\vec{p}_1}) n_{\vec{p}'} n_{\vec{p}'_1} \right] \times \right. \\ \left. \times \delta(\xi_p + \xi_{p_1} - \xi_{p'} - \xi_{p'_1}) \delta(\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}' - \vec{p}'_1) \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$w(\vec{p}, \vec{p}_1 | \vec{p}', \vec{p}'_1) = \left[t(\vec{p}') + t(\vec{p}'_1) \right]^2, \quad t(\vec{p}) = \sum_{\vec{r}} \varphi(\vec{r}) \exp[-i(\vec{r}\vec{p})]. \quad (2a)$$

При этом неизвестная функция $\psi = f \times (1 - 2n_{\vec{p}})$.

Вторая аномальная часть интеграла столкновений присходит от флуктуационной части конечных операторов $\hat{X}^{00} + \hat{X}^{\sigma\sigma}$ и имеет вид, аналогичный (2):

$$\begin{aligned} \hat{S}t_2(\vec{p}) = -f \int \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}', \vec{p}'_1} \left\{ \left[t(\vec{p}') + t(\vec{p}'_1) \right] \left[-n_{\vec{p}_1} (1 - n_{\vec{p}'}) (1 - n_{\vec{p}'_1}) + (1 - n_{\vec{p}_1}) n_{\vec{p}'} n_{\vec{p}'_1} \right] \times \right. \\ \left. \times \delta(\omega + \xi_{p_1} - \xi_{p'} - \xi_{p'_1}) \delta(\vec{p} + \vec{p}_1 - \vec{p}' - \vec{p}'_1) \right\} d\omega. \end{aligned} \quad (3)$$

Аномальная часть (3) содержит лишнее по сравнению с нормальной частью (2) интегрирование по частоте. По этой причине нормальный интеграл столкновений имеет порядок $T^2/|t|$, а аномальный имеет порядок $T^3/|t|^2$, где $|t|$ - величина порядка интеграла перескока $|t| = \max \{ |t(\vec{p})| \}$. Это обстоятельство позволяет получить низкотемпературные зависимости кинетических коэффициентов.

В условиях близких к термодинамическому равновесию неизвестную функцию ψ следует искать в виде произведения $f \times \text{th} \left(ft(\vec{p}) - \vec{p}\vec{V} - \mu \right) / (2T)$, которое зануляет оба интеграла столкновений. В результате удаётся получить температурную зависимость поперечной вязкости $\eta \sim 1/T^2$ и теплопроводности $\kappa \sim 1/T$. Важно заметить, что наличие конечных множителей $f(\vec{r}, t)$ приводит конечному значению второй вязкости, которая имеет достаточно сложную температурную зависимость, связанную с аномальной частью $\hat{S}t_2(\vec{p})$.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА 2D ПЛАКЕТНО-ДЕФОРМИРОВАННОГО МАГНЕТИКА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Вальков В.А.^{1,2,*}, Мицкан В.А.^{1,2,**}

¹)Институт физики СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок 50/38

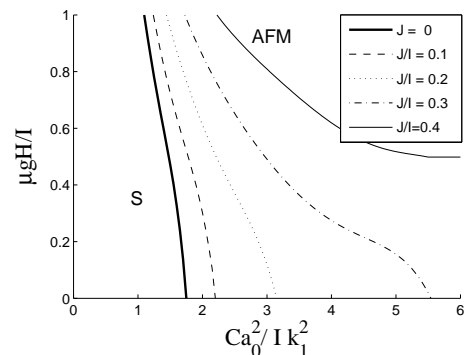
²)Сибирский федеральный университет, 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79

*)E-mail: vvv@iph.krasn.ru

**)E-mail: mitskan@iph.krasn.ru

В последнее время внимание исследователей привлекают квазидвумерные квантовые магнетики (например, CaV_4O_9 , $SrCu_2(BO_3)_2$), в которых при низких температурах наблюдается резкое падение магнитной восприимчивости. Такое поведение может быть связано с переходом системы в синглетную фазу. Одним из механизмов формирования такой фазы может выступать магнитоупругое взаимодействие (МУВ). В работе [1] был изучен вызываемый МУВ квантовый фазовый переход в синглетную фазу при плакетной деформации квадратной решетки.

В настоящей работе при учете квантовых поправок к энергии 2D антиферромагнетика проведено вычисление зависимости деформации решетки от величины магнитного поля, интенсивности фрустраций и жесткости кристаллической решетки. На основе этих данных построена фазовая диаграмма, определяющая в магнитном поле области коллинеарной и скошенной магнитных фаз, а также область реализации синглетной фазы.



Теоретическое рассмотрение задачи проводилось в рамках модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$ на квадратной решетке при температуре $T = 0$. Считалось, что обменное взаимодействие антиферромагнитного типа реализуется между ближайшими $I(\delta)$ и следующими за ближайшими $J(\delta)$ спиновыми моментами. Таким образом, взаимодействие для второй координационной сферы являлось фрустрированным.

Переход к плакетному представлению позволил точно учесть обменные взаимодействия спинов, принадлежащих одному плакету, а взаимодействия между плакетами - по теории возмущений. После введения бозе-операторов рождения и уничтожения коллективных возбуждений получена квадратичная по этим операторам форма. Посредством ее диагонализации найден спектр элементарных возбуждений и квантовая поправка к энергии основного состояния. На рисунке приведена фазовая диаграмма двумерного антиферромагнетика с плакетной деформацией для различных значений фрустрирующего взаимодействия. В области, соответствующей слабой жесткости решетки, система находится в синглетной фазе, которая может быть подавлена магнитным полем. При увеличении жесткости система изначально находится в магнитоупорядоченном состоянии.

Работы выполнены при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая макрофизика РФФИ (№ 07-02-00226) и Интеграционного проекта СО РАН № 3.4,

НЕОБЫЧНЫЕ НАНОСКОПИЧЕСКИЕ НОСИТЕЛИ ЗАРЯДА В КВАЗИДВУМЕРНЫХ КУПРАТАХ

Москвин А.С.¹, Панов Ю.Д.¹

¹Уральский государственный университет, 620083 Екатеринбург, ул. Ленина, 51
E-mail: alexandr.moskvin@usu.ru

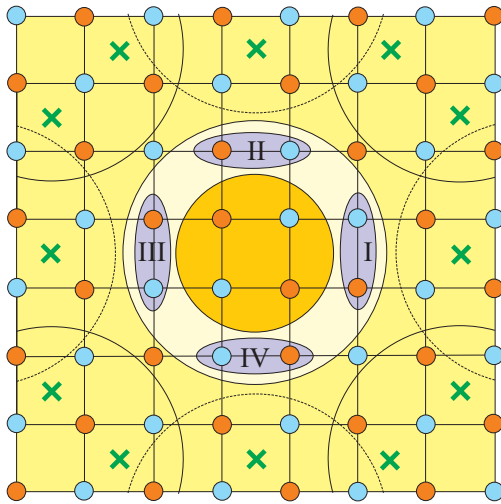


Рис. 1: Структура антифазного домена в СО-фазе.

В рамках диэлектрического сценария [1] квазидвумерные купраты типа La_2CuO_4 рассматриваются как системы, неустойчивые относительно конденсации экситонов с переносом заряда и образования электронно-дырочной (ЕН) Бозе жидкости как системы сильнокоррелированных электронных и дырочных центров, эквивалентную системе локальных синглетных бозонов, движущихся в решетке дырочных CuO_4^{5-} -центров. Минимальная модель ЕН-жидкости предполагает алгебру 2D гамильтониана локальных (hard-core) бозонов на квадратной решетке с существенным отталкиванием на разных узлах. Основное состояние такой системы при половинном заполнении соответствует зарядовому упорядочению (checkerboard CO-phase), что не вселяет оптимизма в плане ВТСП. Однако, как показано в работах [2,3], отклонение от половинного заполнения при неизовалентном замещении ($n_B = x/2$, x - концентрация допированных дырок или электронов) может сопровождаться топологическим разделением фаз с образованием, в частности, скирмион-подобных цилиндрических доменов (bubble) в исходной "антиферромагнитной" СО-фазе с доменной стенкой, представляющей "резервуар" для допированных бозонов (или бозе-дырок) и зародыш сверхпроводящей (BS) фазы. Структура такого домена диаметром $3a = 12 \text{ \AA}$ (Рис.1) достаточно подробно рассмотрена в работе [3]. В простейшем приближении низкоэнергетическая физика ЕН-жидкости купратов при относительно небольшом отклонении от половинного заполнения ($n_B \leq 1/9, x \leq 0.22$) соответствует системе подвижных наноскопических доменов с зарядом $2|e|$, которые можно рассматривать как систему эффективных бесспиновых фермионов, описываемых в модели Хаббарда

$$\hat{H} = - \sum_{i>j} t_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + U \sum_i n_i n_i + \sum_{i>j} V_{ij} n_i n_j \quad (1)$$

с $U = \infty, V \neq 0$, и формирующих необычные (bad metal) транспортные свойства купратов. Богатая фазовая диаграмма такой системы включает фазу изотропной жидкости (bubble liquid), жидкокристаллическую (bubble liquid crystal) и кристаллическую (bubble crystal) фазы. Вместе с тем, такие домены являются носителями локальной сверхпроводимости и взаимодействуют подобно джозефсоновским контактам, образуя обобщенный гранулярный сверхпроводник.

Работа поддержана грантами РФФИ 06-02-17242, 06-03-90893, 07-02-96047.

1. Moskvin A.S., Low Temperature Physics, **33**, 234 (2007)
2. Moskvin A.S., Bostrem I.G., Ovchinnikov A.S., JETP Lett. **78**, 772 (2003)
3. Moskvin A.S., Phys. Rev. B **69**, 214505 (2004)

ОТЛИЧИЯ “РАЗРУШЕНИЯ” ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ ПСЕВДОЩЕЛЬЮ В ДЫРОЧНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ ВТСП

Некрасов И.А.¹, Кокорина Е.Е.¹, Кучинский Э.З.¹, Пчёлкина З.В.², Садовский М.В.¹

¹Институт электрофизики УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
E-mail: nekrasov@ier.uran.ru

²Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Существует два принципиально отличных друг от друга класса высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП): дырочно и электронно легированные. Типичная фазовая диаграмма ВТСП оксидов содержит так называемую псевдощелевую фазу при температурах выше сверхпроводящего перехода T_C и концентрациях легирующих примесей ниже оптимальной величины легирования (при которой T_C максимальна). Среди прочих можно выделить две наиболее хорошо изученных экспериментально ВТСП системы: электронно и дырочно легированные $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$ (Bi2212) и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_2$ (NCCO) [1]. Для сравнения электронных свойств псевдощелевой фазы в данных соединениях нами был применен метод LDA+DMFT+ Σ_k [2]. В данном методе удается обобщить стандартные уравнения теории динамического среднего поля (DMFT) [3], позволяющие решить модель Хаббарда в локальном приближении, за счет введения в них взаимодействия с “внешними” флуктуациями с характерным пространственным масштабом. В частности, для описания пространственно неоднородных электронных состояний в данной работе использована “внешняя” нелокальная собственно-энергетическая часть Σ_k , описывающая взаимодействие коррелированных электронов с короткодействующими антиферромагнитными флуктуациями. Для учета особенностей электронной структуры данных конкретных материалов были использованы зонные расчеты.

В данной работе теоретически были рассчитаны квазичастичные дисперсии, поверхности Ферми, фотоэмиссионные спектры с угловым разрешением и оптическая проводимость [4] для Bi2212 и NCCO. Полученные результаты демонстрируют полуколичественное согласие с результатами экспериментов. Показано, что отличия электронной структуры, полученной в рамках зонных расчетов, приводят к качественно разной картине разрушения поверхности Ферми в данных классах ВТСП систем в псевдощелевом режиме [5].

1. A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. 75, 473 (2003); J.C. Campuzano, M.R. Norman, M. Randeria, In "Physics of Superconductors Vol. II, ed. K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer, Berlin, 2004), p. 167-273; J. Fink, et al., cond-mat/0512307; X.J. Zhou, et al., cond-mat/0604284.
2. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, JETP Letters 82, 198 (2005); M.V. Sadovskii, et al., Phys. Rev. B 72, 155105 (2005).
3. Georges et al., Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
4. E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, Phys. Rev. B 75, 115102 (2007).
5. I.A.Nekrasov, et al., arXiv:0708.2313.

СКЕЙЛИНГ И ЗАТУХАНИЕ ДЛЯ ДВУМЕРНОЙ ФРУСТРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Михеенков А.В., Барабанов А.Ф.

Институт физики высоких давлений РАН, 142190, г. Троицк Моск. обл.

Данные нейтронных экспериментов по спиновой восприимчивости ВТСП купратов [1,2] воспроизводятся на основе сферически-симметричного подхода для фрустрированной модели Гейзенберга. Учет действительных и мнимых перенормировок спиновых функций Грина позволяет объяснить эволюцию спектра спиновых возбуждений $\omega(\mathbf{q})$ и восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ в диапазоне от диэлектрика до оптимального допирования [3].

В пределе малой фрустрации, отвечающем слабодопированному режиму, воспроизводится седловая особенность $\omega(\mathbf{q})$ (отметим, что ее объяснение в рамках стандартного спин-волнового подхода требует ферромагнитного обмена на вторых соседях) и скейлинг проинтегрированной восприимчивости $\chi_{2D}(\omega) = \int d\mathbf{q} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$. Наличие скейлинга однозначно определяет температурную зависимость затухания спиновых возбуждений при умеренном допировании, что позволяет получить аналитическое выражение для скейлинговой функции [3,4].

В режиме большой фрустрации (оптимальное допирование) демонстрируется страйп-сценарий, что позволяет получить пик $\chi_{2D}(\omega)$ в области $\omega \sim 60 \text{ meV}$.

Далее анализируется влияние полученного температурного закона затухания на переходы между шахматной фазой, спиновой жидкостью и страйп-фазой во фрустрированной модели Гейзенберга.

1. J. M. Tranquada, in *Handbook on High-Temperature Superconductivity. Theory and Experiment*, ed. J. R. Schrieffer, Springer, Berlin (2007), p.257; cond-mat/0512115.
2. R.J. Birgeneau, *et. al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 111003 (2006); cond-mat/0604667.
3. А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов, ЖЭТФ, **132**, 392 (2007).
4. A.F. Varabanov, *et. al.*, Phys.Lett., **A365**, 469 (2007).

ЭКСИТОНЫ ФРЕНКЕЛЯ КАК КОМПЗИТНЫЕ БОЗОНЫ: ТЕОРИЯ МНОГИХ ТЕЛ

Погосов В.В.^{1,2}, Combescot M.²

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412, Москва, ул.
Ижорская, 13

²Institut des NanoSciences de Paris, Université Paris 6, Campus Boucicaut, 140 rue de Lourmel,
75015 Paris, France

Рассмотрена модель свободных электронов в периодической решетке. Формализм вторичного квантования применен к изучению свойств такой системы. Состояния изолированной молекулы рассматривались в качестве базиса для описания экситонов Френкеля. Выведен гамильтониан системы в этом представлении, а также получено выражение для операторов рождения и уничтожения экситонов Френкеля – как делокализованных возбуждений, движущихся по системе.

Далее этот формализм применен к исследованию многочастичных свойств систем со многими экситонами, принимая во внимание фермионный характер частиц, из которых составлены экситоны Френкеля. Рассмотрены процессы, в которых участвует произвольное количество экситонов Френкеля. Учтены сложные процессы обмена электронами и дырками между отдельными экситонами. В результате, впервые без использования метода бозонизации, приводящего в случае составных частиц к неконтролируемым ошибкам, получены выражения для энергии системы с произвольным количеством экситонов Френкеля.

ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНИХ ПЕРЕСКОКОВ НА ЧАСТОТНУЮ И КВАЗИИМПУЛЬСНУЮ ЗАВИСИМОСТИ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Вальков В.В.^{1,2,3}, Пушкарев М.С.²

¹)Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38,

²)Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79,

³)Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, 660014

Красноярск, пр. Красноярский раб., 31.

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Известно, что высокотемпературные сверхпроводники относятся к классу сильно коррелированных систем. Поэтому механизмы сверхпроводящего спаривания в этих соединениях в большинстве случаев основываются на идеологии, отличающейся от классического БКШ сценария. Среди популярных моделей, приводящих к куперовской неустойчивости, часто используется $t - J$ - модель, описывающая, как известно, магнитный и спин-флуктуационные механизмы. В последнем случае важной величиной, влияющей на условия реализации сверхпроводящей фазы, является динамическая магнитная восприимчивость. В рамках феноменологических подходов эта функция не вычисляется, а постулируется на основе экспериментальных данных. С другой стороны, очевидно, что для построения последовательной теории сверхпроводящей фазы сильно коррелированных электронных систем динамическая магнитная восприимчивость должна быть рассчитана в рамках той же самой модели.

В данной работе приводятся результаты численного расчета по исследованию зависимости динамической магнитной восприимчивости от частоты и квазиимпульса. Конкретные вычисления проводились для модели Хаббарда в режиме сильных корреляций на основе формул, полученных в [1], в обобщенном приближении хаотических фаз. В ходе решения задачи, в соответствии с теорией [1], были вычислены четыре типа поляризационных операторов. При этом отказ от приближения ближайших соседей позволил выяснить влияние перескоков на узлы из дальних координационных сфер на положение максимумов динамической восприимчивости в двумерной зоне Бриллюэна. Была проанализирована также функциональная модификация магнитной восприимчивости при изменении уровня допирования. Проведено сравнение рассчитанной динамической восприимчивости с феноменологическими выражениями, которые используются в теориях высокотемпературной сверхпроводимости.

Работа выполнена при поддержке Программы Отделения физических наук РАН, РФФИ (грант № 07-02-00226), а также Интеграционного проекта СО РАН № 3.4.

1. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов.-М.: Физматлит, 1994.

МАГНИТНЫЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ГАЙЗЕНБЕРГА И $t - J$ МОДЕЛИ НА ДВУМЕРНОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Рубин П.Э., Шерман А.В.

Институт физики, Тартуский университет, Эстония, 51014 Тарту, ул. Рийа 142

E-mail: rubin@fi.tartu.ee

Для нахождения спектра магнитных возбуждений модели Гайзенберга и однодырочной дисперсии $t - J$ модели с помощью техники проекционных операторов Мори [1] были вычислены, соответственно, спиновая и дырочная функции Грина.

При нахождении спиновой функции Грина применялась схема расщепления многочастичных функций Грина с двумя вершинными поправками, аналогичная использованной в [2]. Для самосогласованного определения параметров функции Грина решалась система уравнений [3], включающая в себя уравнения, связывающие между собой спиновые корреляции на близких узлах, а также условие нулевой узельной намагниченности, отражающее инвариантность гамильтониана Гайзенберга относительно вращений. Использовалась решетка 1000×1000 с периодическими граничными условиями. Полученный спектр при $T = 0$ имеет минимумы при $\mathbf{k} = (0, 0)$ (в этой точке энергия магнитных возбуждений обращается в ноль), а также при векторах классического неелевского упорядочения $\mathbf{Q} = (4\pi/3, 0)$, $(2\pi/3, 2\pi/\sqrt{3})$ для треугольной решетки. Ненулевые значения энергии магнитных возбуждений в этих точках указывают на отсутствие дальнего порядка при $T = 0$. Существенным является то, что энергия основного состояния, отвечающего ближнему магнитному порядку, найденная в схеме с двумя вершинными поправками, оказывается ниже значений, получаемых для состояний с дальним порядком [4].

Спектр дырок в случае малого допирования рассчитан в двухполюсном приближении. Полученная дисперсия сильно зависит как от знака интеграла перескока (t), так и от отношения интеграла перескока к обменной константе (J). В дырочной картине в случае положительных t минимумы нижней дырочной зоны расположены в $\mathbf{k} = \mathbf{Q}$. В случае отрицательных интегралов перескока закон дисперсии имеет минимумы при $\mathbf{k} = \alpha\mathbf{Q}$, где $\alpha < 1$, причем α уменьшается с ростом $J/|t|$. При $J/|t| \approx 4.75$ минимумы сливаются в Γ точке. При положительных t с ростом J/t форма дырочной зоны остается неизменной, а ширина зоны падает. Для случая $t < 0$ форма зоны кардинально меняется с изменением $J/|t|$. Ширина зоны при этом ведет себя немонотонным образом, имея минимум при $J/|t| \approx 2$.

1. Mori H., Prog. Theor. Phys., **34**, 399 (1965)
2. Shimahara H., Takada S., J. Phys. Soc. Japan, **60**, 2394 (1991)
3. Rubin P., Sherman A., Phys. Lett. A, **334**, 312 (2005)
4. Zheng W., et al., cond-mat/0608008

ЭЛЕКТРОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С УЧЕТОМ ВЫРОЖДЕНИЯ

Шилов В.Е., Шилова Е.В.

Марийский Государственный университет, 424001 Йошкар–Ола, пл. Ленина, 1

E-mail: crabflo@mail.ru

В соединениях переходных металлов с узкими зонами в определенной области температур и давлений выявлены особенности в поведении различных свойств, в частности кинетики электронов, которые целиком обусловлены вырождением.

Принципиальное отличие вырожденных состояний от невырожденных, состоит в том, что при наличии вырождения по орбитальному квантовому числу на одном узле кристаллической решетки могут размещаться по два электрона с параллельными спинами. Вырождение по орбитальному квантовому числу снимается кристаллическим полем лишь частично. В данной работе рассмотрен вопрос о рассеянии медленных нейтронов [1] в рамках обобщенной трехмерной модели Хаббарда при наличии вырождения.

Известно, что модель Хаббарда [2] и её обобщения позволяют с единой точки зрения описать весьма широкий круг вопросов магнитного поведения чистых переходных металлов и их сплавов. Нами определен спектр спиновых волн в случае синглет – триплетных переходов, исходя из уравнения Дайсона [3]:

$$-\omega + \vec{\lambda} \cdot \vec{\alpha}(S, T) - \text{Re} \sum_T^S(\vec{k}, \omega) = 0,$$

где $\vec{\lambda}$ — вектор составленный из собственных значений, $\vec{\alpha}(S, T)$ — корневые векторы двухкратно вырожденной модели Хаббарда, $\sum_T^S(\vec{k}, \omega)$ — собственно-энергетическая часть в случае синглет триплетных переходов. При $\vec{k} \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$ найдено, что

$$\omega_T^S(\vec{k}) = 2J - 2(1 - C_T) \cdot \frac{k^2}{2m}.$$

Дважды дифференциальное сечение рассеяния пропорционально δ -функции, аргумент которой зависит от изучаемого спектра:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \sim \delta(\omega - \omega_T^S) = \delta\left(\omega - 2J + 2(1 - C_T) \cdot \frac{k^2}{2m_{\alpha\beta}}\right),$$

где J — хундовское обменное взаимодействие, $\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{\partial^2 t}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$ — эффективная масса, определяемая энергией туннелирования, C_T — концентрация электронов в триплетной зоне. Полученный результат показывает отчетливое различие в спектре магнитных возбуждений для вырожденного и не вырожденного случаев для принятой модели и интересен с точки зрения применения метода рассеяния медленных нейтронов при изучении магнитной динамики.

1. Изюмов Ю.А., Озеров Р.П., Магнитная нейтронография, Наука (1966)
2. Hubbard J., Proc. Ros. Soc. A., **276**, 238 (1963)
3. Ведяев А.В., Иванов В.А., Шилов В.Е., ТМФ, **64**, 163 (1985)

МЕТОД ТОЧНОЙ ДИАГОНАЛИЗАЦИИ С СОХРАНЕНИЕМ ПОЛНОГО СПИНА И УЧЕТОМ ТОЧЕЧНОЙ СИММЕТРИИ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО ИЗОТРОПНОГО ГАЙЗЕНБЕРГОВСКОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

Синицын В.Е.¹, Овчинников А.С.¹, Бострем И.Г.¹

¹Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51
E-mail: Valentine.Sinitsyn@usu.ru

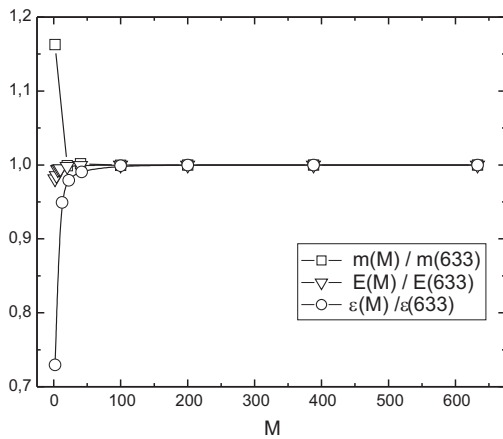


Рис. 1: Сходимость основных наблюдаемых к их точным значениям (M – размерность усеченного базиса)

позволяет решить задачу о нахождении $|\frac{1}{2}A_1\rangle$ точно, а с другой – оценить эффекты, связанные с переходом к усеченному базису меньшей размерности. Оказывается, что основные наблюдаемые, такие как энергия связи ϵ и намагниченность M , очень быстро сходятся к своим точным значениям (см. рис. 1), что позволяет применять предложенный метод к исследованию более крупных кластеров. Следует, однако, отметить, что для последних выбор эффективной процедуры усечения представляет собой самостоятельную проблему и оказывает решающее значение на точность конечных результатов.

Возьмем, например, кластер 5×5 спина $s = \frac{1}{2}$ на квадратной решетке. „Собрать“ его на базе кластера с $N = 12$ можно двумя различными способами, и каждый из них подразумевает собственную схему усечения. Их можно разделить на две категории: „усеченный базис остова + плюс полный набор состояний добавляемой части“ (данный вариант был опробован на примере кластера с $N = 17$) и „усеченный базис остова + усеченный набор состояний добавляемой части“. Прямой расчет показывает, что, в сравнении с QMC, именно первый метод дает более точные результаты.

В настоящей работе предлагается метод точной диагонализации для модели Гейзенберга спина S на конечном двумерном кластере. Особенностью метода является полный учет спиновой $SU(2)$ и точечной симметрий решетки, а также процедура усечения гильбертова пространства, сходная с ренорм-групповой. При этом точная диагонализация производится на каждом РГ-шаге дважды [1]. Данный метод применяется к системе $s = \frac{1}{2}$ на квадратной решетке, и для этого случая вычисляются локальные наблюдаемые. Предлагается схема усечения базиса и путем прямого численного расчета показывается ее эффективность.

Рассмотрим кластер, состоящий из $N = 12 + 5 = 17$ узлов. Размерность гильбертова пространства, которому принадлежит основное состояние $|\frac{1}{2}A_1\rangle$ данной системы, равняется 633. Это, с одной стороны,

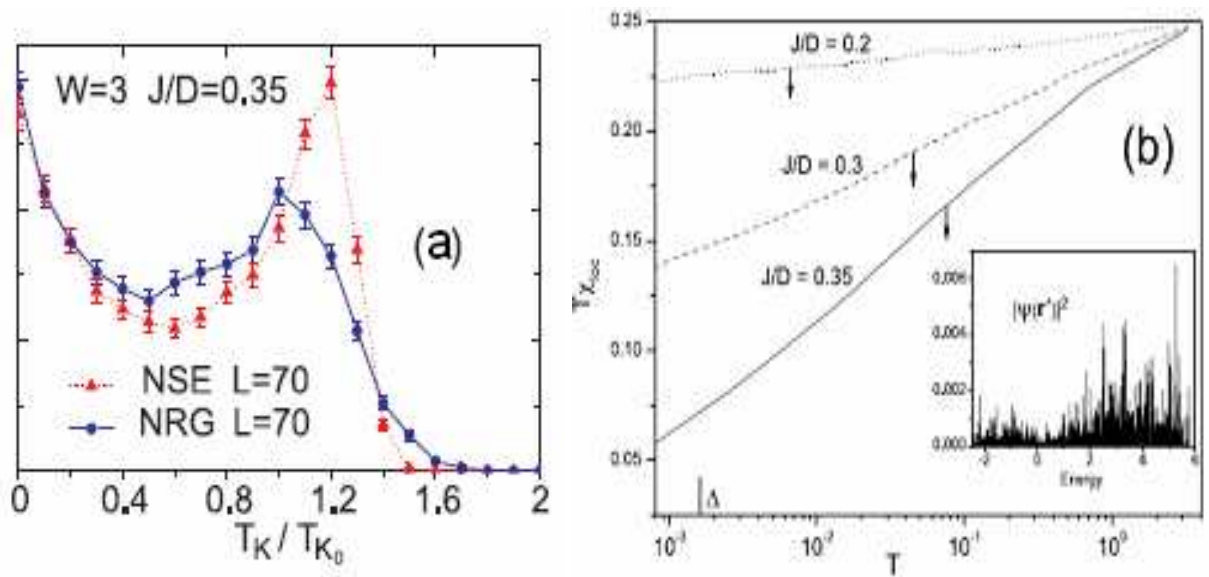
1. V.E. Sinitsyn, I.G. Bostrem, and A.S. Ovchinnikov, J. Phys. A: Theor. Math. **40**, 645 (2007).
2. A.W. Sandvik, Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).

НЕПЕРТУРБАТИВНАЯ ТЕОРИЯ ЭКРАНИРОВАНИЯ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННОМ МЕТАЛЛЕ

Журавлев А.К.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Проведены теоретические исследования на тему, возможно ли подавление кондовского экранирования за счет наличия в образце беспорядка [1]. Проведены расчеты для магнитной примеси, помещенной в различные узлы случайной квадратной решетки Андерсона, построены кривые примесной намагниченности и вычислено распределение температур Кондо (T_K) для разных конфигураций решетки. Это сделано с помощью техники численной ренормализационной группы (NRG), причем удалось доказать достоверность полученных результатов, что трудно сделать для применявшейся ранее теории возмущений Нагаоки–Сула (NSE). Найдено, что при определенных соотношениях между обменным интегралом J и величиной беспорядка W существует макроскопически большая доля свободных (неэкранированных) магнитных моментов (а). Экранировка отсутствует в том случае, если в локальной плотности электронных состояний на том узле, где находится магнитная примесь, на уровне Ферми имеется провал (б).



Таким образом, при одной и той же температуре часть магнитных моментов будет экранирована, а часть – нет. Этот новый эффект можно наблюдать экспериментально, например, с помощью туннельной микроскопии.

1. A. Zhuravlev, I. Zharekeshv, E. Gorelov, A.I. Lichtenstein, E.R. Mucciolo, S. Kettmann “Nonperturbative scaling theory of free magnetic moment phases in disordered metals”, принято в печать в *Physical Review Letters*. (текст доступен через arXiv:0706.3456v1)

СВОЙСТВА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ГАЙЗЕНБЕРГОВСКОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА С $S=1$ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Бострем И.Г.¹, Овчинников А.С.¹, Сеницын В.Е.¹

¹Уральский государственный университет им. А.М.Горького, 620083 Екатеринбург, пр. Ленина, 51
E-mail: irene.bostrem@usu.ru

Двумерный антиферромагнетик с гексагональной решеткой, образованной спинами $S = 1$, является упрощенной магнитной моделью недавно синтезированного семейства органических магнетиков *PNNNO* [1]. Целью настоящей работы являлось изучение зависимости параметров основного состояния магнитной системы от отношения величин междоцепочечного и внутрицепочечного обменного взаимодействия.

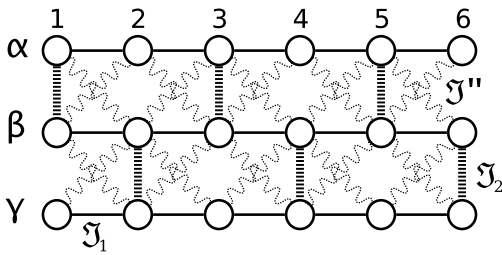


Рис. 1:

Рассматривался конечный кластер 3×6 (рис. 1); энергия и собственная функция основного состояния рассчитывались методами точной диагонализации и 2D-DMRG методом. Вначале использовалось приближение ближайших соседей (см. рис. 1). Рассчитывались спин-спиновые корреляционные функции для соседних спинов в цепочке и ближайших соседей в разных цепочках, а также намагниченность как функции отношения величин обменных интегралов меж- и внутрицепочечного взаимодействия. Изучение полученных зависимостей позволило сделать вывод, что переход от слабо взаимодействующих цепочек к двумерной магнитной структуре происходит при отношении $\frac{J_2}{J_1} \approx 0.33$.

Параметры основного состояния фрустрированной магнитной системы изучались для отношения $\frac{J_2}{J_1} = 0.5$. Дополнительно рассчитывались киральные параметры: скалярный и векторный. При увеличении величины обменного интеграла взаимодействия соседей, следующих за ближайшими в до значения $0.4J_1$ какого-либо аналога фазового перехода обнаружено не было. Изменения параметров основного состояния фрустрированного кластера могут быть интерпретированы как потеря коллинеарного упорядочения между цепочками при сохранении последнего внутри цепочек.

1. Hosokoshi Y, Nakazawa Y, Inoue K. et al, Phys. Rev. B, **60**, 12924 (1999)

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЕЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Мурзашев А.И.

Марийский педагогический институт им. Н.К.Крупской, 424002, Йошкар-Ола, ул. Коммунистическая, 44

Электронное строение углеродных нанотрубок (УНТ) представляет большой интерес. В настоящее время на основе зонных расчетов [1] установлено, что УНТ с хиральностью (n, m) в случае, когда $n - m$ кратна трем, являются металлами, в противном случае полупроводниками. Этот результат применим только к бесконечным УНТ, так как в случае конечных систем, понятие об электронной зоне уже не применимо. Вследствие этого для изучения электронных свойств конечных УНТ, необходимо применять модели, основанные на приближении сильной связи. Самой распространенной моделью, основанной на таком приближении, и допускающей аналитическое решение, является модель Хаббарда. В настоящей работе сделана попытка применить модель Хаббарда для изучения конечных УНТ. В этом плане очень полезным оказалось статическое флуктуационное приближение (СФП), впервые предложенное в [2]. Суть приближения, вкратце, в следующем: на одном узле учитываются сильные хаббардовские корреляции, и полученный результат, с учетом топологии, обобщается на всю систему. Метод, в принципе, не встречая принципиально непреодолимых проблем, позволяет, без привлечения зонных представлений, рассчитывать электронные свойства систем состоящих из любого (сколь угодно большого) числа частиц. Максимальное число атомов в рассмотренных нами кластерах 300.

В качестве объектов исследования были взяты кластеры, входящие в состав УНТ хиральностей $(5,5)$ и $(10,10)$. В числе, которых были кластеры, открытые с обеих сторон, закрытые с одного конца, закрытые с обоих концов.

Нами были вычислены антикоммутаторные функции Грина: $\langle\langle a_i^+ | a_j \rangle\rangle$, что позволило нам получить электронный спектр, который, с учетом вырождения расщепляется на N уровней (N - число атомов в системе). Анализ показал, что для каждого кластера существует некое критическое значение $x_c = U/b > 4$, где U и b известные параметры модели Хаббарда, такое, что при $x = U/b < x_c$ электронный спектр представляет собой аналог наполовину заполненной зоны проводимости, состоящей из дискретных уровней, находящихся на расстоянии порядка 0.01 ЭВ и меньше. При значениях x больших указанного значения, уровни разделяются на две группы, выше и ниже уровня Ферми. При росте N средние расстояния между уровнями и группами уровней уменьшаются. Анализ полученных спектров не выявил существенного отличия для кластеров, УНТ хиральностей $(5,5)$ и $(10,10)$.

Расчет средней энергии показал, что энергетически выгодными являются кластеры, оба конца которых закрыты.

1. R. Saito, *et al* Phys. Rev. B **46**, 1804 (1992).
2. В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматулин, ФНТ 22, 282 (1997).

МОДЕЛЬ БОЗЕ-ХАББАРДА ДЛЯ ТРИПЛЕТНЫХ БОЗОНОВ В МОДЕЛЬНОМ МАНГАНИТЕ

Аввакумов И.Л.¹, Москвин А.С.¹

¹Уральский государственный университет, 620083 Екатеринбург, ул. Ленина, 51
E-mail: ilya.avvakumov@usu.ru

Значительный интерес к модели Бозе-Хаббарда в последние годы вызван замечательным открытием Бозе-конденсации атомов в оптических решетках [1]. Вместе с тем, элементы типичного для бозонных систем поведения обнаруживают и многие сильнокоррелированные электронные системы, в частности, допированные купраты и манганиты [2-4]. Модель электронно-дырочной (EH) Бозе-жидкости манганитов, предложенная в работе [5], фактически сводится к модели Хаббарда для локальных (hard-core) триплетных бозонов, что делает ее чрезвычайно интересным объектом теории систем многих частиц. В наиболее простой модели манганита достаточно ограничиться орбитальными синглетами ${}^6A_{1g}$ и ${}^4A_{2g}$ для описания электронных и дырочных центров MnO_6^{10-} и MnO_6^{8-} , соответственно. Эффективный гамильтониан такой модели в отсутствие внешнего магнитного поля принимает вид гамильтониана квантового решеточного бозе-газа триплетных бозонов (QLTBG), движущихся в решетке дырочных центров MnO_6^{8-} (номинально Mn^{4+} ионов) со спином $S = 3/2$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{QLBG} + \hat{\mathcal{H}}_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \tau_{ij} \hat{T}_i^\dagger \hat{T}_j + \sum_{\langle ij \rangle} V_{ij} N_i N_j + \mu \sum_i N_i - \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{hh} \hat{S}_i \hat{S}_j - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{hb} \hat{s}_i \hat{S}_j - \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{bb} \hat{s}_i \hat{s}_j - \sum_i J_{ii}^{hb} \hat{s}_i \hat{S}_i. \quad (1)$$

Здесь $\hat{T}_{\alpha i}^\dagger$ - оператор рождения бозона со спином $s = 1$ и проекцией спина α на узле i ; $\hat{T}_{\alpha i}$ - соответствующий ему оператор уничтожения; \hat{S}_i - обычный спиновый оператор, τ_{ij} - интеграл переноса бозона, $J_{ij}^{hh}, J_{ij}^{hb}, J_{ij}^{bb}$ - двухцентровые обменные интегралы для двух дырочных центров, бозон-бозон, дырочный центр-бозон, соответственно; J_{ii}^{hb} - внутрицентровый обменный (хундовский) интеграл бозона с дырочным центром, суммирование проводится по ближайшим соседям. Оператор числа бозонов $N_i = \hat{T}_{\alpha i}^\dagger \hat{T}_{\alpha i}$ на i -ом узле в силу условия $V_{ii} \rightarrow +\infty$ может принимать только значения 0 и 1 (*hardcore boson*). Модель может рассматриваться как бозе-триплетный вариант известной в манганитах модели двойного обмена или т.н. $t - J$ модели, известной в купратах. Несмотря на предельную упрощенность гамильтониан QLTBG модели предсказывает весьма богатый спектр возможных состояний и физических свойств, включающий различные моды с сосуществованием спинового, зарядового, а также и недиагонального (сверхпроводящего) порядка. В модели молекулярного поля нами построены соответствующие фазовые диаграммы.

Работа поддержана грантами РФФИ 06-02-17242, 06-03-90893, 07-02-96047.

1. Greiner M., Mandel O., Esslinger T., Hänsch T.W., and Bloch I., Nature **415**, 39 (2002)
2. Alexandrov A.S., Bratkovsky A.M., J. Phys.: Condens. Matter **11** 1989 (1999)
3. Kim Yong-Jihn, Modern Physics Letters B. **12** 507 (1998)
4. Mitin A.V., Kuzmicheva G.M., Novikova S.I., Zhurnal Neorganicheskoy Himii, **42**, 1953 (1997)
5. Moskvin A.S., Avvakumov I.L., Physica B, **322/3-4**, 371 (2002)

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЕЛЯ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПОДРЕШЕТОЧНОЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ ДЛЯ СЛОИСТОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ В СЛОЕ

Игнатенко А.Н., Катанин А.А., Ирхин В.Ю.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: ignatenko@imp.uran.ru

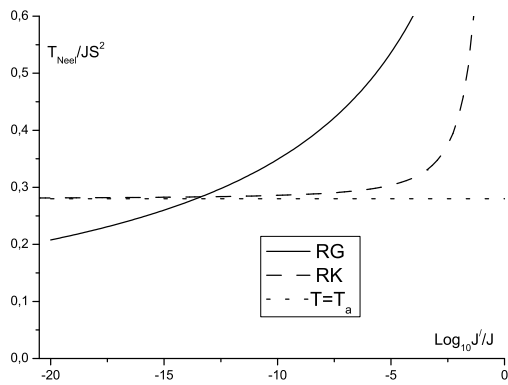


Рис. 1: Зависимость температуры Нееля от логарифма отношения обменных интегралов.

Гейзенберговский антиферромагнетик с треугольной решеткой (АТР) представляет собой яркий пример фрустрированного магнетика с магнитным порядком, подавленным уже в основном состоянии. Благодаря специфической геометрии треугольной решетки, при наличии обменного взаимодействия J ближайших соседей магнитный порядок в основном состоянии является не коллинеарным, а геликоидальным. Квантовые эффекты способны лишь отдалить имеющийся магнитный порядок от насыщения. Когда двумерные слои, каждый из которых является треугольной решеткой, не взаимодействуют друг с другом, то при любых конечных температурах дальний магнитный порядок отсутствует. Однако, если ввести малый межслоевой обмен J' то появляется фазовый переход при конечной температуре T_{Neel} , которая стремится к нулю при $J' \rightarrow 0$. При низких температурах термодинамическое поведение системы определяется элементарными возбуждениями. Это обстоятельство дает возможность представить температурное поведение подрешеточной намагниченности вплоть до точки перехода через термодинамические характеристики квазичастиц. Для слоистых систем с коллинеарным магнитным порядком этот подход оказался весьма успешным и привел к количественному согласию с экспериментом [1]. В нашем случае АТР жидкость квазичастиц получается другой, с иными свойствами симметрии, допускающими существование вихреподобных топологических возбуждений с конечной температурой активации T_a , которые похожи на вихри XY-модели. Нетопологические возбуждения имеет спин-волновую природу, и поэтому зависят от структуры решетки. Для работы с этими возбуждениями использовался метод ренормгруппы (РГ), который, являясь асимптотически точным вблизи нижней критической размерности $d_- = 2$ при $T \rightarrow 0$, однако, не учитывает вихри. Результат двухпетлевой РГ для температуры Нееля представлен на Рис. 1. При $J'/J > 10^{-14}$ температура становится достаточно большой для активации вихрей. В этом случае температура Нееля полностью определяется вихрями. Для оценки T_{Neel} в этом случае использовалась ренормгруппа Костерлица [2]. На Рис. 1 видно, что на протяжении достаточно большого интервала J'/J выше 10^{-14} T_{Neel} оказывается „прикрепленной“ к T_a . Что касается до немногих экспериментальных реализаций АТР, то все они имеют $J'/J \gg 10^{-14}$. Для VCl_2 , который имеет $J'/J = 0,006$, наша оценка T_{Neel} дает хорошее согласие с экспериментом.

1. Irkhin V.Yu. and Katanin A.A., Phys.Rev.B., **57**, №1. 379-391 (1998).
2. Kosterlitz J.M. J.Phys.C **7**, 1046 (1974).

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ sd -МОДЕЛИ ТОЧНЫМИ УРАВНЕНИЯМИ В ВАРИАЦИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Чащин Н.И.

Уральский государственный лесотехнический университет,
620100 Екатеринбург, ул. Сибирский тракт 37
E-mail: nik.iv.chaschin@mail.ru

Гамильтониан sd -модели записывается в виде:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - J \sum_{i\sigma_1\sigma_2} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_i)^{\sigma_1\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{i\sigma_2}. \quad (1)$$

Введём одночастичную электронную ФГ

$$\mathcal{L}_{12}(I_1, I_2) = - \begin{pmatrix} \langle T\Psi_1(I_1)\Psi_2^\dagger(I_2) \rangle & \langle T\Psi_1(I_1)\Psi_2(I_2) \rangle \\ \langle T\Psi_1^\dagger(I_1)\Psi_2^\dagger(I_2) \rangle & \langle T\Psi_1^\dagger(I_1)\Psi_2(I_2) \rangle \end{pmatrix}, \quad (2)$$

построенную на двухкомпонентных спинорах:

$$\Psi_i^\dagger(\sigma \alpha M) = \left(X_i^{(M+\frac{\sigma}{2})\alpha; M0}, \sigma X_i^{M2; (M-\frac{\sigma}{2})\bar{\alpha}} \right) \quad (3)$$

и $\Psi_i(\sigma \alpha M)$ – столбце, составленном из сопряженных X -операторов. Каждый элемент матрицы (2) сам является матрицей по спинорным индексам $\nu = 1, 2$. Цифровые индексы определяют номер узла i и мнимое время τ , а комбинированный буквенный индекс – совокупность четырёх дискретных параметров $\mathbf{i} = (\sigma M \alpha \nu)$. Систему четырех уравнений для ФГ (2) можно записать в виде единого матричного уравнения:

$$\left[(L_{0V}^{-1})_{11'}^{\sigma_1\sigma'} - (\widehat{A}\Phi Y)_{11'}^{\sigma_1\sigma'} - (\widehat{A}Y)_{11'}^{\sigma_1\sigma'} \right] \mathcal{L}_{1'2}^{\sigma'\sigma_2} = (\widehat{A}\Phi)_{12}^{\sigma_1\sigma_2}. \quad (4)$$

Величины, входящие в это уравнение, имеют тот же смысл, что и соответствующие величины в уравнении для модели Хаббарда [1], причём явная зависимость от параметров M, α , определяющих спиновую систему ионов, исключена их свёрткой с коэффициентами Клебша – Гордона [2,3].

Уравнение (4) стандартным образом приводит к уравнениям в вариационных производных для собственно энергетической Σ и концевой Λ частей свёрнутых по индексам M, α электронной ФГ: $\bar{\mathcal{L}}^{[11]} = G\Lambda$, где $G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$. Эти уравнения полностью эквивалентны соответствующим уравнениям модели Хаббарда [1,3] при половинном зонном заполнении, в которых величина SJ для больших значений S играет роль параметра кулоновского одноузельного взаимодействия U .

Значительный интерес для дальнейших исследований представляет случай антиферромагнитного обменного взаимодействия $J < 0$, что, как следует из полученных уравнений, соответствует модели Хаббарда с $U < 0$, т.е. в которой электроны на одном узле не отталкиваются, а эффективно притягиваются друг к другу.

1. Izyumov Yu.A., Chaschin N.I., Alexeev D.S., Manchini F., Eur.Phys.J., В **45**, 69 (2005)
2. Izyumov Yu.A., Chaschin N.I., Alexeev D.S., Cond. Matt. Phys., **9**, 3(47) (2006)
3. Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С., Теория сильнокоррелированных систем. Метод производящего функционала, Москва – Ижевск (2006)

НЕОБЫЧНЫЙ ОРБИТАЛЬНЫЙ ПОРЯДОК e_g -ЭЛЕКТРОНОВ ИОНОВ Mn^{3+} В СОЕДИНЕНИИ $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$

Коротин М.А.¹, Белозеров А.С.², Эктов А.В.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: michael.a.korotin@gmail.com

²Уральский государственный технический университет (УГТУ-УПИ), 620002 Екатеринбург, ул. Мира, 19
E-mail: belozerr@mail.ru

Недавно [1,2] было синтезировано соединение $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$, представляющее собой нелегированный манганит со смешанной валентностью ионов марганца, обладающее удвоенной перовскитной структурой (рис. 1). Во многих отношениях это соединение является аналогом легированных манганитов, таких как $La_{1-x}Ca_xMnO_3$.

Нейтроннографически были измерены [1,2] структурные свойства этого манганита, что позволило высказать предположение о необычном упорядочении e_g -орбиталей ионов Mn^{3+} типа $x^2 - y^2$, возникающем при низких температурах при СЕ-типе антиферромагнитного порядка, вследствие сжатия кислородных октаэдров вокруг ионов Mn^{3+} вдоль одной из осей. Наличие большого количества низкоэнергетических возбуждений в удельной теплоемкости при низких температурах объясняется в рамках гипотезы о слабом магнитном взаимодействии между ионами Mn в октаэдрическом блоке (позиции В типа) и в позициях А' типа (рис. 1).

Зонным методом ТВ-LMTO в LSDA+U подходе, явно учитывающем одноузельные кулоновские корреляции в приближении статического поля, нами изучена электронная структура, магнитные свойства, зарядовое и орбитальное упорядочение в соединении $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$. Основной результат – самосогласованная картина зарядового упорядочения ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} в блоке кислородных октаэдров, а также орбитального упорядочения e_g -электронов ионов Mn^{3+} – представлен на рис. 2. В докладе дополнительно будут обсуждены детали исследования, а также электронная структура и магнитные взаимодействия В и А' подрешеток ионов Mn.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 07-02-00041.

1. Prodi A., Gilioli E., Gauzzi A., Licci F., Marezio M., Bolzoni F., Huang Q., Santoro A., Lynn J.W., Nature Materials **3**, 48 (2004).
2. Gauzzi A., Gilioli E., Prodi A., Bolzoni F., Licci F., Marezio M., Calestani G.L., Affronte M., Huang Q., Santoro A., Lynn J.W., J. Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism **18**, 675 (2005).

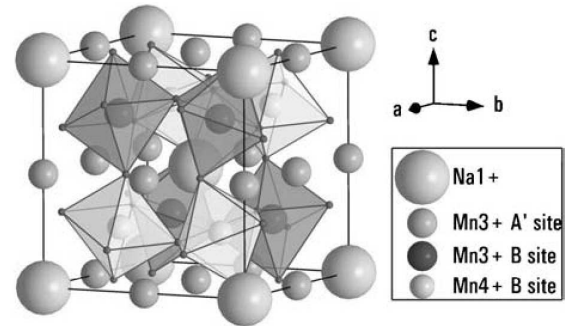


Рис. 1: Схематическое изображение кристаллической структуры соединения $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$. Рисунок воспроизведен из [2].

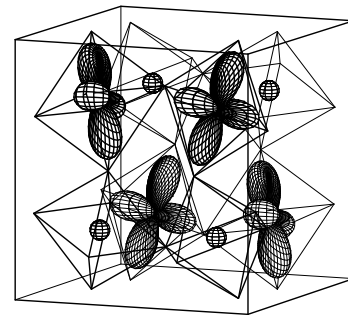


Рис. 2: Полученное в расчете упорядочение ионов Mn^{3+} (розетки) и Mn^{4+} (шары) и упорядочение $x^2 - y^2$ орбиталей ионов Mn^{3+} , расположенных в узлах В, в соединении $(NaMn_3)Mn_4O_{12}$.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПОД ДАВЛЕНИЕМ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЙ ДИЭЛЕКТРИК – ПАРАМАГНИТНЫЙ МЕТАЛЛ В Fe_2O_3

Кожевников А.В.¹, Анисимов В.И.¹, Кунеш Я.², Коротин Д.М.¹, Коротин М.А.¹

¹Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: michael.a.korotin@gmail.com

²Отдел теоретической физики III, Институт физики, Университет Аугсбурга, Германия
E-mail: jan.kunes@physik.uni-augsburg.de

Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что в основном состоянии Fe_2O_3 является антиферромагнитным диэлектриком с запрещенной щелью ~ 2.7 эВ и магнитным моментом иона $\text{Fe}^{3+} \sim 4.7 \mu_B$. Фазовый переход происходит при давлениях ~ 50 ГПа (что соответствует объему элементарной ячейки 82 % от равновесного объема V_0), при котором объем ячейки уменьшается почти на 10 % и симметрия кристаллической решетки понижается, изменяясь от ромбоэдрической до искаженной структуры корунда. Этот переход сопровождается возникновением металлической проводимости, стабилизацией низкоспинового состояния ионов Fe^{3+} и исчезновением дальнего магнитного порядка.

Задача заключается в первопринципном описании этого перехода под давлением. Электронная структура основного состояния, переход ионов Fe^{3+} из высоко- в низкоспиновое состояние под давлением исследовались в рамках приближения локальной электронной плотности методом обобщенного переходного состояния (*GTS*) в базе функций Ванье. Переход диэлектрик-металл под давлением исследовался в рамках приближения локальной электронной плотности, объединенного с теорией динамического среднего поля (*LDA+DMFT*). Примесная задача решалась квантовым методом Монте-Карло (*QMC*).

Метод *GTS* в базе функций Ванье позволил в хорошем согласии с экспериментом описать характеристики основного состояния Fe_2O_3 в симметричной фазе корунда (диэлектрик с запрещенной щелью 3.4 эВ, высокоспиновое состояние ионов Fe^{3+} с величиной магнитного момента $4.5 \mu_B$), а также переход ионов Fe^{3+} из высоко- в низкоспиновое состояние под давлением. Однако в методе *GTS* низкоспиновое решение при $V < 78 \% V_0$ остается диэлектриком.

В рамках *LDA+DMFT* подхода в Fe_2O_3 при исследованных объемах вблизи критического реализуется низкоспиновое состояние ионов Fe^{3+} с металлическим характером спектральных функций на уровне Ферми. При уменьшении объема элементарной ячейки от 80 % до 70 % от равновесного объема наблюдается усиление металлического характера полученного парамагнитного низкоспинового решения за счет увеличения спектральной плотности a_{1g} орбитали на уровне Ферми.

Согласно результатам *LDA+DMFT* расчетов, Fe_2O_3 является парамагнитным металлом даже в ромбоэдрической (симметричной) структуре корунда при объемах вблизи критического. При понижении симметрии кристаллической структуры до Rh_2O_3 типа величина спектральной плотности на уровне Ферми возрастает, при этом орбиталь a_{1g} дает больший металлический вклад на уровне Ферми. В спектральной плотности этой орбитали могут быть четко идентифицированы как квазичастичный пик на уровне Ферми, так и нижняя и верхняя хаббардовские зоны.

На основании результатов проведенных расчетов мы пришли к заключению, что электронные корреляции в *3d*-оболочке железа сохраняются и при высоких давлениях. Механизм перехода под давлением антиферромагнитный диэлектрик – парамагнитный металл в Fe_2O_3 является, в основном, электронным, а структурный переход играет второстепенную роль.

Работа выполнена в рамках проекта 28 программы Президиума РАН.

ПОСТРОЕНИЕ РЕАЛИСТИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ СОЕДИНЕНИЙ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИЙ ВАНЬЕПчёлкина З.В.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Из-за многочастичной природы корреляционных эффектов, сильно коррелированные системы (СКС) долгое время исследовались только в рамках модельных подходов. Теория динамического среднего поля (DMFT) позволила существенно продвинуться в понимании физических явлений, которые могут быть описаны в рамках модели Хаббарда. Для изучения реальных СКС потребовалось объединение идей зонной теории и модельных подходов. Так возник новый метод LDA+DMFT, в котором слабо коррелированные электроны рассматриваются в рамках приближения локальной электронной плотности (LDA), а сильно коррелированные (более локализованные) электроны описываются в рамках теории DMFT. Для исследования локализованных электронных состояний подходят функции Ванье (ФВ). Неоднозначность в определении ФВ долгое время препятствовала их применению в вычислительной физике. Недавно был предложен ряд методов построения ФВ на основе результатов зонных расчетов [1-3]. Повышенный интерес к ФВ связан с построением так называемых *ab initio* расчетных схем для сильно коррелированных соединений, в которых рассматриваются низкоэнергетические свойства этих систем и которые выходят за рамки стандартного (и слишком упрощенного в случае СКС) приближения LDA. В данном случае ФВ представляют собой базис физического гильбертова пространства, который используется для построения модельного гамильтониана [2-4]. Формализм ФВ позволяет получать из результатов зонных расчетов эффективные параметры моделей, связывая тем самым модельный подход с характерными особенностями реальных химических соединений. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-06-02-90537-БНТС, РФФИ-07-02-00540 и Фонда некоммерческих программ "Династия".

1. N. Marzari and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, **56**, 12847 (1997).
2. V.I. Anisimov *et al.*, Phys. Rev. B, **71**, 125119 (2005).
3. E. Pavarini *et al.*, New Journal of Physics, **7**, 188 (2005).
4. I.V. Solovyev *et al.*, Phys. Rev. B, **75**, 045110 (2007).

”N“

Нелинейные явления и неустойчивости

ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ ЭЛЕМЕНТНОЙ БАЗЫ ПОЛНОМАСШТАБНЫХ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ НА ОСНОВЕ ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ НАНОТЕХНОЛОГИИ

Кокин А.А.

Физико-технологический институт РАН, 17218, Москва, Нахимовский пр.,34
E-mail: aakokin@mail.ru

1. Основные понятия: кубит (qubit), квантовый регистр, квантовый вентиль (quantum gate). Общая схема структуры квантового компьютера
2. При создании любого полномасштабного квантового компьютера необходимо обеспечить пять основных условий: а) Иметь достаточно большое число контролируемых кубитов в квантовом регистре б) Возможность приготовления квантового регистра в исходном основном чистом квантовом состоянии (процесс инициализации) в) Необходимые помехоустойчивость вычислительных процессов и уровень подавления потери когерентности (декогерентизации) квантовых состояний. г) Выполнение однокубитовых и двухкубитовых унитарных операций с достаточно высокой скоростью. д) Надежное измерение квантовых состояний регистра (считывание результатов измерения) на выходе квантового компьютера.
3. Основные нетвердотельные направления: а) Квантовые компьютеры на низкоэнергетических состояниях ионов, захваченных силовыми ловушками в вакууме с индивидуальным обращением к кубитам б) Квантовые компьютеры на ядерных спинах с $I = 1/2$ в молекулах органической жидкости (ЯМР квантовые компьютеры) с ансамблевым обращением к кубитам. в) Недостатки нетвердотельного и преимущества твердотельного направлений
4. Модели твердотельных квантовых компьютеров с индивидуальным обращением к кубитам: а) Кремниевый квантовый компьютер на ядерных спинах (схема Б.Кейна) б) Квантовые компьютеры на электронных состояниях в квантовых точках в) Квантовые компьютеры на зарядовых и флюксоидных состояниях в сверхпроводниковых квантовых элементах г) Квантовые компьютеры на фуллеренах. д) Квантовые компьютеры на ионных ловушках в твердотельных микро- и наноструктурах
5. Модели ансамблевых твердотельных ЯМР квантовых компьютеров: а) Ансамблевый кремниевый ЯМР квантовый компьютер с полосковыми затворами б) Ансамблевые ЯМР квантовые компьютеры на естественных кристаллах
6. Квантовые компьютеры с архитектурой клеточных автоматов
7. Способы обеспечения помехоустойчивости квантовых вычислений

Выводы

НУТАЦИОННЫЕ ДВУМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ В МАГНЕТИКАХ

Борисов А.Б., Рыбаков Ф.Н.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
 E-mail: Borisov@imp.uran.ru

Найдены новые типы магнитных структур в модели Гейзенберга. Аналитическими методами описаны спиральные, спиральные вихревые структуры и их взаимодействие. Изолированный магнитный дефект характеризуется дискретными параметрами $N, Q, k \leq 1$ и параметром $c \leq 1$, который управляет "амплитудой" выхода спинов из плоскости xy . При $c = 1$ и $k = 0$ эти структуры совпадают с результатами работы [1] и [2] соответственно. Найденные структуры могут быть названы нутационными, поскольку угол θ лежит в диапазоне $\theta_{max} \leq \theta < \pi - \theta_{max}$ с максимальным значением $\cos \theta_{max} = c$. Случаю $N = 0$ соответствует вихревая магнитная "мишень". При $Q = 0$ азимутальный угол намагниченности Φ зависит от r, φ , не имеет вихревой зависимости, а компонента S_z представляет спиральную структуру. Изолированный магнитный дефект с дискретными параметрами $N \neq 0, Q \neq 0$ представляет собой спиральный вихрь с вихревым распределением поля Φ и спиральной структурой для S_z . Для $N = 1$ распределение S_z представляет собой два спиральных домена с противоположными направлениями намагниченности, разделенных двумя логарифмическими спиралями. Ширина спиральных солитонов (доменных границ) зависит от величины k и увеличивается с удалением от центра вихря. Параметр N определяет число рукавов логарифмической спирали. Поскольку спираль характеризуется двумя целыми числами (N, Q) , структура спиральных диполей имеет более разнообразный характер, чем для вихревых структур. Рассмотрим в качестве примера некоторые типы вихревых диполей. В отличие от многоинстантонных решений энергия многоспиральных конфигураций при $k \neq 1$ зависит от расстояний между центрами спиральных вихрей, что приводит к их взаимодействию. Энергия некоторых типов спиральных диполей не зависит от размеров системы L , на больших расстояниях плотность энергии обратно пропорциональна r^4 . Из-за малой энергии активации такие спиральные диполи могут зарождаться термофлуктуационным способом и вносить вклад в термодинамические свойства системы. Наблюдение спиральных структур возможно в искусственно упорядоченных ASM сплавов (artificially structured materials), где в процессе роста тонких пленок благодаря влиянию симметрии и низкоразмерным эффектам возникают новые фазы с неоднородным основным состоянием.

1. А.Б. Борисов, Письма в ЖЭТФ **75**, 242 (2001).
2. А.В. Borisov, I.G. Bostrem, A.S. Ovchinnikov, JETP Letters **80**, 846 (2004).

МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И ПАДЕ-АППРОКСИМАЦИЯ ТРАНСЦЕНДЕНТОВ ПЕНЛЕВЕ

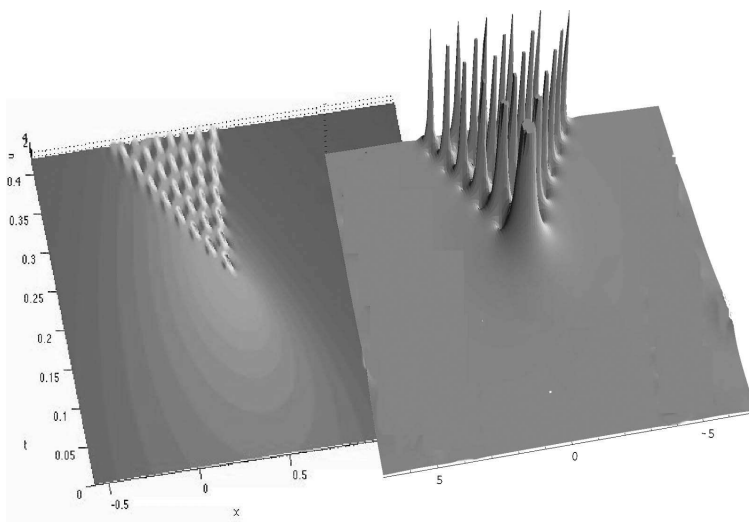
Новокшенов В.Ю.¹

¹Институт математики с ВЦ УНЦ РАН, 450077, Уфа, ул. Чернышевского, 112
E-mail: novokshenov@yahoo.com

Фокусирующее уравнение Шредингера

$$\varepsilon \Psi_t + \frac{\varepsilon^2}{2} \Psi_{xx} + |\Psi|^2 \Psi = 0$$

служит моделью для зарождения и развития модуляционной неустойчивости для начального профиля вида $\Psi(x, 0) = A(x) \exp\{iS(x)/\varepsilon\}$. Как показано в [1], для локализованного профиля $A(x)$ за конечное время развиваются быстрые осцилляции в расширяющейся по t области:



В этой области волновое поле выходит на автомодельный режим $\Psi(x, t, \varepsilon) \approx \Phi(X, T) + \varepsilon^{2/5} \Omega(\zeta)$, где X, T - медленные переменные, $\zeta = s(X, T)/\varepsilon^{4/5}$, а функция Ω является специальным решением уравнения Пенлеве-1

$$\Omega_{\zeta\zeta} = 6\Omega^2 - \zeta.$$

При этом максимумы пиков $|\Psi|$ отвечают полюсам решения Ω . Для описания распределения этих полюсов в работе построен алгоритм Паде-аппроксимации по начальному условию для любого решения Ω . Проверено распределение полюсов,

Рис. 1: Зарождение неустойчивости Ψ (слева) и полюсы Ω (справа)

приведенное в [1], а также доказана гипотеза об отсутствии полюсов в области $|\arg \zeta| < 4\pi/5$. При этом оказалось, что найденное ранее в [2] распределение полюсов на бесконечности хорошо приближается Паде-аппроксимацией при $|\zeta| \approx 10$. Выполнены также Паде-приближения для других функций Пенлеве, описывающих переходные режимы различных нелинейных волновых процессов.

1. V.Dubrovin, T.Grava and S.Klein, arXiv:0704.0501v2, (2007).
2. А.Р.Итс, А.А.Капаев, В.Ю.Новокшенов, А.С.Фокас, Трансценденты Пенлеве. Метод задачи Римана. - изд-во РХД «Регулярная и хаотическая динамика», Москва- Ижевск, 2005

СИЛЬНО ВЫРОЖДЕННАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Федоров В.Е.¹

¹Челябинский государственный университет, 454021 Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129
E-mail: kar@csu.ru

Пусть $\Omega \subset \mathbb{R}^s$ ограниченная область с границей $\partial\Omega$ класса C^∞ , $\lambda, \beta \in \mathbb{R}$. Рассмотрим систему уравнений

$$u_t(x, t) = \Delta u(x, t) - \Delta v(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (1)$$

$$\Delta v(x, t) + \beta v(x, t) + u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (2)$$

с точностью до линейной замены неизвестных функций $u(x, t)$ и $v(x, t)$ совпадающую с линеаризованной системой уравнений фазового поля [1]. Снабдим ее краевыми условиями

$$(1 - \lambda)u(x, t) + \lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x, t) = 0, \quad (1 - \lambda)v(x, t) + \lambda \frac{\partial v}{\partial n}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (3)$$

которые при $\lambda = 0$ являются условиями Дирихле, а при $\lambda = 1$ – условиями Неймана. Система является вырожденной, поэтому начально-краевая задача для нее разрешима не при всяких значениях u_0, v_0 в начальном условии

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (4)$$

Введем обозначения $Aw = \Delta w$, $\text{dom}A = \{w \in H^2(\Omega) : (1 - \lambda)w(x) + \lambda \frac{\partial w}{\partial n}(x) = 0, x \in \partial\Omega\}$. Через $\{\varphi_k : k \in \mathbb{N}\}$ обозначим ортонормированные в смысле скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle$ в $L_2(\Omega)$ собственные функции оператора A , занумерованные по невозрастанию собственных значений $\{\lambda_k : k \in \mathbb{N}\}$ с учетом их кратности. Обозначим $\mathbb{M} = \{k \in \mathbb{N} : \lambda_k \neq -\beta\}$, для $k \in \mathbb{M}$ $\delta_k = \frac{(\beta+1+\lambda_k)\lambda_k}{\beta+\lambda_k}$, $\mathcal{U} = \overline{\text{span}}\{\varphi_k : k \in \mathbb{M}\}$. Верхняя черта здесь означает замыкание множества в норме $L_2(\Omega)$.

Ранее [2] разрешимость задачи (1) – (4) была исследована при условии слабого вырождения системы $-\beta \notin \sigma(A)$. Было показано, что существует единственное решение начально-краевой задачи только при условии $v_0 \equiv 0$ при всяком $u_0 \in L_2(\Omega)$. В данной работе рассмотрим случай $-\beta \in \sigma(A)$.

ТЕОРЕМА 5. Пусть $-\beta \in \sigma(A)$. Тогда при $v_0 \equiv 0$ для любого $u_0 \in \mathcal{U}$ существует единственное решение задачи (1) – (4), при этом оно имеет вид

$$u(x, t) = \sum_{k \in \mathbb{M}} e^{\delta_k t} \langle u_0, \varphi_k \rangle \varphi_k, \quad v(x, t) = \sum_{k \in \mathbb{M}} \frac{e^{\delta_k t} \langle u_0, \varphi_k \rangle \varphi_k}{(-\beta - \lambda_k)}.$$

Для других пар (u_0, v_0) решения задачи (1) – (4) не существует.

1. Плотников П.И., Старовойтов В.Н., Дифференц. уравнения, **29**, 461 (1993)
2. Федоров В.Е., Тез. докл. XXXI Международной зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка - 2006", 152 (2006)

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ НА ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ В ТАНГЕНЦИАЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Зубарев Н.М.¹, Зубарева О.В.²

Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амурдсена, 106
E-mail: ¹nick@ami.uran.ru, ²olga@ami.uran.ru

В работе [1] нами было показано, что волны произвольной конфигурации могут распространяться без искажений по поверхности диэлектрической жидкости в сильном тангенциальном электрическом поле. Возникает вопрос об устойчивости найденных нами волновых решений. Если для волн малой (но конечной) амплитуды доказательство устойчивости не вызывает сложностей [2], то для волн произвольной амплитуды возникает необходимость использования методов описания динамики свободной поверхности жидкости [3], основанных на использовании конформных переменных. Эволюция поверхности в новых переменных описывается следующими безразмерными уравнениями:

$$\begin{aligned}\Psi_t(1 - \hat{H}Y_u) + \Psi_u \hat{H}Y_t + \hat{H}(Y_t \Psi_u - Y_u \Psi_t) &= \hat{H}Y_u, \\ Y_t(1 - \hat{H}Y_u) + Y_u \hat{H}Y_t &= -\hat{H}\Psi_u,\end{aligned}$$

где \hat{H} — оператор Гильберта, u и $\Psi(u, t)$ — потенциалы электрического поля и скорости жидкости на ее поверхности, а $Y(u, t)$ задает отклонение поверхности от плоской. Точными частными решениями этих уравнений являются: $\Psi = \pm \hat{H}Y = F(u \pm t)$, где F — произвольная функция. Они соответствуют волнам произвольной геометрии, распространяющимся (по отдельности) по направлению, либо против направления поля. Рассмотрим устойчивость волн, распространяющихся в направлении оси u . Дисперсионное соотношение для эволюции малых возмущений профиля волны и поля скоростей, как оказалось, имеет две ветви:

$$\omega = k, \quad \omega = k - 2k / ((1 + F')^2 + (\hat{H}F')^2).$$

Первая ветвь соответствует возмущениям, распространяющимся вместе с волной, и интереса не представляет. Вторая ветвь соответствует возмущениям, распространяющимся в противоположном от основной волны направлении. Поскольку линейные волны не взаимодействуют, в пределе малых F будет $\omega = -k$. При конечных F характер эволюции возмущений меняется за счет нелинейного взаимодействия волн. В любом случае, частота остается вещественной, и амплитуда возмущений не будет нарастать со временем. Это доказывает устойчивость волновых решений произвольной формы. В заключение отметим, что все результаты работы обобщаются на случай жидкости конечной глубины.

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал (проект 07-02-96035) и Совета по грантам Президента РФ (проект МД-2553.2007.2).

1. Зубарев Н.М., Зубарева О.В., ПЖТФ, **32** (20), 40 (2006).
2. Zubarev N.M., Phys. Lett. A., **333**, 284 (2004).
3. Dyachenko A.I., Kuznetsov E.A., Spector M.D., Zakharov V.E., Phys. Lett. A., **221**, 73 (1996).

АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ ЦИКЛОТРОННОГО АВТОРЕЗОНАНСА

Калякин Л.А.¹

¹Институт математики с ВЦ РАН, 450077 Уфа, ул. Чернышевского, 112
E-mail: klenru@mail.ru

Теория циклотронного авторезонанса [1,2] (авторезонанса между волной и частицей) основывается на анализе первых интегралов системы автономных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}\frac{dP_z}{dt} &= \frac{d\gamma}{dt} = \frac{P_\perp}{2\gamma} a \cos \varphi, \\ \frac{dP_\perp}{dt} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{P_z}{\gamma}\right) a \cos \varphi, \\ \frac{d\theta_c}{dt} &= -\frac{\Omega}{\gamma} + \frac{1}{2P_\perp} \left(1 - \frac{P_z}{\gamma}\right) a \sin \varphi, \\ \frac{d\theta}{dt} &= -1 + \frac{P_z}{\gamma}, \quad \varphi = \theta - \theta_c, \quad (\Omega, a = \text{const}).\end{aligned}\tag{1}$$

Известный класс авторезонансных решений с неограниченно растущим продольным импульсом частицы P_z оказывается довольно беден. По этой причине явление циклотронного авторезонанса "в чистом виде" невозможно обнаружить ни в численных, ни в физических экспериментах. Физически наблюдаемыми являются состояния, которые соответствуют достаточно богатому семейству решений, близких к авторезонансным. Однако, аккуратный математический анализ таких решений до сих пор не проводился, и достоверные оценки точности приближенных результатов отсутствуют. В предлагаемом докладе указывается дополнительный первый интеграл. Набор первых интегралов выглядит следующим образом

$$\begin{aligned}\gamma - P_z &= Y = \text{const}, \quad P_\perp^2 - 2Y\gamma = X = \text{const}, \\ \sqrt{X - 2Y\gamma} \sin \varphi - 2\gamma \left(\frac{\Omega - Y}{a}\right) &= Z = \text{const}.\end{aligned}\tag{2}$$

Это позволяет полностью проинтегрировать систему (1) и проанализировать богатое семейство решений, близких к авторезонансным, которым соответствуют частные решения с $Y = \Omega$.

1. Коломенский А.А., Лебедев А.Н., ДАН СССР, **145**, 1259 (1962)
2. Милантьев В.П., УФН, **167**, 3 (1997)

АВТОРЕЗОНАНС В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Шамсутдинов М.А.¹, Калякин Л.А.²¹Башкирский государственный университет, 450074, Уфа, ул. Фрунзе, 32²Институт математики с ВЦ УНЦ РАН, 450077, Уфа, ул. Чернышевского, 112.

Настоящий доклад посвящен изложению результатов по теоретическому изучению условий возбуждения нелинейных колебаний намагниченности в однодоменных частицах и магнитных пленках, а также нелинейных колебаний доменных стенок в магнитных пластинах. В отличие от известных исследований в работе изучается возможность возбуждения нелинейных колебаний переменными полями достаточно малой амплитуды. Трудность возбуждения колебаний с достаточно большой амплитудой слабыми внешними воздействиями заключается в том, что с ростом амплитуды колебаний резонанс, как правило, не сохраняется. Для поддержания резонансных условий требуется подстройка частоты динамической системы под частоту внешнего воздействия. Явление автоматической подстройки собственной частоты динамической системы под частоту внешнего воздействия называется авторезонансом (иногда – автофазировкой). Явление автофазировки в ферромагнетиках, как в экспериментальном, так и теоретическом отношении остается малоизученным.

В настоящей работе показано, что авторезонансные возбуждения нелинейных колебаний намагниченности возможны в двух случаях: 1) на частоте линейного ФМР при медленном росте со временем величины резонансного поля; 2) неизменной величине резонансного поля при медленном изменении со временем частоты возбуждающего поля. В случае наличия затухания явление авторезонанса сохраняется при медленном росте со временем и амплитуды возбуждающего поля. Определены пороговые значения амплитуды и скорости изменения амплитуды со временем, выше которых возможно авторезонансное возбуждение нелинейных колебаний намагниченности в однодоменных образцах и нелинейных колебаний доменных стенок в пластинах.

НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ЭКРАНИРОВАНИЯ ЗАРЯЖЕННОЙ ПРИМЕСИ ДВУМЕРНЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Васильченко А.А.¹

¹Кубанский государственный технологический университет, 350072, Краснодар, ул. Московская, 2

Учет кулоновского взаимодействия электронов становится особенно важным в случае, когда энергия взаимодействия электронов значительно превышает их кинетическую энергию. В этом случае задача экранирования заряженной примеси двумерными электронами до конца не решена как в магнитном поле, так и без него [1]. В настоящее время одним из самых мощных методов учета многочастичного взаимодействия является теория функционала плотности. В работе решается задача, связанная с экранированием положительно заряженной примеси двумерными спин-поляризованными электронами в перпендикулярном магнитном поле. Использовалась теория функционала плотности с учетом обменного взаимодействия в локальном приближении. Численно решена нелинейная система уравнений Кона-Шэма для двумерных электронов.

Результаты расчетов для квантовой точки (с числом электронов N до 200) при факторе заполнения уровня Ландау $\nu = 1$ показали, что профиль электронной плотности имеет осцилляционный вид, причем период осцилляций $\approx \pi L$ (L – магнитная длина). С уменьшением средней плотности электронов амплитуды этих осцилляций растут и распределение электронной плотности принимает форму колец. При этом средние расстояния электронов от центра квантовой точки стремятся к величинам $R_e \approx n\pi L$, где n – целое число. Отметим, что на примеси локализуется два электрона с угловыми моментами $m = 0$ и $m = 1$, волновые функции которых при низких магнитных полях практически не перекрываются с волновыми функциями других электронов.

При факторе заполнения $\nu < 1$ получено, что примесь изменяет набор магических чисел для полного углового момента электронов. Найдены новые серии магических чисел с периодами $\Delta M = N - k$, где $k=1, 2, 3, 4$. Такой период означает, что k электронов имеют компактную конфигурацию и находятся в центре квантовой точки, а остальные распределены по кольцу ($N < 15$).

Подобный результат для фактора заполнения уровня Ландау $\nu < 0,4$ получен в работе [2], где на основе точного решения многочастичного уравнения Шредингера для числа электронов $N < 10$ показано, что электроны в квантовой точке кристаллизуются и образуют вигнеровскую молекулу с полигональной конфигурацией электронов и одним электроном в центре.

1. E. Zaremba, I. Nagy, P.M. Echenique, Phys. Rev. B **71**, 125323, (2005)
2. C. Yannouleas and U. Landman, Phys. Rev. B, **70**, 235319, (2004)

АНАЛИЗ НЕУСТОЙЧИВОСТИ СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ С ПРИЛОЖЕНИЕМ К ИНВАРУ $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$

Резер Б.И.¹, Мельников Н.Б.^{2,3}

¹) Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: reser@imp.uran.ru

²) Центральный экономико-математический институт РАН,
117418, Москва, Нахимовский пр., 47

³) Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы
E-mail: melnikov@cs.msu.su

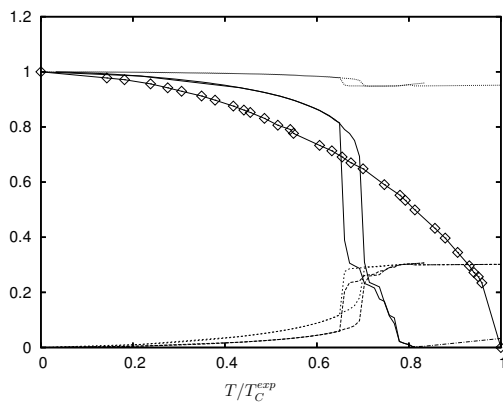


Рис. 1: Намагниченность $m(T)/m(0)$ (— $\diamond\diamond\diamond\diamond$ — эксперимент [3]), средние квадраты спиновых флуктуаций ζ^x (-----) и ζ^z (- · -) в единицах квадрата среднего обменного поля при $T = 0$, обратная парамагнитная восприимчивость $\chi^{-1}(T)$ (- · · -) в единицах T_C^{exp}/μ_B^2 и локальный магнитный момент $m_L(T)/m(0)$ (·····) инвара $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$, рассчитанные в динамическом нелокальном приближении ТСФ с $m_0^{exp} = 1.75\mu_B$ при циклическом изменении температуры.

Расчеты показали, что решение системы нелинейных уравнений теории спиновых флуктуаций (ТСФ) недостаточно устойчиво вблизи температуры фазового перехода T_C . Особенно ярко это выражено в Fe [1] и в сплаве Fe-Ni [2], где спиновые флуктуации вблизи T_C резко возрастают.

На примере инвара $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$ мы исследовали решение системы уравнений ТСФ, используя два численных метода: покоординатной бисекции и многомерной минимизации. Оба метода дают удовлетворительные результаты при конечных температурах и демонстрируют неустойчивость ниже температуры фазового перехода. Посредством гистерезисного поведения магнитных характеристик (Рис. 1) мы показали [4, 5], что неустойчивость решения обусловлена вырождением системы при высоких температурах, то есть проблема не в методе решения, а в самой системе. Основываясь на этом, сделали заключения об эффективности и пригодности обоих методов и предложили возможные усовершенствования системы уравнений ТСФ.

Заметим, что точная проверка вырождения системы ТСФ трудна, так как конечно-разностные аппроксимации градиентов приводят к значительной потере точности. Вместо этого мы демонстрируем вырождение системы, используя методы теории особенностей [5]. Практическое приложение теории

особенностей к анализу неустойчивости ново́ и может представлять интерес для специалистов по вычислительной физике вне ТСФ.

1. Резер Б.И., Гребенников В.И., ФММ, **85**, 30 (1998)
2. Reser B.I., J. Phys.: Condens. Matter, **16**, 361 (2004)
3. Crangle J., Hallam G.C., Proc. Roy. Soc. A, **272** 119 (1963)
4. Melnikov N.B., Reser B.I., Proceedings of Dynamic Systems and Applications, vol. 5, Atlanta: Dynamic Publishers (2008), in press
5. Reser B.I., Melnikov N.B., J. Phys.: Condens. Matter, **20** (2008), in press

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ЭВОЛЮЦИИ МАГНИТНЫХ
НЕОДНОРОДНОСТЕЙ СОЛИТОННОГО И ПУЛЬСОННОГО ТИПА В ФЕРРО-
И АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ С ОДНО И ДВУМЕРНОЙ МОДУЛЯЦИЕЙ
МАГНИТНЫХ ПАРАМЕТРОВ

Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р.

Башкирский Государственный Университет, 450074, Уфа, ул. Фрунзе, 32

В разнообразных физических приложениях большой интерес представляет характер рассеяния подвижного возбуждения, в том числе солитонов и кинков, на локальных неоднородностях параметров материала, которые моделируют дефекты в изучаемой среде [1]. Для магнетиков в случае одномерных локальных неоднородностей задача при определенных условиях сводится к изучению модифицированного уравнения синус-Гордона с переменными коэффициентами [2]. В работе [3] исследовано изменение структуры доменной границы (ДГ) при пересечении дефекта в тонкой пластине ортоферрита иттрия. Поэтому представляет интерес исследование динамики ДГ слабых ферромагнетиках с произвольной по величине одно и двумерной модуляцией магнитных параметров (например, константы магнитной анизотропии, обменной константы и намагниченности насыщения) с точки зрения возбуждения и излучения нелинейных волн.

Для 1D случая модуляции магнитных параметров исследована динамика пиннинга ДГ при скоростях движения меньших пороговых. Обнаружено, что после прохождения ДГ области неоднородности параметров, в этой области остаются локализованные колебания намагниченности среды, которые при определенных условиях приводят к зарождению магнитных неоднородностей типа бризера и 0-градусной доменной границы. Для 2D случая модуляции магнитных параметров рассмотрен процесс зарождения и эволюция уединенной изгибающей волны на ДГ, пересекающей область неоднородности параметров. Показано, что уединенная изгибающая волна является "кинком на кинке". Исследовано также возбуждение и эволюция, в области дефекта, магнитной неоднородности типа слабоизлучающего пульсона [4].

1. А.М. Косевич, А.С. Ковалев., Введение в нелинейную физическую механику, -Киев: Наукова думка (1989).
2. D.J. Paul J. Phys. Solid State Phys, **12**, 585 (1979).
3. М.В. Четкин, Ю.Н. Курбатова, ФТТ **43**, 1503 (2001).
4. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, Солитоны и нелинейные волновые уравнения, М.: Мир (1988).

НЕЛИНЕЙНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ПОСТУПАТЕЛЬНОЕ ДВИЖЕНИЕ СВЯЗАННЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Асадуллин Ф.Ф.², Котов Л.Н.¹, Власов В.С.¹, Полещиков С.М.², Асадуллина Н.С.², Колецов В.В.³, Шавров В.Г.³

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

²Сыктывкарский лесной институт, 167000, Сыктывкар, ул. Ленина, 39

³Институт радиотехники и электроники РАН, 125009, Москва, ул. Моховая, 11, корп.7

В работе исследовалось влияние значений параметров затухания γ и амплитуды параметрического возбуждения A на возникновение поступательного движения в первой и второй зонах параметрического возбуждения. При наличии нелинейности упругих сил ($\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq 0$) возникает неустойчивость колебаний. Эта неустойчивость колебаний перерастает в поступательное движение, которое наступает по прошествии некоторого времени. При параметрическом воздействии на систему связанных осцилляторов [1] идет накопление энергии нелинейных колебаний в течение определенного промежутка времени, который определяется параметром нелинейности α_1 и константой затухания γ . В конечном итоге, из-за неустойчивости колебаний их энергия переходит в энергию поступательного движения. Увеличение константы затухания γ приводит к значительному уменьшению скорости системы. При значениях $\gamma > 10^{-2}$ поступательного движения в системе не возникает.

Поступательное движение возникает при некоторой пороговой амплитуде $A_{\text{пор}}$, а при больших амплитудах A колебания соседних осцилляторов становятся хаотическими и движение прекращается. Поступательное движение существует только в ограниченной области амплитуд. Необходимо отметить, что при прошествии большего времени существования возбуждённых колебаний осцилляторов пороговая амплитуда уменьшается.

Численное решение показывает, что скорость осцилляторов зависит от константы затухания γ но при этом интервал амплитуды параметрического возбуждения A , в котором возникает поступательное движение, остается почти неизменным.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Ф.Ф. Асадуллин *et. al.*, Сборник трудов НМММ XX, 76 (2006).

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ АКУСТИЧЕСКИХ ГАРМОНИК В ФЕРРИТЕ
ПРИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Безносиков Д.С., Котов Л.Н.

Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский проспект,
55

В качестве исследуемых образцов был использован поликристаллический железо-иттриевый гранат с примесью алюминия (ЖИАГ) $Y_3Fe_{5-x}Al_xO_{12}$ ($x=0, 0.3, 0.7, 1.0$). Образец (размеры кристаллических зёрен порядка 5 мкм) с размерами $4 \times 4 \times 10$ мм³, приклеивался к длинному (с диаметром порядка 7 мм и длиной 80 мм) кварцевому волноводу. Ко второму концу волновода приклеивался кварцевый сдвиговый пьезопреобразователь с резонансной частотой 18.9 МГц. Выход пьезопреобразователя соединялся с приемным трактом импульсного когерентного радиоспектрометра ИСП-1. Ферритовый образец помещался в катушку индуктивности колебательного контура радиоспектрометра (диапазон рабочих частот 2-20 МГц, длительность радиоимпульсов в пределах от 1 до 100 мкс). В экспериментах частота заполнения радиоимпульсов и частота переменного магнитного поля соответствовала 1/3, 1/2, 1 от величины резонансной частоты пьезопреобразователя 18,9 МГц: 6.3, 9.45, 18,9 МГц. Набор таких частот переменного поля позволял регистрировать 1, 2, 3 гармонику упругих волн, возбуждаемых в образце.

В данной работе разработана методика возбуждения упругих колебаний различных гармоник в ферритовом образце крупного размера. Впервые в ВЧ диапазоне при возбуждении радиочастотным магнитным полем ферритового образца обнаружено возникновение 2 и 3 гармоники упругих волн. Получены экспериментальные зависимости амплитуды отклика, пропорциональные амплитуде возбуждаемых упругих волн, от постоянного магнитного поля, амплитуды и длительности импульса переменного поля при комнатной температуре.

При малых амплитудах полей для всех гармоник характерна линейная зависимость амплитуды отклика от длительности возбуждающего радиоимпульса, а при дальнейшем увеличении амплитуда отклика входит в насыщение. Также для всех гармоник характерна резонансная зависимость от постоянного магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Б.А. Голдин, et al., *Спин-фононные взаимодействия в кристаллах (ферритах)*. Л.:Наука (1991).

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ВЧ И СВЧ МАГНИТОУПРУГОЙ ДИНАМИКИ В ФЕРРИТОВОЙ ПЛЁНКЕ

Власов В.С.¹, Котов Л.Н.¹, Асадуллин Ф.Ф.², Щеглов В.И.³, Шавров В.Г.³¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55²Сыктывкарский лесной институт, 167000, Сыктывкар, ул. Ленина, 39³Институт радиотехники и электроники РАН, 125009, Москва, ул. Моховая, 11, корп.7

К настоящему времени изучена нелинейная магнитная динамика плёнок и частично ансамблей частиц [1]. Однако мало исследованы динамические магнитоупругие эффекты, связанные с разностью времен релаксации магнитной и упругой подсистем в нелинейном режиме. В данной работе теоретически рассмотрены нелинейные и релаксационные явления в магнитоупругой динамике ферритовой пленки вблизи акустического резонанса (АР), обусловленные различием времен релаксации подсистем.

Получена система уравнений, которая описывает магнитоупругую нелинейную динамику в пленке из уравнения Ландау-Лифшица и уравнения для вектора механического смещения. Определены выражения для компонент эффективных магнитных полей, которые были использованы для моделирования магнитных и упругих колебаний плёнки в зависимости от внешних условий и параметров материала. Выявлены интервалы значений материальных параметров (параметра магнитной диссипации, намагниченности насыщения, константы магнитоупругой связи), в которых происходит наибольшее изменение релаксационных и нелинейных свойств ферритовой плёнки, а также наблюдается максимальное взаимодействие магнитной и упругой подсистем. Определена зависимость времени релаксации магнитоупругих колебаний от параметра магнитной диссипации, а также материальных параметров и внешних магнитных полей при условии АР. Обнаружены различные области релаксации нелинейных магнитных и упругих колебаний после действия импульса переменного поля в ферритовой пленке. Обнаружено возникновение магнитоупругих автоколебаний релаксационного типа в пленке вблизи АР. Определена амплитуда порога возбуждения магнитоупругих автоколебаний в широком интервале значений параметра магнитной диссипации, намагниченности насыщения материала пленки, константы магнитоупругой связи и относительной расстройки частоты магнитной и упругой подсистем. Выявлен механизм возникновения и гашения автоколебаний.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 06-02-17302).

1. Л.Н. Котов, Л.С. Носов, ЖТФ, **75**, 55 (2005) (2004)

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В СЛОЕВЫХ ФАЗАХ И КАРКАСНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Зинатулина Ю.А., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Формирование каркасных углеродных наноструктур – фуллеренов и нанотрубок происходит в результате добавления в графеновые слои, имеющие гексагональную структуру, топологических дефектов – четырех-, пяти-, семи-, восьми или девятиугольников. Топологические дефекты в кристаллических фазах со слоевой структурой – новый тип дефектов кристаллической структуры, который так же как вакансии, дислокации, межкристаллические границы оказывают существенное влияние на структуру и свойства фаз. Поэтому необходимо изучение закономерностей образования и эволюции таких дефектов.

В данной работе исследовалось влияние топологических дефектов на структуру отдельных графеновых слоев. Геометрическая оптимизация структуры листов была выполнена методом молекулярной динамики ММ+. В результате моделирования была рассчитана геометрически оптимизированная структура 28 графеновых листов, содержащих различные простые и комбинированные дефекты. Простые топологические дефекты образуются в результате замены одного из гексагонов графенового слоя на 4-, 5-, 7-, 8- или 9-угольник. Комбинированные топологические дефекты – комбинация двух, трех или более простых дефектов.

В результате выполненных расчетов установлено, что топологические дефекты можно разделить на два класса по способу их внедрения в совершенный графеновый слой с идеальной структурой: точечные и линейные. Особенность формирования точечного дефекта такова, что его можно сформировать в бездефектном графеновом слое путем удаления в локальной области нескольких атомов и перестройкой межатомных связей. Такие дефекты деформируют графеновый слой точечно – только в локальной области своего расположения. Другим типом дефектов являются линейные дефекты. В противоположность точечным дефектам, дефекты линейного типа невозможно вставить в графеновый слой при помощи локальной перестройки связей. Линейные топологические дефекты могут быть сформированы в графеновом слое только в процессе его формирования. Эти дефекты деформируют слой линейно вдоль некоторой прямой на всей протяженности слоя. Кроме того, в работе были модельно исследованы закономерности эволюции комбинированных топологических дефектов в графеновых слоях. Найденные закономерности формирования топологических дефектов были использованы для разработки моделей формирования фуллеренов и углеродных нанотрубок.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВЯЗКО-УПРУГИЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ
БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙКобелев А.В.¹, Кобелева Р.М.², Проценко Ю.Л.²¹Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург²Институт иммунологии и физиологии УрО РАН, 620041 Екатеринбург

E-mail: kobelev@imp.uran.ru

Своеобразная морфология живых мягких тканей определяет их механические свойства. Обычно последние исследуются с помощью стандартных методик механических испытаний промышленных твердых искусственных материалов, таких как металлы, керамика, пластмассы, резина и т.п. Методы теории упругости и вязкости, разработанные, например, для описания пластического течения металлов, оказываются в данном случае не совсем удобными и обычно применяются при биомеханическом моделировании костной ткани, суставов и связок, в то время как для мягких биологических тканей таких работ недостаточно. Поэтому необходимы простые и доступные неспециалистам теоретические подходы, позволяющие понять специфику образцов мягких тканей и приблизиться к адекватному представлению связи между их морфологическим строением и механической функцией. В докладе рассмотрены механические модели вязко-упругих свойств миокарда как типичной живой мягкой ткани с нелинейной зависимостью напряжения от деформации. Характерный для ткани эффект ее "ужесточения" с ростом деформации описан в рамках модельных двумерных структур, составленных из наклонных и поперечных линейных пружин и демпферов, в которых по мере растяжения работают более жесткие элементы. Принятая топология в целом соответствует морфологическому строению фасцикулы, как первичного структурного элемента папиллярной мышцы сердца млекопитающих. В качестве критерия адекватности описания свойств использовано сравнение комплекса предсказанных теоретически и полученных из экспериментов статических кривых "напряжение-деформация", а также кривых гистерезиса при циклическом растяжении, релаксационных кривых при ступенчатой деформации и кривых ползучести (крипа) [1]. Разработанные двумерные модели систематизированы как по их архитектуре, так и по доступности аналитического решения. Фактически речь идет о возможности выбора модели с наиболее оптимальным соответствием ее функции отклика имеющимся экспериментальным данным [2]. Таким образом, могут быть получены определенные заключения о возможной топологии сетки рабочих элементов ткани, ответственных за то или иное поведение при механических испытаниях.

1. A. Kobelev, R. Kobeleva, Yu. Protsenko, I. Berman, 2D rheological models for stress relaxation and creep in living soft tissues, *Acta of bioengineering and biomechanics*, V.7, N.1, P.23-34 (2005).
2. Kobelev A.V., Kobeleva R.M., Protsenko Yu.L., Berman I.V., Kobelev O.A. Viscoelastic Models Describing Stress Relaxation and Creep in Soft Tissues, in *Structure and Mechanical Behavior of Biological Materials*, ed. by P. Fratzl, W.J. Landis, R. Wang, and F.H. Silver (Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 874, Warrendale, PA, 2005), L5.1-6.

ИЗУЧЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ И НЕЛИНЕЙНЫХ ЯВЛЕНИЙ В УДАРООПАСНЫХ МАССИВАХ ГОРНЫХ ПОРОД

Хачай О.А.¹, Хачай О.Ю.²

¹Институт геофизики. Екатеринбург, 620016, ул.Амундсена, 100

²Уральский Государственный Университет, Екатеринбург, ул.Ленина, 57

Принципы парадигмы физической мезомеханики, введенной академиком Паниным В.Е. и его школой [1], являются конструктивным средством для изучения состояния нестационарной геологической среды [2]. Натурные эксперименты в реальных горных массивах, находящихся под сильным техногенным влиянием, позволяют выявить особенности поведения геологической среды, фиксируемые в используемых геофизических полях [3], связанных со структурной самоорганизацией и нелинейными явлениями. Как показал опыт наших исследований, изменение состояния системы на исследуемых пространственных базах и временах проявляется в параметрах, связанных со структурными особенностями среды второго ранга. Таким образом, изучение динамики состояния, его структуры и явлений самоорганизации массива можно вести геофизическими методами, настроенными на многогранговую иерархическую модель среды. Использование разработанной нами попланшетной многоуровневой индукционной электромагнитной методики с контролируемым источником и соответствующей методики обработки и интерпретации позволило выявить зоны дезинтеграции, являющиеся индикатором устойчивости массива. Введение интегрального параметра – поинтервального распределения интенсивности зон дезинтеграции позволяет перейти к детальной классификации массива по степени устойчивости его состояния; ввести количественные критерии для осуществления пространственно-временной классификации состояния; характеризовать устойчивость массива с точки зрения выхода на стационарную цикличность положения максимума параметра $S_{p\ int}$ в зависимости от расстояния Z_{\max} . Сопоставление с данными сейсмологического мониторинга позволило осуществить геодинамическую классификацию массива с использованием другого интегрального параметра S_p . Массив горных пород является открытой динамической системой, свойства которой нами изучены количественно путем анализа фазовых портретов с использованием фазовых координат в виде параметров интегральной и поинтервальной интенсивности зон неоднородности второго ранга.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 07-05-00149а.

1. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов,- Н.: Наука (1995).
2. О.А. Хачай, Физика Земли, 2007, №4, 58 (2007).
3. О.А. Хачай, О.Ю. Хачай, Горный информационно-аналитический бюллетень, N6, 131 (2005).

X_α -ДВМ ОЦЕНКА УСТОЙЧИВОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И РЕШЕТОЧНОЙ ПОДСИСТЕМ В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ МЕДИ И ЖЕЛЕЗАЮрьева Э.И.

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, 620041, ул. Первомайская, 91

В настоящей работе представлены результаты X_α -ДВМ [1] расчетов условий реализации ряда переходов в сложных оксидах меди $YBa_2Cu_3O_7$ и железа $SrFeO_3$. В первой части работы в качестве тестового проведен расчет полной и энергии связи для пар атомов С-С и Fe-С. Получено, что для атомов p -типа С-С минимум на кривых зависимости энергии от длины межатомной связи реализуется даже без учета потенциальной ямы (ПЯ), для второй пары атомов Fe-С требуется введение ПЯ. Дальнейшие расчеты проводили с учетом помещения базисных атомов в ПЯ. Для центра Cu(2) иттрий-бариевой керамики рассчитывали кластеры $[Cu(2)O_5]^{8-}$ (I-I), $[Cu(2)O_5]^{7-}$ (I-II), $[Cu(2)O_4]^{6-}$ (I-III). Получены следующие значения приведенной энергии связи $E_{св}$ [2] 0.5661 (кластер I-I), 0.5566 (кластер I-II), 0.6079 (кластер I-III) эВ/ед.ат. Разность значений $\tilde{E}_{св}$ кластеров I-I и I-II определяет температуру T^{el} перехода от состояния с формально определенным зарядом центрального атома меди 2+ к состоянию с зарядом 3+, которые равны 0.0095 эВ/ед.ат. и 110.24 К, соответственно. Разность значений $\tilde{E}_{св}$ кластеров I-I и I-III определяет температуру создания дефекта по кислородной подрешетке, в этом случае разность значений приведенной энергии составляет 0.0418 эВ/ед.ат. и температура T^{lat} , соответственно, 485.07 К. Таким образом, видно, что для центра Cu(2) иттрий-бариевой керамики подвижность кристаллической решетки сохраняется до более высоких значений температуры 485.07 К, тогда как электронная подсистема претерпевает вариации уже при 110.24 К. Аналогичные расчеты для центра $[FeO_6]^{8-}$ (II) в феррате стронция $SrFeO_3$ обнаруживают следующие данные: T^{el} составляет 649.84 К, т.е. данный материал должен проявлять устойчивость электронной подсистемы до более высоких значений температуры, чем иттрий-бариевая керамика. Температура T^{lat} в случае $SrFeO_3$ составляет 128.81 К, что обуславливает потерю подвижности в кислородной подрешетке уже при более низкой температуре.

По результатам настоящего исследования можно сделать следующий вывод: для реализации эффекта электронной ВТСП следует найти такие материалы, в которых кислородная подрешетка сохраняет подвижность до высоких значений температуры и $T^{lat} > T^{el}$.

1. F.W. Averill, D.E. Ellis. J Chem Phys **59**, 6412 (1973).
2. E.I. Yuryeva. Inter J Quantum Chem, **107**, 2556 (2007).

НОВЫЕ НЕИНВАЗИВНЫЕ МЕТОДЫ "ПРОЧТЕНИЯ" ПРОИЗВОЛЬНОЙ СЛУЧАЙНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ

Нигматуллин Р.Р.

Казанский государственный университет, кафедра теоретической физики

Разработаны уникальные (не имеющие мировых аналогов) методы по количественному "прочтению" произвольных случайных последовательностей, которые *совершенно* свободны от модельных представлений о природе случайности. Эти методы обладают следующими замечательными свойствами:

1. Они являются *неинвазивными*, т.е. содержат только такие преобразования над случайными последовательностями, ошибки которых на всех этапах обработки поддаются численной оценке и контролю. Благодаря этому свойству они обладают несомненными преимуществами перед инвазивными методами: классическим преобразованием Фурье (известная проблема осцилляций Гиббса), вейвлет-преобразованиями и другими методами, которые, в своём построении, содержат неконтролируемые ошибки и корреляции.

2. С помощью новых методов все случайные последовательности могут быть количественно "прочитаны" и, если необходимо, сравнены друг с другом с помощью *универсального* набора подгоночных параметров.

3. Предлагаемые методы свободны от каких-либо *модельных* (априорных) представлений о статистической природе шума и позволяют на основе оригинального критерия выбора оптимального окна сглаживания выделить обобщенное среднее (сглаженный тренд) и относительные флуктуации, которые могут быть "прочитаны" количественно *независимо* друг от друга.

Эти три свойства делают этот метод незаменимым и *универсальными* для анализа шумов (произвольных случайных последовательностей) самой различной природы. Разработка такого рода оригинальных методов, связанных с неким универсальным подходом и обладающих вышеперечисленными свойствами, оказывается, как это не парадоксально звучит, *возможным*. На настоящем этапе, по своей идеологии построения они могут быть разделены на два независимых метода:

1. Статистика дробных моментов [1].

2. Универсальная функция распределения относительных флуктуаций [2].

Своим публичным выступлением на зимней школе автор хочет привлечь внимание широкого круга физиков в России, чтобы использовать эти методы при анализе реальных данных и извлечения из них достоверной и надежной информации по явлениям и эффектам, которые затрагивают фундаментальные вопросы физики и нанотехнологий.

1. R.R. Nigmatullin. Journal of Signal Processing, **86**, 2529, (2006).
2. Р.Р. Нигматуллин. Нелинейный Мир, **5** (№9), 572, (2007).

ОБЗОР ПАТЕНТОВ ПО КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМ КОМПЬЮТЕРАМ

Епифанов С.С.

ФГУП Уральский электро-механический завод

E-mail: stepanv@e1.ru

Исследованы заявки в американской, российской и европейской патентных системах по соответствующим ключам. Результат - один патент из области проектов КМК (квантово-механических компьютеров) и один патент из области проектов КМСПД (квантово-механическая система передачи данных). Патент приводится в статье. Попутно кратко приводится патент по КМСПД. Исследуется аналогия в развитии средств вычислительной техники (СВТ) - от устройства машинки Паскаля до системы Ч. Бэбиджа и от Эниака и Стрелы до современных многопроцессорных ЭВМ. Если в истории развития классической СВТ переломным моментом стало появление полупроводников и технологии СБИС в производстве СВТ, то казалось бы, можно было бы предположить, что в истории развития КМК главным элементом будет нечто подобное. Например - устройства квантовых ловушек. На самом деле как раз такие устройства мною среди патентов не обнаружены. Найденный патент описывает устройство на основе использования кристалла. При этом подробно описывается только принцип построения вычислений. Само устройство описывается только словесно, как схема - алгоритм и, к тому же, без чертежа.

В статье строится прогноз развития КМК по аналогии с развитием средств вычислительной техники. Прогнозируется длина первого этапа - определение способов квантовых вычислений. Сейчас этому посвящено много литературы. Китаев и Прескилл, а также сборник в переводе Кулика, Шапиро и Шмаонова, как пример. Первый этап растянулся с первых замечаний Ю.И. Манина, работ Китаева и до сегодняшнего дня - на 30 лет. Первые патенты и первые прототипы простейших элементов КМК появились в 2003-2004 гг. В статье изучается возможность использования нашего патента по КМСПД для реализации КМК из приведенного американского патента - как возможный первый шаг на пути физической реализации одного из первых КМК. Правда, встает вопрос об устойчивости такого КМК, т.к. гамильтонианы, используемые при вычислениях в реальности, будут подвержены возмущениям извне. Потому отработка техники квантовых ловушек - работы ведутся в Японии - вполне возможно будет совсем не бесполезна. Указывается на целесообразность РН таких устройств в силу малости времени их устойчивых состояний.

Вывод - патенты в области КМК появились и, хотя их промышленная ценность пока весьма условна, можно ожидать новых патентов. Возможно как и в истории с классическими СВТ - первые промышленные КМК будут специализированными. КМК на кристалле по приведенной в статье заявке - как раз и относится к таким.

НАДЕЖНОСТЬ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО КОМПЬЮТЕРА - КАК ЧАСТНОГО СЛУЧАЯ СВТ

Епифанов С.С.

ФГУП Уральский электро-механический завод
E-mail: stepanv@e1.ru

Дано краткое описание представлений из теории H (надежности). Приведены основные уровни точности и достоверности оценки H , используемые в технике. Представлены основные предложения и результаты автора в теории H высокой точности. А именно: представлена формализация понятий об уровнях СТОК (уровень стабильности технологии и однородности качества) и продолжительности ПСЭ (предельного срока эксплуатации), а также методов использования этой формализации при оценке H высокого уровня точности. Обоснована необходимость в оценке H КМК (квантово-механического компьютера) как по аналогии с примерами АЭС и управляемого термояда так и на примере ИИ (ИР) (искусственного интеллекта (искусственного разума)).

Методы РН (расчета надежности) используемые при оценке H (надежности) СВТ (средств вычислительной техники) - изложены в соответствии с классической работой по теории H у И. Базовского - как РН последовательных и параллельных схем. Поэтому, если рассмотреть КМК - как некоторый образ квантовой машины А. Тьюринга (описаны у Бенёва в 1982 г. и позже у Дейча), то можно разложить РН КМК на РН её элементов. Т.о., задача РН КМК м.б. сведена к задаче классического РН. В статье даны примеры оценки H КМК А. Тьюринга и оценки H их образов.

Вывод - оценки H будут нужны на этапе проектирования конкретных КМК и они принципиально возможны с любой точностью уже сегодня.

РАСЧЕТ НАДЕЖНОСТИ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО КОМПЬЮТЕРА

Епифанов С.С.

ФГУП Уральский электро-механический завод
E-mail: stepanv@e1.ru

Данный расчет производится для конкретных патентных, или иначе заявленных структур квантово-механических компьютеров - от "кофейного" до построенных на базе квантово-механических ловушек или на базе кристаллов, окруженных системой зеркал (как в одной из патентных заявок на способ и устройство программирования вычисления функций). Сравниваются полученные оценки их надежности. В данном случае РН (расчет надежности) выступает как инструмент выбора того или иного принципа реализации КМК (квантово-механического компьютера) для заданных в ТЗ (тех-задании) приложений (задач). Вывод - РН КМК, построенных, как на квантовых ловушках, так и на кристалле - возможен.

”F“

**Фазовые переходы и критические
явления**

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАНГАНИТАХ ЛАНТАНА С КОЛОССАЛЬНЫМ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕМ

Бибенин Н.Г., Зайнуллина Р.И., Устинов В.В.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Дается обзор свойств ферромагнитных манганитов лантана $\text{La}_{1-x}\text{D}_x\text{MnO}_3$, $D = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$, с квазиперовскитной структурой в области фазовых переходов. Сначала рассматриваются структурные переходы в между орторомбической $Pnma$ и ромбоэдрической $R\bar{3}c$ фазами в соединениях $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$, в которых радиус двухвалентного иона превышает радиус лантана ($r_{\text{Ba}, \text{Sr}} > r_{\text{La}}$). Теплота $Pnma$ - $R\bar{3}c$ перехода весьма мала, что приводит к очень широкому ("гигантскому") температурному гистерезису, наблюдающемуся на температурных зависимостях скорости продольного звука и его затухания. На температурных зависимостях намагниченности, сопротивления и термоэдс этот гистерезис выражен слабо, что указывает на то, что изменение электронных состояний при таком переходе является незначительным. В системе $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($r_{\text{Ca}} < r_{\text{La}}$) структурный переход происходит между двумя модификациями (O' и O^*) орторомбической фазы. Температурный гистерезис выражен слабее, чем при $Pnma$ - $R\bar{3}c$ переходе.

Переход из ферромагнитного в парамагнитное состояние в $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$ и $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ является обычным переходом второго рода. Имеющиеся в литературе данные по критическим индексам сопоставляются с результатами для моделей Изинга и Гейзенберга. Указывается на необходимость учета неоднородности образцов. На фазовой диаграмме для $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ситуация оказывается более сложной, поскольку на линии фазовых переходов имеется трикритическая точка ($x \approx 0.25$, $T \approx 205$ К), отделяющая область фазового перехода второго рода ($x < 0.25$) от области фазового перехода первого рода ($x > 0.25$).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 06-02-16085.

КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПИНОВЫХ СИСТЕМ С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

Муртазаев А.К.

Институт физики ДНЦ РАН, 367003, Махачкала, ул. Ярагского, 94

E-mail: akai@iwt.ru

Современная теория фазовых переходов и критических явлений в основном базируется на идеях, заложенных в гипотезе скейлинга универсальности и в теории ренормализационной группы [1]. Эта теория построена, предполагая, что рассматриваемые системы, в которых происходят ФП являются идеально однородными. Однако в реальных физических системах (образцах) всегда присутствуют неоднородности различной физической природы, которые влияют на критические свойства. К таким неоднородности могут быть отнесены примеси, дефекты, окисные оболочки, границы и целый ряд других факторов. В связи с этим в последнее время интенсивно исследуются вопросы, связанные с влиянием на критическое поведение однородных систем беспорядка, которой вносится в систему при наличии вышеупомянутых факторов. При изучении влияния беспорядка на магнитные фазовые переходы второго рода основными являются два вопроса: изменяются ли критические индексы однородного магнетика при разбавлении немагнитной компонентой? Если да, универсальны ли новые критические показатели? Что касается первого вопроса, было показано [2], что замороженный беспорядок изменяет критические показатели системы, если соответствующий критический показатель теплоемкости α чистой системы положителен, т.е. теплоемкость при $T \rightarrow T_c$ расходится. Это так называемый критерий Харриса, который позволяет на качественном уровне предсказать, в каких случаях примеси существенны для критического поведения, а в каких нет. С точки зрения динамики различают два типа беспорядка – замороженный и отоженный. На сегодняшний день установлено, что присутствие отоженного беспорядка приводит к перенормировке Фишера [3]. Эта процедура заключается в том, что если критический индекс теплоемкости чистой системы $\alpha_{pure} > 0$, то критические показатели отоженной системы определяются через соответствующие показатели чистой системы простой перенормировкой. В докладе обсуждаются вопросы, связанные с влиянием концентрации немагнитной компоненты на критические показатели, с особенностями разбавления (по узлам, по связям и т.д.), а также со спецификой влияния замороженного беспорядка на разные модели (модель Изинга, модель Поттса). Обсуждаются проблемы определения классов универсальности таких систем.

1. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, - М.: Наука (1982).
2. A.V. Harris, T. Phys. C: Solid State Phys., **7**, 1671 (1974).
3. M.E. Fisher, Phys. Rev., **176**, 257 (1968).

МАГНИТНЫЕ ПЕРЕХОДЫ С СОПУТСТВУЮЩИМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА
В ОКСИДАХ $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ Меньшенин В.В.Институт физики металлов УрО РАН 620041, Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 18
E-mail: menshenin@imp.uran.ru

В настоящее время возрос интерес к средам, называемым магнитоэлектриками, в которых сосуществуют и взаимосвязаны магнитное упорядочение и электрическая поляризация. В таких материалах возникает возможность влияния магнитного поля на электрическую поляризацию, а электрического – на магнитные степени свободы. К магнитоэлектрикам относятся, в частности, оксиды $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ (R - редкоземельный ион). Характерной особенностью вышеуказанных оксидов является наличие большого числа магнитных и структурных переходов, сложные магнитные состояния. Обычно с понижением температуры переход из парамагнитного состояния в оксидах $R\text{Mn}_2\text{O}_5$ происходит в несоизмеримую магнитную структуру. При дальнейшем снижении температуры экспериментально установлено наличие электрической поляризации. При этом ее появление в $Tb\text{Mn}_2\text{O}_5$, например [1], не сопровождается изменением кристаллической структуры, как это должно быть при собственном ферроэлектрическом переходе, в котором должна исчезать пространственная инверсия как элемент симметрии, поскольку под действием пространственной инверсии электрическая поляризация меняет знак. Последующее понижение температуры приводит к новому магнитному переходу, но теперь уже в соизмеримую антиферромагнитную структуру.

Цель данного исследования состояла в описании в рамках симметричного подхода на основе теории фазовых переходов Ландау этой совокупности переходов в $Tb\text{Mn}_2\text{O}_5$, выяснении причины отсутствия изменения кристаллической структуры при появлении поляризации и нахождении механизма перехода в соизмеримую магнитную фазу.

Показано, что термодинамический потенциал, описывающий переход из парамагнитного в магнитоупорядоченное состояние, содержит инвариант Лифшица, а также допускает существование сопутствующего параметра порядка, а именно: электрической поляризации, ориентированной вдоль оси Y кристалла. Таким образом, ниже точки перехода появление магнитного порядка сопровождается возникновением и электрической поляризации. При смещении по температуре от точки перехода формируется магнитная солитонная решетка, исчезновение которой приводит к образованию одного магнитного домена с коллинеарным магнитным упорядочением, то есть к переходу в соизмеримую магнитную структуру.

1. G. R. Blake, L.C. Chappon, P.G. Radaelli, S. Park, N. Hur, S-W. Cheong and J.Rodriguez-Carvajal. Rhys.Rev. B **71**, 214402 (2005).

БЛИЖНИЙ МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В ТРЕХМЕРНОЙ XXZ - МОДЕЛИ ВЫШЕ И НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ

Медведев М.В.

Институт электрофизики УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул.Амундсена, 106
E-mail: medvedev@iep.uran.ru

Модель трехмерного одноосного магнетика с анизотропным обменом ближайших соседей (XXZ - модель) в зависимости от соотношения величин параметров обмена допускает как существование ферромагнетизма типа легкая ось и типа легкая плоскость (при положительных значениях параметров обмена между Z - и X, Y - проекциями спинов), так и антиферромагнитной фазы типа легкая ось (при достаточно сильном антиферромагнитном обмене Z - проекций спинов). В рамках этой модели с использованием тябликовского расщепления двухвременных температурных функций Грина исследовано изменение температурного поведения корреляторов спиновых проекций, поперечных к направлению спонтанного упорядочения, при переходе из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченные. Продемонстрировано, что вследствие анизотропии обмена при температуре магнитного упорядочения корреляционная длина расходится только в корреляторах, составленных из проекций спинов на направление спонтанного магнитного упорядочения. Это приводит, например, к тому, что ниже точки перехода в ферромагнитное состояние типа легкая плоскость наряду с дальним ферромагнитным порядком вдоль оси OX будет существовать также ближний антиферромагнитный порядок вдоль оси OZ (в случае более слабого антиферромагнитного обмена Z - проекций спинов по сравнению с ферромагнитным обменом X, Y - компонент). Показано, что благодаря ограничению обмена соседями параметры ближнего порядка в области высоких температур можно выразить через решеточные функции Грина.

СПИНОВЫЕ ФЛУКТУАЦИИ КАК ПРИЧИНА СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В 4f- И 5f- МЕТАЛЛАХ.

Солонцов А.^{1,2}, Мирмельштейн А.³¹ВНИИ неорганических материалов им. А.А. Бочвара, 123060, Москва²Государственный центр физики конденсированных сред, 123060, ул. Рогова, 5а, Москва³РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина, 456770, г.Снежинск Челябинской области

Известно, что спиновые флуктуации (СФ) в металлах с подвижными (itinerant) магнитными электронами могут являться причиной магнитных фазовых превращений. Благодаря магнитообъемному эффекту они также могут приводить к аномалиям теплового расширения и Инварному эффекту, наблюдаемым в переходных металлах. При этом помимо тепловых СФ в металлах существенную роль играют квантовые нулевые СФ, приводящие к сильному спиновому ангармонизму, для учета которых была развита СФ теория мягких мод [1].

Существенно, что СФ до сих пор не связывались со структурными превращениями в металлах. В последнее время стало очевидно, что СФ могут существенно влиять на фазовую стабильность и структурные превращения в 4f- и 5f- металлах. Здесь необходимо указать на изоструктурный $\gamma \rightarrow \alpha$ переход в ГЦК Ce, сопровождающийся резким изменением объема $\sim 12-17\%$, который подавляется в сильных магнитных полях ~ 56 Тл. При переходе существенную роль играют квазиупругие СФ, обнаруженные с помощью неупругого рассеяния нейтронов, и происходит существенное размягчение модуля сжатия. Все это указывает на сильную связь СФ с кристаллической решеткой и на их важную роль в фазовом переходе в Ce.

Нами предложен новый механизм структурных фазовых переходов, который основан на развитой ранее теории ангармонических СФ [1], сильно связанных с кристаллической решеткой, который предполагает для него следующий сценарий. В низкотемпературной α -фазе модуль сжатия отрицателен из-за влияния электронных корреляций. Стабилизация α -фазы достигается её сжатием, описываемым параметром порядка, связанным с объемом. Мы показываем, что СФ приводят к возрастающему с температурой положительному вкладу в упругий модуль, который меняет знак вблизи температуры фазового перехода и делает высокотемпературную γ -фазу стабильной.

Мы также полагаем, что СФ приводят к стабилизации δ -Pu, который, оказывается механически нестабильным при пренебрежении СФ [2].

Авторы благодарны за поддержку работы РФФИ (гранты № 06-02-17291а и 05-08-33456а) и программе “Ведущие научные школы России” (проект НШ-4122.2006.2).

1. A. Solontsov, Int. J. Mod. Phys., **B19**, 3631 (2005).

2. A. Landa *et al.*, Condens. Mat. Phys., **7**, 247 (2004).

КРИТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ИЗ ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЙ РЕНОРМГРУППЫ: НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И НЕРЕШЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ

Суслов И.М.

Институт физических проблем им. П.Л.Капицы РАН, 119334, Москва, ул. Косыгина, 2
E-mail: suslov@kapitza.ras.ru

План доклада:

1. Формализм теоретико-полевого ренормгруппы и его приложение к проблеме критических индексов.
2. Стандартные методы суммирования рядов для РГ функций: метод Паде-Бореля, конформ-борель, вариационная теория возмущений. Резервы для повышения точности.
3. Новый метод суммирования (модифицированный конформ-борель): его преимущества.
4. Ограничение множества естественных интерполяций для коэффициентных функций и оценка точности суммирования.
5. Ситуация в двумерном случае: к проблеме сингулярных вкладов в РГ функции.
6. Критические индексы для жидкого гелия: интрига современной ситуации.
7. Критические индексы для других классов универсальности.
8. Сопоставление с экспериментом и другими методами.
9. Проблема корректной интерпретации осциллирующего вклада в коэффициентные функции.

ТЕОРИЯ ФЛУКТУИРУЮЩЕГО ПОЛЯ ДЛЯ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ С ЛОКАЛИЗОВАННЫМИ МОМЕНТАМИ

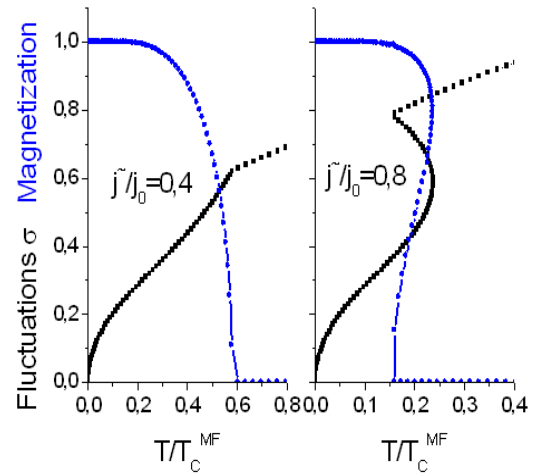
Гребенников В.И.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Предлагается самосогласованная теория флуктуирующего поля (ФП) в гейзенберговских ферромагнетиках, обобщающая известную теорию среднего поля (ТСП) и описывающая свойства при всех температурах, включая фазовый переход. В отличие от ТСП, которая работает с одним неизвестным \bar{V} , теория ФП содержит две подлежащих вычислению величины: среднее значение \bar{V} флуктуирующего поля V и его дисперсию σ^2 . В результате уравнения приобретают новый класс решений: кроме обычного фазового перехода второго рода они (при определенных условиях) допускают переходы первого рода. Подход ФП полезен для моделирования низкоразмерных и анизотропных систем, т. к. позволяет использовать преимущественное направления поля в таких системах.

Рассмотрим модель Гейзенберга с локализованными спиновыми моментами S . Используя преобразование Стратоновича-Хаббарда, представим парное взаимодействие спинов как взаимодействие с флуктуирующим обменным полем V . Вычисляя свободную энергию во втором порядке, получим уравнения теории ФП. Среднее значение \bar{V} поля задается функцией Бриллюэна B_S : $\bar{V} = j_0 S \langle B_S(V/T) \rangle$. Здесь j_0 – обменный интеграл на нулевом волновом векторе; угловыми скобками обозначено усреднение по нормальному закону $f(V) = \exp\{-(V - \bar{V})^2/2\sigma^2\} / \sigma\sqrt{2\pi}$ с дисперсией $\sigma^2 = \tilde{j}T / [1 - (\tilde{j}S/T) \langle B'_S(V/T) \rangle]$, T – температура, \tilde{j} – эффективный обменный интеграл, входящий в одноузельную восприимчивость. При $\sigma \rightarrow 0$ уравнения дают теорию СП.

Графики намагниченности и величины σ для системы $S = 1/2$ показаны на рисунке в случае слабых (слева) и сильных флуктуаций (справа); температура T – в долях ТСП температуры Кюри T_C^{MF} . Основные результаты. (1) Флуктуации значительно уменьшают критическую температуру T_C . (2) Возрастает наклон кривой намагниченности около T_C . (3) В системах с большой локальной восприимчивостью возникает переход первого рода, сопровождающийся температурным гистерезисом. Нестабильная ветвь решения видна на правой части рисунка. Работа поддержана фондом РФФИ (проект № 05-02-16087).



ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЗАРЯДОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ФАЗОВОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ В РАМКАХ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Мамин Р.Ф.¹, Кабанов В.В.²

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНИЦ РАН, 420029 Казань,
Сибирский такт 10/7

E-mail: mamin@kfti.knc.ru

²Институт Йозефа Стефана, Любляна 1000, Словения

E-mail: viktor.kabanov@ijs.si

Сложная система взаимодействий между зарядовыми, спиновыми и решеточными степенями свободы, как полагают, может приводить неоднородным состояниям с зарядовым и фазовым разделением. Роль такого рода поведения в неожиданных магнитных и транспортных явлениях, как колоссальное магнитосопротивление в манганитах или высоко-температурная сверхпроводимость, широко и постоянно обсуждается [1, 2]. В подобных работах часто вклад кулоновского взаимодействия обсуждается в последнюю очередь, иногда рассматриваются специальные случаи распределения заряда, вид которых не вытекал из общей постановки задачи, а угадывался в попытке минимизировать кулоновский вклад. По нашему мнению, кулоновское взаимодействие является определяющим в определении вида и формы возникающих неоднородных состояний, поэтому в настоящей работе мы последовательно учитываем кулоновское взаимодействие. Феноменологический подход к теории фазовых переходов, предложенный В.Л. Гинзбургом и Л.Д. Ландау, указывает на то, что характеристики явлений, происходящих вблизи фазовых переходов, слабо зависят от других особенностей системы. Поэтому мы получаем результат в рамках феноменологической теории фазовых переходов Гинзбурга-Ландау, показывая таким образом, что результат определяется близостью системы к фазовому переходу, а не спецификой взаимодействия.

Вклад кулоновского взаимодействия, ϕ_{coul} , в термодинамический потенциал рассматривается в следующей общей форме:

$$\phi_{coul}(\rho) = \frac{\gamma}{2}(\rho(r) - \bar{\rho}) \int \frac{(\rho(r') - \bar{\rho})}{r - r'} dV' \quad (1)$$

Показано, что локализованные зарядовые состояния и фазовое разделение возникают в области квантовой критической точки. Получены форма локализованных зарядовых состояний с фазовым разделением и определены области существования таких состояний в пространстве температура — уровень допирования. Показана роль кулоновского взаимодействия, и приведены соответствующие оценки. Кулоновское взаимодействие определяет распределение заряда, экранирование и размер возникающих состояний. Зарядовое разделение становится возможным из-за больших значений диэлектрической проницаемости и малой плотности дополнительного заряда в области локализации. Соответствующие оценки приведены.

1. Gorkov L. P., J. Supercond, **14**, 365, (2001).
2. Dagotto E., Hotta T., and Moreo A., Physics Report, **344**, 1 (2001).

МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКИ
СПИНОВЫХ ЦЕПОЧЕК

Кудасов Ю.Б.

Российский Федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ, 607188, Нижегородская обл., Саров,
пр. Мира 37

В настоящее время известно несколько групп веществ с изинговскими спиновыми цепочками, упорядоченными в двумерную треугольную решетку. К первой из них относятся соединения CsCoCl_3 , CsCoBr_3 и др. [1], магнитную структуру которых составляют антиферромагнитные (АФМ) изинговские цепочки. Ко второй группе относятся $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ и родственные соединения с ферромагнитными (ФМ) цепочками и сложной топологией магнитной подрешетки [2]. Совсем недавно был обнаружен новый класс соединений ($\text{Sr}_5\text{Ru}_4\text{O}_{12}$ и др.) [3]. В них изинговские цепочки образованы ионами рутения с переменной валентностью Ru^{3+} - Ru^{4+} и сложной магнитной структурой самой цепочки.

Высокотемпературная магнитная фаза одинакова для всех соединений – частичный АФМ порядок (сотовая магнитная структура). При низких температурах в CsCoCl_3 , CsCoBr_3 реализуется трехподрешеточная ферримагнитная структура [1], в $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ – основное состояние для модели Изинга на треугольной решетке [4,5], а в $\text{Sr}_5\text{Ru}_4\text{O}_{12}$ – страйп-структура. АФМ модель Изинга (взаимодействие ближайших цепочек антиферромагнитно) на треугольной решетке обладает сильно вырожденным основным состоянием. Взаимодействие следующих за ближайшими соседями снимает вырождение и приводит к различным низкотемпературным магнитным структурам.

Динамика фрустрированной решетки изинговских цепочек может быть исследована в рамках глауберовой теории [7], т.е. в модели изинговских спинов, взаимодействующих с тепловым резервуаром. Быстрая составляющая динамики – это переход системы в метастабильное состояние, а медленная – эволюция по метастабильным состояниям к основному состоянию.

1. M. Mekata: J. Phys. Soc. Jpn. 42 (1977) 76
2. A. Maignan et al., J. Mat. Chem. 14 (2004) 1231
3. G.Cao et al., Phys. Rev. B 75 (2007) 134402
4. Yu.B.Kudasov, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 27212
5. Yu.B.Kudasov, Eur. Phys. Lett. 78 (2007) 57005
6. V.Hardy et al., Phys. Rev B 70 (2004) 214439
7. R.J.Glauber, J. Math. Phys., 1963, 4, 294

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО РОДА В ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ: МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ, МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ, КОНЕЧНЫЕ КРИТИЧЕСКИЕ ТОЧКИ

Байдаков В.Г.Институт теплофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
E-mail: baidakov@itp.uran.ru

В молекулярных моделях, содержащих от 2000 до 23000 леннард-джонсовских частиц, методом молекулярной динамики рассчитаны термодинамические свойства (термодинамические потенциалы, их первые и вторые производные) в стабильных и метастабильных состояниях жидкости, газа, кристалла [1, 2]. Составлены термические и калорические уравнения состояния каждой из фаз. Определены линии фазовых равновесий и их метастабильные продолжения за тройную точку. Из уравнения состояния согласно условию $(\partial p / \partial \rho)_T = 0$, где p – давление, ρ – плотность, определены границы термодинамической устойчивости – спинодали жидкости, газа, кристалла. Показано, что каждая из фаз ограничена спинодалью только с одной стороны: для газа приближение к спинодали достигается охлаждением или сжатием, для жидкости и кристалла – нагревом или растяжением. Спинодаль у однокомпонентной переохлажденной жидкости отсутствует. Рассматривается вопрос о существовании коротковолновой границы устойчивости переохлажденной жидкости.

Установлено, что все линии фазового равновесия (плавления, сублимации, насыщения) простой системы имеют конечные критические точки. В отличие от критической точки на линии фазового равновесия жидкость-газ, которая находится в области стабильных состояний и в которой фазы становятся тождественными, линии плавления и сублимации заканчиваются в метастабильных областях соответственно на спинодалях растянутой жидкости и перегретого кристалла. В конечной критической точке прекращения метастабильных фазовых равновесий критическое состояние достигается только для одной из сосуществующих фаз.

Рассчитаны границы достижимых пересыщений для жидкой, кристаллической и газовой фаз. Показано, что распад метастабильных фаз происходит посредством зарождения и роста ядер конкурирующей фазы. Исследованы стохастические закономерности процесса зародышеобразования. При фиксированных параметрах состояния и большом числе наблюдений распределение времен ожидания τ появления в системе первого критического зародыша описывается распределением Пуассона, а среднее время ожидания зародыша $\bar{\tau}$ определяет частоту зародышеобразования $J = (V\bar{\tau})^{-1}$, где V – объем метастабильной системы. Для компьютерных моделей характерные значения частот зародышеобразования $J = 10^{25} - 10^{27} \text{ с}^{-1}\text{м}^{-3}$. Разработан комплекс программ, позволяющий визуализировать процесс зародышеобразования и отображать его на экране монитора.

Рассмотрен процесс зародышеобразования вблизи конечной критической точки кривой плавления. Показано, что зарождение жидкой фазы в перегретом кристалле в области отрицательных давлений при температурах ниже температуры конечной критической точки T_K невозможно. При $T < T_K$ линия достижимого перегрева кристалла совпадает с его спинодалью, плотность на спинодали кристалла при этом не зависит от температуры и давления.

1. Baidakov V.G., Protsenko S.P. Phys. Rev. Lett., **95**, 015701 (2005)
2. Байдаков В.Г., Проценко С.П. ЖЭТФ, **130**, 1014 (2006)

УНИВЕРСАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ФЕРРОМАГНЕТИКА $CePd_{1-x}Rh_x$ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ КВАНТОВОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Попов К.Г.¹, Шагинян В.Р.²

¹)Коми научный центр УрО РАН, 167982 Сыктывкар, ул. Чернова, 3а
E-mail: kpopov@dm.komisc.ru

²)Петербургский институт ядерной физики РАН, 188300 Гатчина, Лен.обл., Орлова Роща
E-mail: vrshag@thd.pnpi.spb.ru

Доклад посвящен теоретическому исследованию природы не Ферми жидкостного поведения ферромагнетика с тяжелыми фермионами $CePd_{1-x}Rh_x$ в окрестности критической точки квантового фазового перехода. Измерения [1,2] на трехмерном $CePd_{1-x}Rh_x$ показали, что при $T \rightarrow 0$ и некоторой концентрации $x = x_c \simeq 0.87 - 0.9$ данный сплав, являющийся ферромагнетиком при $x = 0$, испытывает квантовый фазовый переход в немагнитное состояние.

В основу качественного и количественного описания не Ферми жидкостного поведения $CePd_{1-x}Rh_x$ при низких температурах T была положена теория Ферми конденсатного квантового фазового перехода [3]. В приближении гомогенной тяжело-электронной жидкости для эффективной массы $M^*(T)$ было получено следующее выражение:

$$\frac{M}{M^*(T)} = \frac{M}{M^*(x)} + \alpha_1 f(0) \ln \{1 + \exp(-1/\alpha_1)\} + \lambda_1 \alpha_1^2 + \lambda_2 \alpha_1^4 + \dots, \quad (1)$$

Здесь $\alpha_1 = TM^*(T)/p_F^2$, $f(0)$ - амплитуда Ландау, p_F - импульс Ферми, M - голая масса электрона, λ_1 и λ_2 константы порядка единицы. Формула (1) дает универсальное описание зависимости $M^*(T) \propto T^k$ для различных диапазонов изменения T .

В рамках точно решаемой модели в окрестности точки Ферми конденсатного квантового фазового перехода было проведено исследование температурной зависимости таких термодинамических характеристик сильно коррелированных Ферми систем, как энтропия S , удельная электронная теплоемкость C , эффективная масса квазичастиц M^* .

Для области $T \ll T_F = p_F^2/M^*(x)$ было получено аппроксимационное выражение, описывающее универсальное поведение эффективной массы как функции температуры T и напряженности магнитного поля B :

$$M_N^*(z) = c_1 \frac{1 + c_2(y/y_M)^2}{1 + c_3(y/y_M)^{8/3}}, \quad (2)$$

где $M_N^*(z)$ - эффективная масса, нормированная на значение в максимуме, $z = y/y_M$, $y = T/(B - B_{c0})$, y_M - значение y при максимальном значении эффективной массы, B_{c0} - критическое поле, c_1, c_2, c_3 - подгоночные константы.

Сравнение результатов расчетов зависимости эффективной массы от температуры, выполненных нами аналитически и численно, с экспериментальными данными для $CePd_{1-x}Rh_x$, а также для ряда других металлов, демонстрирует их хорошее совпадение и свидетельствует об универсальном характере поведения металлов с тяжелыми фермионами в окрестности квантовой критической точки.

1. Sereni J. G. et al., Phys. Rev. B, **75**, 24432 2007
2. Pikul A. P. et al., J. Phys. Condens. Matter, **18**, L535 2006
3. Шагинян В.Р., Амусья М.Я., Попов К.Г., УФН, **177**, 585 2007

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ПАРАМЕТРЫ ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО И ВТОРОГО РОДА

Куркин М.И., Бакулина Н.Б., Меньшенин В.В., Туров Е.А.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: bakulina@imp.uran.ru

В работе изучается влияние электрического поля на параметры ферроэлектрических переходов первого и второго рода.

Для фазового перехода второго рода получено смещение температуры максимума электрической восприимчивости T_m (рис. 1а) в электрическом поле E , пропорциональное E в степени $2/3$. Значение восприимчивости κ_m в точке максимума убывает так же пропорционально E в степени $2/3$.

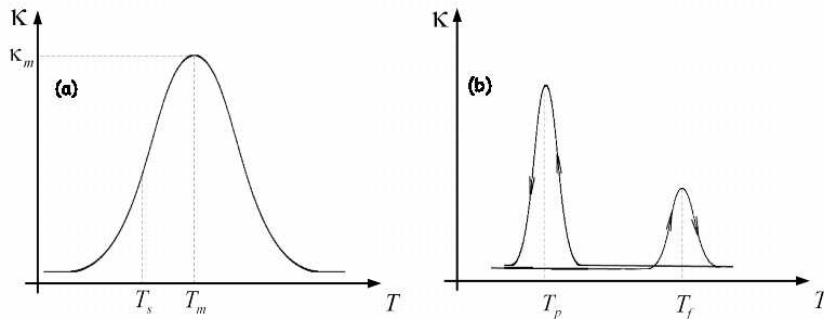


Рис. 1: Зависимость электрической восприимчивости от температуры для фазовых переходов первого и второго рода.

Для ферроэлектрических переходов первого рода получено смещение температур максимума электрической восприимчивости в поле E . Температура перехода из параэлектрического состояния в ферроэлектрическое (T_p) зависит от поля пропорционально E в степени $2/3$. Температура перехода из ферроэлектрического состояния в параэлектрическое (T_f) зависит линейно от электрического поля E . Высота максимума электрической восприимчивости убывает с ростом поля пропорционально E в степени $1/3$ при температуре T_p и не зависит от E при температуре (T_f).

Основное различие в поведении электрической восприимчивости при ферроэлектрическом переходе первого рода связано с наличием гистерезиса, который проявляется, во-первых, в несовпадении положений пиков $\kappa(T_p)$ и $\kappa(T_f)$ по температуре при охлаждении и нагревании и (рис. 1в), во-вторых, различием этих пиков по высоте.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект 05-02-16087, 08-02-00904).

ФИЗИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДОМЕННЫХ СТРУКТУР ДЛЯ ПЛАСТИН $ErFeO_3$ С МЕХАНИЧЕСКИ НАПРЯЖЕННЫМ СЛОЕМ В ОБЛАСТИ СПОНТАННОГО СПИН-ПЕРЕОРИЕНТАЦИОННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДАБеляева А.И.¹, Баранова Е.В.²

¹Национальный технический университет "ХПИ Харьков, 61002 Украина
E-mail: belyaeva@kharkov.com

²Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины, Харьков, 61002 Украина

В последние годы возобновился интерес к магнитным свойствам $ErFeO_3$ [1, 2], в частности, к природе спин-переориентационного фазового перехода (СПФП)[2]. Он связан с наблюдением пикосекундных времен вращения спинов в $TmFeO_3$ [3], что может найти техническое применение. В настоящей работе изучено влияние магнито жесткого поверхностного слоя на доменную структуру (ДС) в области спиновой переориентации. $ErFeO_3$ оптически прозрачен в видимой области спектра и обладает сильным эффектом Фарадея. Последнее дает возможность визуально наблюдать формирование ДС в температурном интервале от T_{room} до $T = 5K$ и ее особенности в интервале $120 \div 70K$. В основе визуализации ДС лежит магнитооптический эффект Фарадея. Все измерения выполнены на образцах, изготовленных из монокристалла, который был выращен методом бестигельной зонной плавки с радиационным нагревом с использованием ультрачистых компонент. Исследуемые образцы были вырезаны в виде тонких пластин, параллельных кристаллографическим (ab) и (bc) - плоскостям. Перед экспериментом образцы были полированы механически с обеих сторон. Для исследования в температурном интервале $300-5K$ образец помещался в проточный криостат [4], с использованием жидкого гелия в качестве хладагента. Для предотвращения неконтролируемых деформаций при низких температурах образцы закреплялись в специальном держателе. Особое внимание уделялось уменьшению градиента температур и неконтролируемых напряжений в образце [5]. Исследования перестройки ДС в (ab) и (bc) - пластинах ортоферрита эрбия с магнито жестким поверхностным слоем показали, что:

1. $ErFeO_3$ является неоднородным магнетиком, в котором появление спонтанного магнитного момента при $T < T_{N1}$ сопровождается разбиением ферромагнитного образца на домены вплоть до $T \sim 1.7 K$. Выделены области температур, при которых ДС для поверхностного магнито жесткого слоя и внутри объема образца различны.
2. Перестройка ДС в пластинах с поверхностным магнито жестким слоем в области спиновой переориентации понятна в рамках предложенных физических моделей. Показано, что вблизи температурного интервала спиновой переориентации в этих пластинах наблюдается снижение плотности энергии доменных стенок, разделяющих внутренние и поверхностные домены. Это уменьшение приводит к образованию доменных структур, близких к равновесным, возникающим в объеме.

1. A.I.Belyaeva and K.V.Baranova, JMMM, **312**, 331, (2007)
2. Ya.B.Bazaliy et al., Phys. Rev. B, **69**, 104429 (2004)
3. A.V.Kimel, A.Kirilyuk, A. Tsvetkov, R.V.Pisarev, Th. Rasing, Nature **429**, 850 (2004).
4. А.И.Беляева, В.И.Силаев и Ю.Е.Стеценко, Проточные криостаты для лабораторных исследований, Наукова Думка, Киев, СССР (1987), 232 с.
5. A.I.Belyaeva et al., Cryogenics **30**, 56 (1990).

НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И ПЛАВЛЕНИЯ

Мирзоев А.А.И., Мальцев И.А.

Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск, пр.Ленина, 76

В последние годы прогресс в исследовании процессов кристаллизации чистых металлов и сплавов во многом связан с использованием многомасштабного моделирования посредством сопряжения моделей и расчетов на разных масштабах длины, времени и энергии. Применительно к задаче дендритного роста такой подход был реализован в работе [1], в которой свойства границы раздела (атомарный уровень) определялись методом молекулярной динамики и передавались в качестве входных параметров в модель фазового поля [2], описывающую развитие дендритной структуры на мезоуровне. Так как рост дендрита происходит в условиях морфологической неустойчивости, то даже малые изменения в входных параметрах могут приводить к сильно различающимся конечным результатам. Поэтому требуется обращать особое внимание на достоверность и точность результатов молекулярнодинамического моделирования.

Точность МД моделирования в свою очередь определяется несколькими факторами, из которых наиболее важными являются не только реалистичность используемого потенциала и размер (число атомов) системы, но и целый ряд деталей процесса моделирования, в первую очередь величина шага интегрирования и используемый метод контроля температуры.

Данная работа посвящена исследованию влияния метода температурного контроля и размера используемой модели при моделировании границы раздела жидкой и твердой фаз в системе Леннарда-Джонса, поскольку эти факторы пока не получили достаточной оценки в литературе. Известно, однако, что выделяющаяся при кристаллизации скрытая теплота приводит к неоднородному профилю температуры в области границы раздела жидкость-кристалл. Однако в большинстве статей (см. например [3]) моделирование кристаллизации ЛД-жидкости проводилось при помощи стандартных пакетов МД-моделирования, где для контроля температуры используется термостат Нозье-Гувера, который поддерживает изотермический режим по всей системе. Показано, что использование термостата Нозье-Гувера приводит к существенным ошибкам в температурных зависимостях скорости роста кристалла. Проведена оценка и обсуждение возникающих ошибок в определении скачка температуры на границе раздела фаз.

1. J. J. Hoyt *et al.* Acta mater., **47**, 3181, (1999)
2. W. J. Boettinger *et al.* Rev. Mater. Res.. **32**, 163, (2002)
3. H. L. Tepper, W. J. Briels 2001, V. 115, N. 20 22 , P.9434-9443/

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ФЕРМИЕВСКИХ КОНФИГУРАЦИОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ И КЛАССИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ БИНАРНОЙ АТОМНОЙ СИСТЕМЫ

Небогатиков Н.М.

Удмуртский государственный университет, 426034, Ижевск, ул. Университетская, 1

В макроскопических системах связанных атомов реализуются два типа возбуждений: конфигурационное, обусловленное изменением конфигурации атомов, и тепловое, за счет колебаний атомов. В частности, конфигурационные возбуждения ответственны за фазовые переходы в атомной системе. В настоящей работе рассматривается конфигурационная составляющая энергии бинарной атомной системы, формирующаяся энергетическим спектром конфигурационных элементарных возбуждений. На основе вариационного начала рассматривается фермиевская по статистике ветвь энергетического спектра конфигурационных возбуждений бинарной атомной системы и возможная классификация формируемых конфигурационными возбуждениями структурных состояний в рамках изложенных принципов существования многочастичной системы.

Показано, что энергетический спектр возможных для системы конфигурационных возбуждений типа “квазичастица-антиквазичастица” квантован, т.е. энергия возбуждения классифицируется (идентифицируется) набором квантовых чисел (λ, l, γ) , где $\lambda = 0, 1, \dots$; $l = 0, 1, \dots, \lambda$; $\gamma = \pm 1$.

Равновесные структурные (конфигурационные) состояния бинарной атомной системы, описываемые посредством унарной и парной функций распределения вероятности заполнения узлов решетки, также классифицируются набором квантовых чисел (λ, l, γ) .

В λ -фазе упорядочивающейся бинарной атомной системы потенциал (среднее поле) $\psi_f^{(\gamma)}(\lambda, l)$ как на узле так и на множестве узлов решетки принимает ограниченное число $\lambda + 1$ значений. Химпотенциал системы $\mu^{(\gamma)}$ определяется лишь квантовым числом λ .

ОПИСАНИЕ ПЕРЕХОДОВ ЗОЛЬ – СЛАБЫЙ ГЕЛЬ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УЛЬТРАМЕТРИЧЕСКОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ

Васин М.Г.¹

¹Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Ижевск, ул. С. Кирова, 132
E-mail: vasin@udm.net

Известно, что переходы золь – слабый гель не имеют чётко выраженной температуры перехода [1]. Слабый гель образуется в результате физических процессов, порождающих непрочные связи. При малом, хотя и конечном, напряжении эти связи случайным образом разрываются, и при медленных процессах вещество ведёт себя как жидкость. Вместо порога гелеобразования в такой системе существует переходная область, вблизи некоторой температуры T_c , в которой происходит переход свойств системы от вязких к упругим, но сама величина T_c зависит от времени измерения функции релаксации, или иначе от частоты $\hat{\omega}$. Полагают, что процесс образования слабого геля по своей природе близок стеклованию [2], он является неравновесным, и сопровождается постепенным вымораживанием степеней свободы системы. Ранее для теоретического описания перехода жидкость – стекло авторами был предложен метод, основанный на динамической теории молекулярного поля, в котором учитывалось возникновение в системе динамической ультраметрии времён релаксации [3]. В данной работе этот метод развивается применительно к описанию процесса образования слабого геля. Анализ поведения системы вблизи предполагаемой точки перехода жидкость – слабый гель проводился с использованием аналитических методов критической динамики [4].

С помощью предложенного подхода удаётся описать ступенеподобное поведение температурной зависимости вязкости жидкости, сопровождающее переход золь – слабый гель. Определена зависимость температуры данного перехода от частоты крутильных колебаний вискозиметра $\hat{\omega}$. Обсуждается возможность образования фазы слабого геля в металлических расплавах.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (07-02-00110-а и 07-02-96045-r-ural-a)

1. Кристенсен Р., Введение в теорию вязкоупругости, М: Мир (1974);
2. П. де Жен, Идеи скейлинга в физике полимеров, М: Мир (1982);
3. Vasin M.G., General Approach to the Description of the Glass Transition in Terms of Critical Dynamics, Phys.Rev.B, **74**, 214116 (2006);
4. Васильев А.Н., Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике, ПИЯФ, Санкт-Петербург (1998).

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ КАПЛИ ПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Зубарев Н.М.¹, Зубарева О.В.²

Институт электрофизики УрО РАН, 620016 Екатеринбург, ул. Амундсена, 106
E-mail: ¹nick@ami.uran.ru, ²olga@ami.uran.ru

Рассмотрим двухмерную заряженную каплю проводящей жидкости, находящуюся в точке пересечения двух проводящих полуплоскостей (в вершине клина с углом раствора Θ). С математической точки зрения задача определения равновесной конфигурации капли эквивалентна задаче о конфигурации области постоянного давления (капли, либо пузырька), деформируемой плоским потенциальным течением идеальной жидкости. Последняя задача была детально исследована численными методами в работе [1].

Распределение потенциала электрического поля ϕ описывается двухмерным уравнением Лапласа (все величины зависят только от переменных x и y). Его следует решать совместно с условием эквипотенциальности поверхности капли и стенок клина ($\phi = 0$) и следующим условием на бесконечности:

$$\phi \rightarrow Ar^\gamma \sin(\gamma\theta), \quad r \equiv \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty.$$

Здесь $\gamma = \pi/(2\pi - \Theta)$, $\theta = \arctan(y/x)$ и A — постоянная, характеризующая величину внешнего поля. Равновесная конфигурация поверхности капли определяется условием баланса электростатических и капиллярных сил,

$$(8\pi)^{-1}(\nabla\phi)_{\phi=0}^2 + T\kappa + P = 0,$$

где T — коэффициент поверхностного натяжения, κ — кривизна поверхности, а постоянная P — разность давлений внутри и снаружи капли. Для поверхности, задаваемой параметрическими выражениями $y = Y(\tau)$ и $x = X(\tau)$, где τ — параметр, кривизна определяется выражением:

$$\kappa = (X_{\tau\tau}Y_\tau - Y_{\tau\tau}X_\tau) \cdot (X_\tau^2 + Y_\tau^2)^{-3/2}.$$

Используя конформные переменные, удастся найти однопараметрическое семейство (роль параметра играет γ) точных решений задачи для частного случая, когда $P = 0$. Форма поверхности задается следующими параметрическими выражениями [2]:

$$X(\tau) + iY(\tau) = \left[\frac{8\pi(2\gamma - 1)T}{\gamma^2(4\gamma - 1)A^2} \right]^{\frac{1}{2\gamma-1}} \cdot \left[e^{i\tau} - \frac{2e^{-i(2\gamma-1)\tau}}{(2\gamma - 1)(4\gamma - 1)} - \frac{e^{-i(4\gamma-1)\tau}}{(4\gamma - 1)^3} \right],$$

где τ меняется в диапазоне $0 \leq \tau \leq \pi/\gamma$. В частном случае $\gamma = 1$ решение совпадает с известным решением МакЛеода для формы двухмерного газового пузыря, обтекаемого жидкостью [3].

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал (проект 07-02-96035) и Совета по грантам Президента РФ (проект МД-2553.2007.2).

1. Ozugurlu E., Vanden-Broeck J.-M., European J. Appl. Math., **11**, 171 (2000).
2. Zubarev N.M., Zubareva O.V., Phys. Fluids, **19**, art. no 102110 (2007).
3. McLeod E.V., J. Rat. Mech. Anal., **4**, 557 (1955).

О СВЯЗИ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В РАСПЛАВАХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Воронцов А.Г., Куц Д.А.

Южно-Уральский государственный университет, 454080 Челябинск, пр. Ленина, 76

E-mail: sas@physics.susu.ac.ru

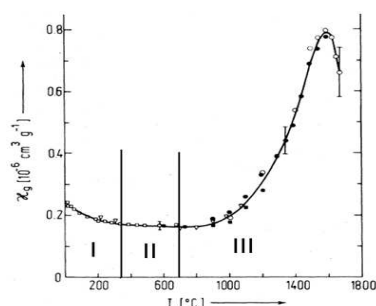


Рис. 1: Магнитная восприимчивость Cs [1]. Вертикальные линии - границы областей с разной атомной структурой.

Каждому эксперименту соответствовала отдельная модель атомного строения с экспериментальными значениями плотности, температуры, структурного фактора. Модели содержали несколько тысяч атомов и были получены Белащенко Д.К. [5, 6].

Исследование проводилось статистико-геометрическим методом симплексов Делоне [7]. При этом определяется 5 типов симплексов и удается разделить симплексы системы на правильные - элементы плотных структур и искаженные - элементы рыхлых структур. По типу преобладающих в системе симплексов модели были разделены на три класса: I - модели с плотной структурой, II - модели со структурой с появляющимися границами между сгустками атомов, III - модели с неоднородной структурой, состоящей из плотных и рыхлых фрагментов.

На экспериментальных кривых, рис. 1 и 2, показаны области, полученные нами, в которых модели имеют различное атомное строение. Можно отметить, что изменения в электронных свойствах тесно связаны с изменением в атомном строении моделей, которое не удается наблюдать в эксперименте из-за его низкой точности при высоких температурах. Тенденция к подобным изменениям в атомной структуре была выявлена для ряда других металлов.

Работа поддержана РФФИ, проекты № 06-08-32690-а, 06-08-01142-а.

В экспериментах [1, 2] установлено сложное нелинейное изменение электронных свойств расплавов металлов при повышении температуры (рис. 1, 2). При этом эксперименты [3, 4] по изучению атомной структуры показывают ее плавное изменение, и не позволяют дать объяснение значительному изменению электронных свойств. Нами предлагается методика, определения изменений в атомной структуре расплава, непосредственно связанных с изменениями в электронных свойствах. Методика основана на построении моделей, соответствующих экспериментальным данным о структуре расплава, и их анализе.

Модели строились по данным дифракционных экспериментов [3, 4].

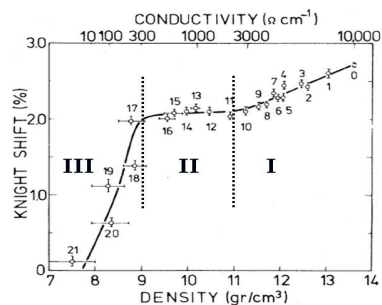


Рис. 2: Сдвиг Найта для Hg [2]. Вертикальные линии - границы областей с разной атомной структурой.

1. El-Hanany U., Warren W.W., Phys. Rev. Lett., **34**, (1975)
2. Freyland W., Phys. Rev. B, **20**, 5104, (1979)
3. Winter R., et.al., Ber. Bunsenges. Phys. Chem., **91**, 1327, (1987)
4. Tamura K., Hosokawa Sh., Phys. Rev. B, **58**, 9030, (1998).
5. Белащенко Д.К., Теплофизика высоких температур, **40**, 240, (2002)
6. Белащенко Д.К., Гинзбург А.С., Менделев М.И., ЖФХ, **74**, 669, (2000)
7. Воронцов А.Г., Куц Д.А., Вестник ЮУрГУ, **6**, 77, (2005)

МЕЖФАЗНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НА ГРАНИЦЕ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА С ИОННЫМ РАСПЛАВОМ: ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Кобелев А.В.¹, Кобелев О.А.²¹Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург,²Уральский государственный технический университет УГТУ(УПИ), 620002 Екатеринбург
E-mail: kobelev@imp.uran.ru

В предыдущей работе [1], посвященной анализу электрокапиллярных кривых, т.е. зависимости $\sigma(\varphi)$ межфазного натяжения от электродного потенциала (ЭКК), была предложена модель, учитывающая в приближении изотермы Лэнгмюра конкурентную адсорбцию частиц, смещающих потенциал нулевого заряда. Здесь [2], для анализа ЭКК использован вариант изотермы Попеля-Павлова. Учтено влияния электрического поля на поведение поверхностно-активных частиц. Сделаны достаточно общие предположения относительно профиля электростатического потенциала двойного электрического слоя. Получено интегральное уравнение для межфазного натяжения как функции поляризации:

$$\sigma(\varphi) = \sigma_0 - \frac{C_S}{2}(\varphi - \varphi_0)^2 - \int_{\varphi_0}^{\varphi} d\phi \sum_i \frac{N_i}{\omega} \left[\left(\frac{K_i}{K_i'} \right)^{\beta_i^{1,2}} \exp \left(\sigma(\phi)\omega - \frac{n_i F}{RT} \cdot \left(\beta_i^{1,2} \phi + \frac{\varepsilon}{K_i} \right) \right) - 1 \right] \quad (1)$$

Здесь K_i, K_i' - реальные концентрации, N_i - мольные доли i -тых компонентов в соответствующих фазах, n_i - заряды ионов, φ_0 - значение потенциала нулевого заряда при нулевой степени заполнения поверхности, C_S - интегральная емкость двойного электрического слоя (ДЭС). Для параметров, характеризующих взаимодействие фаз, ввели обозначения $\beta_i^{(1)} = \frac{\alpha_i'(1-\alpha_i'')}{1-\alpha_i'\alpha_i''}$; $\beta_i^{(2)} = \frac{\alpha_i''(1-\alpha_i')}{1-\alpha_i'\alpha_i''}$, параметр α_i' характеризует среднюю долю связей i -ой частицы фазы $'$, замыкающихся на фазу $''$. Заменяя разность потенциалов в подэкспоненциальном выражении через емкость соответствующего ДЭС, а также, учитывая связь связанного заряда ε с потенциалом, имеем в замкнутой форме электрокапиллярное уравнение при учете изотермы Попеля-Павлова. Решение этого уравнения можно получить, например, итерациями при условии, что интегральная часть вносит малый вклад, и в первом приближении при вычислении интеграла оставить первые два слагаемых в правой части (1). Для нахождения искомой зависимости необходимо решить уравнение (1) для обеих рассматриваемых фаз. Полученное выражение в явном виде дает зависимость межфазного натяжения от потенциала без допущений, свойственных приближению Лэнгмюра, и может быть применено для анализа опытных ЭКК.

1. O.A. Kobelev, A.I. Sotnikov and A.V. Kobelev, *Zeitschrift für Phys. Chem.* **203**, 143 (1998).
2. A.V. Kobelev, O.A. Kobelev, arXiv:physics/0406103

ТЕРМОДИНАМИКА БИНАРНЫХ АССОЦИИРОВАННЫХ СИСТЕМ С
НАПРАВЛЕННЫМИ СВЯЗЯМИРыльцев Р.Е.¹, Сон Л.Д.¹, Тутынина О.И.²

¹Уральский государственный педагогический университет, 620017, Екатеринбург, пр.
Космонавтов, 26

E-mail: rrylcev@mail.ru, ldson@yandex.ru

²Уральский технический институт связи и информатики, 620109, Екатеринбург, ул. Репина,
15

E-mail: tutynina@mail.ru

Проблема описания конденсированных систем при наличии ассоциации компонентов до сих пор является актуальной, несмотря на то, что интенсивно изучается в течение длительного времени. Для решения данной задачи классическим считается подход, основанный на модели идеальных ассоциированных растворов (МИАР) [1]. МИАР позволяет рассчитывать вклады в термодинамические потенциалы от произвольного набора устойчивых сегрегаций атомов раствора – ассоциатов. Основным недостатком МИАР является тот факт, что включенные в расплав ассоциаты считаются невзаимодействующими друг с другом, что справедливо лишь при достаточно высоких температурах. Для описания систем с сильным межчастичным взаимодействием и, как следствие, с высокой степенью ассоциации, в последние годы стали применять подход, основанный на теории полимерных растворов Флори [2]. Однако последняя справедлива только для очень больших (более тысячи структурных единиц) ассоциатов, которые можно рассматривать как полимеры.

В данной работе мы предлагаем альтернативный вариант расчета термодинамических свойств ассоциированных систем, основанный на статистической модели. Предлагаемая модель предназначена для описания систем, в которых между молекулами, помимо обычных ненаправленных связей, имеют место связи ковалентного типа. Указанные связи характеризуются, прежде всего, направленностью взаимодействия и насыщенностью, то есть ограниченным количеством связей у каждой молекулы. Благодаря наличию такого взаимодействия, в системе возникает возможность образования ассоциатов молекул, подобно тому, как это происходит в полимерных системах. В отличие от теории Флори, рассматриваемый подход позволяет учитывать ассоциаты произвольного размера.

Статистическая модель, позволяющая описывать направленное взаимодействие в молекулярных жидкостях, была предложена ранее в [3]. Данная работа является обобщением данного подхода на случай многокомпонентных систем.

Направленные и насыщенные связи имеют место во многих системах, в частности в расплавах металл-металлоид и А1-РЗМ, имеющих многочисленные практические применения. Основное предположение заключается в том, что атомы металлоида или РЗМ (*B*), помещенные в металлическую матрицу (*A*), формируют устойчивые соединения (квазимолекулы) вида A_2B , в которых, благодаря перераспределению плотности заряда, возникает возможность образования направленных связей и, как следствие, способность к полимеризации.

Работа поддержана РФФИ (гранты 07-02-00110, 06-08-01290, 07-02-96045).

1. Пригожин И., Дефей Р., Химическая термодинамика, Новосибирск: Наука (1966)
2. Flory P.G., Principles of polymer chemistry, N.Y.: Cornell university press, Ithaca (1953)
3. Rylcev R.E., Son L.D., Phase transitions in liquids with directed intermolecular bonding, Physica A, **368** (2006)

СТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАГНИТНЫХ ДИПОЛЬНЫХ СПИНОВЫХ СТЕКОЛ

Бузиелло Г.¹, Газеева Е.В.², Усманова С.М.², Хайбутдинова И.Р.², Самородов И.В.²¹Отделение физических наук, Университет, 840081, Салерно, Баронисси-Салерно и ИНФМ-Салерно, Италия²Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, ул. Красносельская, 51

Некоторые магнитные системы имеют очень слабые обменные взаимодействия, вследствие чего преобладающим является магнитное диполь-дипольное взаимодействие. В данной работе изучается функция распределения случайных молекулярных полей (ФРМП) в магнитном дипольном стекле типа $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Проблема расчета функции распределения случайных молекулярных полей $f(\lambda)$ примесных дипольных центров в кристаллах играет важную роль, поскольку с помощью ФРМП находят интересные физические величины в неупорядоченной дипольной системе.

Рассмотрена двухуровневую модель примесного магнитного дипольного центра в статической кристаллической решетке. Гамильтониан системы N магнитных диполей со спином σ в постоянном продольном магнитном поле H_0 и в поперечном магнитном поле туннелирования Ω имеет вид

$$H = -\mu H_0 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z - \Omega \sum_{i=1}^N \sigma_i^x - \frac{1}{2} \sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z,$$

где μ — величина магнитного момента диполя, J_{ij} — константа магнитного диполь-дипольного взаимодействия, $J_{ij} = J_0(1 - 3 \cos^2 \theta_{ij})$, $J_0 = \mu^2 / r_{ij}^3$, θ_{ij} — угол между радиус-вектором расстояния между диполями \vec{r}_{ij} и осью Oz .

Использование двухуровневой модели энергетического спектра диполя справедливо для очень низких температур ($10^{-2} - 10^{-1}$ K), при которых оказываются заселенными лишь низшие состояния диполей и наблюдаются коллективные свойства в рассматриваемых дипольных системах. Часто используемое приближение самосогласованного поля предполагает выделение среднего молекулярного поля, действующего на данный диполь, что позволяет свести многочастотную задачу к одночастотной. В этом приближении возникает задача нахождения функции распределения случайных молекулярных полей $f(\lambda)$, которую мы исследуем. С помощью найденной $f(\lambda)$ рассчитаны термодинамические величины для параэлектрической системы. Найдена последовательность критических точек перехода из неупорядоченной фазы в низкотемпературную фазу магнитного дипольного стекла.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА С ИНВЕРСИЕЙ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Загребин М.А.¹, Бучельников В.Д.¹, Таскаев С.В.¹, Энтель П.²

¹Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск
E-mail: buche@csu.ru

²University of Duisburg-Essen, 47048 Duisburg, Germany
E-mail: entel@thp.Uni-Duisburg.de

В сплавах Гейслера существует структурный переход из кубической фазы в тетрагональную. Эксперименты показывают, что в некоторых сплавах Гейслера, например, Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) наблюдается следующая последовательность фазовых переходов (ФП): парамагнитная (ПМ) кубическая фаза (PC) → ферромагнитная (ФМ) кубическая фаза (FC) → ПМ тетрагональная фаза (PT) → ФМ тетрагональная фаза (FT) [1]. В других сплавах может иметь место иная последовательность переходов: PC → FC → антиферромагнитная (АФМ) тетрагональная фаза (АФТ) [2]. Такое поведение может быть объяснено существованием в данных сплавах инверсии обменного взаимодействия [3]. Ранее были исследованы фазовые переходы в данных сплавах в отсутствие магнитного поля [4]. Эксперименты показывают, что в сплавах Ni-Co-Mn-X и Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) магнитное поле существенно влияет на поведение намагниченности и фазовый переход из ферромагнитной аустенитной фазы в антиферромагнитную мартенситную фазу [2]. В данной работе при помощи теории Ландау исследуются фазовые диаграммы сплавов Гейслера, в которых имеет место инверсия обменного взаимодействия во внешнем магнитном поле. Выражение для функционала Ландау имеет вид [3-5]:

$$\begin{aligned}
 F = & \alpha m^2/2 + \beta m^2 \cos(\varphi)/2 - \gamma_1 m^4 \cos(\varphi)/4 + \delta_1 m^4 \cos^2(\varphi)/4 + \delta_2 m^4/4 - \\
 & \omega_1 m^2 (e_2^2 + e_3^2)/2 - \omega_2 m^2 (e_2^2 + e_3^2) \cos(\varphi)/2 - 2mM_0H \cos(\varphi/2) + \\
 & + a(e_2^2 + e_3^2)/2 + be_3 (e_3^2 - 3e_2^2)/3 + c (e_2^2 + e_3^2)^2/4,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где m – безразмерный вектор намагниченности, φ – угол между намагниченностями подрешеток антиферромагнетика, $e_{2,3}$ – линейные комбинации компонент тензора деформации; $\alpha, \beta, \delta_{1,2}, \gamma$ – обменные постоянные; $\omega_{1,2}$ – магнитоупругие постоянные; a, b, c – линейные комбинации упругих модулей 2-го, 3-го и 4-го порядков соответственно. После минимизации свободной энергии (1) по параметрам порядка m, φ и $e_{2,3}$ были построены фазовые диаграммы. При определенных параметрах свободной энергии на данных фазовых диаграммах существуют термодинамические пути, которые позволяют описать наблюдаемые экспериментально последовательности фазовых переходов в сплавах Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) [1,2].

1. Krenke T. et al., Phys. Rev. B. **72**, 014412 (2005)
2. Kainuma R. et al., Nature **439**, 957 (2006)
3. Kittel C., Phys. Rev. **120**, 335 (1960)
4. Бучельников В.Д. и др., Письма в ЖЭТФ **85**, 689 (2007)

ПОЛИМОРФИЗМ ДОПИРОВАННЫХ АНТИМОНАТОВ

Захарьевич Д.А., Бурмистров В.А.

Челябинский государственный университет, Челябинск

Сложные оксиды сурьмы (антимонаты) представляют интересный объект исследований благодаря наличию целого ряда полезных свойств и богатому полиморфизму. В последнее время появился интерес к использованию антимонатов в процессах обращения с радиоактивными отходами и облученным ядерным топливом [1]. Эти материалы могут использоваться как для извлечения, так и для иммобилизации радиоактивных изотопов. В связи с этим возникает потребность в тонкой настройке свойств антимонатов для обеспечения оптимальных результатов на каждом этапе обращения и способах взаимного превращения фаз, используемых на различных этапах. Этого можно добиться путем допирования антимонатов элементами IV-VI групп, многие из которых образуют смешанные оксиды с оксидами сурьмы в широких концентрационных интервалах. При этом появляется возможность управления как важными свойствами таких систем (избирательностью при ионном обмене, скоростями диффузии компонентов, устойчивостью при образовании больших количеств точечных дефектов), так и структурными особенностями образующихся фаз.

В докладе обсуждаются результаты экспериментальных исследований оксидов сурьмы допированных Si, P, W, Mo. Для анализа полученных закономерностей используются результаты расчетов энергии решеток различных кристаллических фаз, образующихся в этих системах, а также данные об их электронной структуре.

1. D.A. Zakharyevich. Abs.2007 E-MRS Fall Meeting. Warsaw, 169 (2007)

ЭНЕРГИЯ ОБРАЗОВАНИЯ СИГМА-ФАЗЫ СПЛАВА Cr-Fe

Каблиман Е.А., Мирзоев А.А.

Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск, пр. Ленина, 76

E-mail: e_kablman@physics.susu.ac.ru, mirzoev@physics.susu.ac.ru

Все физические свойства материала в общем случае могут быть определены из его электронной структуры. Использование первопринципного метода для ее расчета позволяет довольно точно найти равновесное состояние различных сложных кристаллических структур и оценить их относительную стабильность.

Сигма-фаза впервые была описана Бейном для системы Cr-Fe в 1923 году [1]. В настоящее время известно примерно 110 интерметаллических фаз с данной конфигурацией [2]. Образование хрупкой, но в то же время стабильной, сигма-фазы ведет к сильной деградации материала (зарождению трещин). На практике она развивается в подверженных нагреву зонах коррозионно-стойких сталей.

Известно, что структура сигма-фазы относится к пространственной группе №136, $P42/mnm$ и содержит в элементарной ячейке 30 атомов, разделенных по 5 неэквивалентным подгруппам. Экспериментально определено, что в системе Cr-Fe сигма-фаза образуется для соотношения Cr:Fe примерно 1:1. При этом каждая из неэквивалентных подгрупп занята и атомами Cr, и атомами Fe в определенном процентном соотношении. Проблема заключается в том, что эксперимент может дать лишь знание о процентном соотношении атомов Cr и Fe в каждой из неэквивалентных подрешеток, но не об их точном расположении, и тем более о том, какая конфигурация (расположение атомов) будет наиболее стабильной. Таким образом, задача исследования состоит не только в определении равновесных значений объема и отношения c/a , но и в анализе расположения атомов Cr и Fe по подрешеткам сигма-фазы.

Для определения энергии образования сигма-фазы (1) используется программный пакет WIEN2k, реализующий первопринципный метод расчета электронной структуры:

$$E = E_a - \sum_i x_i \cdot E_i, \quad (1)$$

где E - энергия образования, E_a - полная энергия сплава, E_i - полная энергия чистого элемента i , x_i - концентрация элемента i (в ат. %). Поскольку методика моделирования зависит от ряда параметров, на первом этапе настоящей работы проводится анализ их влияния на значение полной энергии системы и обосновывается выбор определенных значений. На следующем этапе моделирования предлагается схема поиска равновесного состояния с учетом зависимости полной энергии структуры не только от объема, но и отношения c/a . Данная схема реализуется для чистых компонент системы и ее трех конфигураций, которые выбираются в согласии с экспериментальными данными по концентрации атомов Cr и Fe в подрешетках системы.

1. E.C. Bain, Chem. Met. Eng. **28**, 23 (1923)
2. P. Villars, L.D. Calvert, Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, ASM International, Materials park, OH (1991)

ТВЁРДОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ НА ОСНОВЕ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ СУРЬМЫ В СИСТЕМЕ $(1-X)K_2CO_3 - X Na_2CO_3 - Sb_2O_3 - WO_3$ ПРИ НАГРЕВАНИИ

Лупицкая Ю.А., Бурмистров В.А.

ГОУ ВПО "Челябинский государственный университет
454021 г Челябинск, ул. Братьев Кашириных, дом 129, Физический факультет, кафедра ФКС
E-mail: burmistrov@csu.ru

Получение керамических материалов с ионопроводящими и ионообменными свойствами, способными работать в качестве мембран в электрохимических устройствах, является одной из актуальных задач. Такие материалы могут быть получены на основе соединений пятивалентной сурьмы, гидратированные формы которых имеют структуру типа пирохлора путём твёрдофазного синтеза [1]. В связи с этим, целью данной работы явилось изучение состава и структуры образующихся фаз в системе $(1-X)K_2CO_3 - X Na_2CO_3 - Sb_2O_3 - WO_3$ при нагревании. Синтез исследуемых образцов осуществляли путём прокалики при ($T=1173$ К). Состав конечных фаз определяли путём взвешивания на аналитических весах. Фазовый состав контролировали рентгеновским методом на дифрактометре ДРОН-3 в фильтрованном $CuK\alpha$ -излучении. Изменение структурных параметров фазы переменного состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ от концентрации ионов натрия ($0 \leq X \leq 0,6$).

	X	I_{222} , см	I_{311} , см	I_{311}/I_{222}	a, Å	a, Å
$KWSbO_6$	0	10	12,6	1,26	10,234	0,003
$K_{0,9}Na_{0,1}WSbO_6$	0,1	18,2	21	1,15	10,240	0,003
$K_{0,8}Na_{0,2}WSbO_6$	0,2	16,2	16,5	1,02	10,246	0,003
$K_{0,7}Na_{0,3}WSbO_6$	0,3	17,8	16,7	0,94	10,251	0,003
$K_{0,6}Na_{0,4}WSbO_6$	0,4	15,3	12	0,78	10,262	0,003
$K_{0,5}Na_{0,5}WSbO_6$	0,5	18,6	13,7	0,74	10,270	0,003
$K_{0,4}Na_{0,6}WSbO_6$	0,6	15,5	8,1	0,52	10,289	0,003

Таблица 1: Р- структура пирохлора

Рентгенограммы прокаленных смесей в интервале концентрационной области ($0 \leq X \leq 0,6$) содержат определённый набор дифракционных максимумов, удовлетворительно описывающийся для кристаллов кубической сингонии, а анализ законов погасания свидетельствует, что данные фазы имеют структуру типа пирохлора пр. гр. симм. $Fd\bar{3}m$ (см. табл.). С увеличением ионов натрия в системе на дифрактограммах происходит уменьшение относительной интенсивности рефлексов с нечётными индексами I_{311}/I_{222} и увеличение параметра элементарной ячейки (табл.) Проведённые исследования показали, что в концентрационном интервале $0 \leq X \leq 0,6$ формируется фаза переменного состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$, имеющая структуру типа пирохлора. В докладе обсуждается возможное распределение ионов по правильной системе точек пр. гр. симм. $Fd\bar{3}m$ в полученных соединениях.

1. Бурмистров В.А., Ионный транспорт в оксидных соединениях сурьмы со структурой типа пирохлора, изд. ЧелГУ, (2002)

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА Co_2CrAl

Марченков В.В., Свяжин А.Д., Коротин М.А., Шредер Е.И., Герасимов Е.Г., Воронин В.И.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Согласно зонным расчетам, сплав Гейслера Co_2CrAl имеет конечную плотность состояний на уровне Ферми в одной спиновой подзоне и наличие энергетической щели в другой [1]. В результате носители тока имеют 100% спиновую поляризацию. Реальные образцы неизбежно обладают некоторой степенью атомного беспорядка. Это может приводить к изменениям электронной структуры на уровне Ферми по сравнению с рассчитанной, и в некоторых случаях приводит к уничтожению щели.

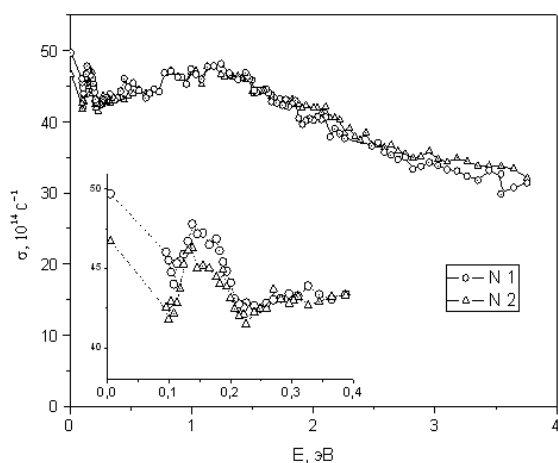


Рис. 1: Оптическая проводимость сплава Co_2CrAl .

изменения оптического поглощения в инфракрасной области спектра и электросопротивления связаны с изменениями зонной структуры в зоне со спинами вниз (“замытие” щели) при изменении степени атомного порядка. Высокая степень спиновой поляризации должна сохраняться.

Работа поддержана грантом РФФИ № 05-02-16930.

Сплав Co_2CrAl имеет структуру $L2_1$, является ферромагнетиком с температурой Кюри $T_C = 330$ К. Электросопротивление имеет отрицательный температурный коэффициент $b = -0.1$.

Расчет электронной структуры сплава Co_2CrAl выполнен методом LSDA. На основе полученной картины плотности состояний был произведен расчет оптического спектра сплава.

Анализ данных исследований оптических и электрических свойств двух образцов сплава Co_2CrAl с различной степенью порядка совместно с результатами зонных расчетов приводит к следующей физической картине. Электроны в зоне со спинами вверх дают основной вклад в межзонные переходы в инфракрасной области, но слабо участвуют в статической проводимости. Незначительные

1. Y. Miura, K. Nagao, M Shirai. Phys. Rev. B **69**, 144413 (2004).

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Ni_2MnGa С МАГНИТОУПРАВЛЯЕМЫМ ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ

Марченкова Е.Б., Укусников А.Н., Юрченко Л.И., Королев А.В., Коуров Н.И., Пушин В.Г.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Ферромагнитные сплавы на основе интерметаллического соединения Ni_2MnGa ($Ni_{50}Mn_{25}Ga_{25}$ в ат.%) и ряда других аналогичных соединений привлекают к себе пристальное внимание благодаря уникальным физико-механическим свойствам. Термоупругие мартенситные превращения определяют появление в них эффектов памяти формы (ЭПФ), которые могут контролироваться внешним магнитным полем. Однако данные сплавы в исходном литом поликристаллическом, а зачастую и в монокристаллическом состояниях являются чрезвычайно хрупкими, что исключает или резко ограничивает их практическое использование. В качестве основного материала выбран сплав $Ni_{54}Mn_{21}Ga_{25}$ для получения субмикроструктурных состояний и для их всестороннего изучения, предполагая, возможность его пластифицирования. С другой стороны, целесообразным представляется также изучение влияния легирования данных сплавов четвертыми компонентами, например железом, медью, кобальтом. Исследования выполняли методами рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии *in situ*. Измеряли также электросопротивление, термоЭДС, магнитосопротивление, деформацию (изменение длины образцов в дилатометре или формы при изгибе на ЭПФ), магнитную восприимчивость и намагниченность в широком интервале температур (2,4-400 К). В работе впервые данные сплавы были подвергнуты сверхбыстрой закалке из расплава (БЗР). БЗР спиннингованием привела к существенному уменьшению среднего размера зерна (от 500 до 0,5 мкм) сплавов. Было обнаружено, что БЗР обеспечивает возрастание механической устойчивости и деформационной термоциклической прочности и пластичности сплавов. При этом имеют место магнитное и каскад высокообратимых термоупругих мартенситных превращений $L2_1 \leftrightarrow 5M \leftrightarrow 7M$ и связанные с ними ЭПФ. Температурный гистерезис физических свойств, наблюдаемый в окрестности их критических точек, в БЗР сплавах значительно уменьшается. Тогда как мартенситное превращение в исходных литых сплавах происходит в большем интервале температур, не является полностью обратимым и сопровождается хрупким разрушением образцов через несколько термоциклов. Работа выполнена при поддержке грантов: "Аусферр" Интелс ММК, РФФИ №№06-02-16695, 07-03-96062, 07-02-97606.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В SiC

Агалямова Э.Н., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Карбид кремния является типичным представителем материалов, в которых возможно устойчивое существование большого количества различных политипов. Все политипные структуры SiC построены по законам плотной шаровой упаковки и отличаются между собой чередованием слоев SiC молекул. Формирование той или иной политипной разновидности или же их комбинации определяется комплексным воздействием температурного фактора, давления, содержанием примесей, размерами кристаллитов, а также кинетикой процесса синтеза. Механизмы формирования и трансформации структуры различных политипных разновидностей SiC до сих пор остаются недостаточно изученными. В данной работе моделировался дислокационный механизм формирования политипов. Методом молекулярной механики ММ+ была рассчитана геометрически оптимизированная структура кластеров карбида кремния политипов 2Н, 3С и 4Н, содержащих винтовые дислокации.

Расчеты энергии связей SiC молекул, присоединяющихся к поверхности кластеров в различных позициях, показали, что наиболее энергетически выгодным является присоединение молекул там, где винтовые дислокации выходят на поверхность кластеров. Установлено, что растущие по дислокационному механизму кристаллы будут иметь периоды элементарных трансляции вдоль кристаллографической оси "z", равные шагам винтовых дислокаций. Анализ возможности роста по дислокационному механизму различных политипов на затравках кристаллов SiC со структурой 2Н, 3С и 4Н политипов показал, что если в качестве исходного политипа выступает 2Н, то из него нельзя получить ни одну из модификаций, кроме нее самой, в то время как для остальных политипов существует возможность формирования политипных разновидностей, отличающихся от исходных. Таким образом, формирование того или иного структурного политипа в процессе роста кристаллов SiC определяется в первую очередь тем какие именно винтовые дислокации образуются в зародышах кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ ФАЗ ИЗ ФУЛЛЕРЕНОВ И НАНОТРУБОК

Али-Паша В.А., Беленков Е.А., Каримов О.И.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Одной из наиболее важных и актуальных задач современной физики наносистем является исследование возможности синтеза сверхпрочных конструкционных материалов на основе наноструктур. В данной работе выполнено моделирование структуры 2-х и 3-х мерных (2D и 3D) полимеров из углеродных нанотрубок и фуллеренов. В выполненных к настоящему времени исследованиях подобных структур априори предполагалось, что для формирования трехмерной структуры обязательно присутствие атомов углерода в состоянии sp^3 гибридизации. В данной работе образование прочных ковалентных связей между углеродными нанотрубками и/или фуллеренами предполагается за счет перемычек из фрагментов нанотрубок. Таким образом, все атомы в полимерах будут находиться в sp^2 -гибридизованном состоянии. Анализ возможности устойчивого существования таких наноструктурированных фаз, а также их структурные характеристики и физические свойства были исследованы с помощью компьютерного моделирования.

Моделирование проводилось методом молекулярной механики ММ+. Энергетические параметры структур, оптимизированных методом молекулярной механики, рассчитывались расширенным методом Хюккеля.

В результате расчетов была доказана возможность устойчивого существования двухмерных и трехмерных полимеров на основе жгутов кресло- и зигзагообразных углеродных нанотрубок (2,2), (3,3), (4,4), (3,0), (4,0), (5,0), а также полимеров на основе фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{82} . Элементарные ячейки 2D полимеров из углеродных нанотрубок и фуллеренов могут быть двух видов – квадратные и ромбические. Элементарные ячейки 3D фуллереновых полимеров могут принадлежать к трем различным сингониям - кубической, ромбической и триклинной. В работе были найдены параметры элементарных трансляций и плотности всех рассчитанных фаз. Также были рассчитаны теоретические рентгенограммы, с помощью которых возможна экспериментальная идентификация новых предсказанных углеродных наноструктурированных фаз.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ КАРБИНОКУБАНОВЫХ, КАРБИНОРЕКТАНГУЛАНОВЫХ И КАРБИНОАЛМАЗНЫХ ФАЗ

Беленков Е.А.¹, Грешняков В.А.¹, Мавринский В.В.²

¹Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

²Магнитогорский государственный университет, 455038, Магнитогорск, пр. Ленина, 114

Одним из возможных способов управления структурой и свойствами углеродных материалов является изменение соотношения в них углеродных атомов, находящихся в различных гибридизованных состояниях. В настоящее время ведется активный поиск возможных путей синтеза гибридных углеродных фаз, состоящих из $sp - sp^2$, $sp - sp^3$, $sp^2 - sp^3$ или $sp - sp^2 - sp^3$ гибридизованных атомов. В данной работе выполнены модельные расчеты структуры карбиноалмазных фаз, состоящих из атомов углерода в состоянии $sp - sp^3$ гибридизации.

Расчеты структуры новых углеродных фаз были выполнены методами молекулярной механики. Была рассчитана структура 19 гибридных $sp - sp^3$ фаз – 4 фаз на основе алмаза, 7 фаз на основе кубана и 8 фаз на основе ректангулана. Структура этих фаз была предсказана на основе разработанной схемы классификации, в основу которой была положена степень отличия структур новых фаз от алмазоподобных структур, состоящих только из sp^3 гибридизованных атомов. Новые фазы характеризовались соотношением атомов, находящихся в состояниях sp и sp^3 гибридизации. Получение нового $sp - sp^3$ гибридного материала модельно представлялось как результат замены части sp^3 гибридизованных атомов на атомы в состоянии sp гибридизации. В результате оказываются возможными 4 класса карбиноалмазных фаз. К первому классу относятся α -карбиноалмазные фазы, в которых у каждого sp^3 гибридизованного атома одна из четырех ковалентных связей, заменена на связь с sp гибридизованным атомом. Другой тип $sp - sp^3$ гибридных структур (β -карбиноалмазных) можно получить заменой двух связей каждого sp^3 гибридизованного атома в структуре алмаза на связи с атомами, находящимися в состоянии sp гибридизации. Следующий тип γ -карбиноалмазов можно получить, если заменить три углерод-углеродные связи между sp^3 гибридизованными атомами на связи с sp гибридизованными атомами. Четвертый тип δ -карбиноалмазных структур можно получить, если каждый sp^3 гибридизованный атом все четыре связи будет образовывать с sp гибридизованными атомами. В результате модельных расчетов установлена возможность устойчивого существования новых карбиноалмазных фаз, найдены параметры их элементарных ячеек.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ФАЗЫ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$) ПРИ ИОННОМ ОБМЕНЕ

Меженина О.А., Бурмистров В.А.

Физико-технологический институт РАН, 17218, Москва, Нахимовский пр., 34

Получение материалов на основе наноструктур обладающих ионообменными свойствами и протонной проводимостью необходимо для создания ионообменных мембран и электрохимических источников тока. Такие материалы в виде керамик могут быть получены путем твердофазного синтеза с последующим замещением ионов щелочных металлов на протонные группировки.

Степень замещения и подвижность протонных группировок во многом определяется структурой образующихся фаз. В связи с этим представляет интерес изменение структурных параметров системы $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$) при ионном обмене. Для исследования были взяты фазы переменного состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$), полученные твердофазным синтезом имеющие структуру типа пироклора пр. гр. симм. Fd3m.

Таблица 1 Параметр элементарной ячейки α и относительная интенсивность I_{311}/I_{222} для фаз состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$) до и после ионного обмена.

№	Состав фазы	исходные образцы		образцы после ионного обмена	
		$\alpha_{\text{исходн.}}, \text{Å}$	I_{311}/I_{222}	$\alpha_{\text{ионнозам.}}, \text{Å}$	I_{311}/I_{222}
1	$KWSbO_6$	10,267	1,16	10,313	0,78
2	$Na_{0,2}K_{0,8}WSbO_6$	10,276	1,03	10,321	0,85
3	$Na_{0,4}K_{0,6}WSbO_6$	10,283	0,96	10,321	0,85
4	$Na_{0,6}K_{0,4}WSbO_6$	10,299	0,62	10,313	0,45

Как показали проведенные исследования, при ионном обмене наблюдается изменение параметра элементарной ячейки и относительной интенсивности рефлексов с нечетными индексами (Табл.1). Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что ионный обмен носит объемный характер, вследствие чего происходят изменения структурных параметров фазы переменного состава $Na_xK_{1-x}WSbO_6$ ($0 \leq x \leq 0,6$).

Анализ исследований позволил предположить, что при ионном обмене в данной системе идет встречная диффузия протонных группировок в структуру образца и диффузия ионов K^+ в раствор. В докладе обсуждается модель расположения ионов по правильной системе точек пр. гр. симм. Fd3m.

МЕТОДЫ АНАЛИЗА ФОРМЫ ПРОФИЛЕЙ РЕНТГЕНОВСКИХ ДИФРАКЦИОННЫХ ЛИНИЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Некраш Е.В., Беленков Е.А

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Исследование фазового перехода неупорядоченного углерода в графит при высокотемпературной обработке, называемого графитацией, представляет как научный, так и практический интерес. Для исследования графитации наиболее подходящими методами исследования являются методы рентгеноструктурного анализа (РСА), так как они одновременно позволяют определять межплоскостные расстояния, средние размеры кристаллитов и величины микродеформаций. Однако в графитоподобных углеродных материалах (УГМ) с размерами кристаллитов от 1 до 100 нм наблюдается зависимость параметров элементарных ячеек от размеров кристаллитов. Поэтому традиционные методы РСА (гармонический анализ, методы моментов и аппроксимации) дают для углеродных материалов неадекватные результаты. Вопрос о том, каким образом необходимо модифицировать данные методы РСА, чтобы повысить точность до сих пор остается нерешенным. Поэтому актуальной является задача сравнительного анализа методик анализа формы профилей рентгеновских дифракционных линий.

Так как синтезировать графитоподобные УГМ с заранее заданным распределением микродеформаций и кристаллов по размерам затруднительно, сравнительный анализ традиционных методов РСА был выполнен на модельных профилях дифракционных линий, рассчитанных для различных изначально заданных распределений микродеформаций и кристаллов по размерам. Установлено, что как в случае наличия взаимосвязи между размерами кристаллов и межплоскостными расстояниями, так и в случае отсутствия данной зависимости, тип распределения кристаллов и микродеформаций оказывает существенное влияние на точность определения данных параметров. Если не учитывать влияние этих факторов, ошибка в находимых численных значениях параметров структуры может достигать 70%. Модификация методов РСА возможна введением поправочных коэффициентов, зависящих от типов распределения кристаллов по размерам и относительных микродеформаций по величине, однако для этого необходимо априори знать тип распределения кристаллов и микродеформаций. Таким образом, для корректного определения параметров структуры нанокристаллических УГМ необходима разработка новых методов анализа формы профилей рентгеновских дифракционных максимумов, учитывающих наличие взаимосвязи между размерами кристаллов и межплоскостными расстояниями.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

ПЛАТО НАМАГНИЧЕННОСТИ И СМЕНА ЗНАКА МАГНЕТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В ФЕРРИМАГНИТНОЙ СПИНОВОЙ ЦЕПОЧКЕ

Боярченко А.С., Бострем И.Г., Овчинников А.С.¹

¹Уральский Государственный Университет им. А.М. Горького, 620083, Россия, Екатеринбург,
ул. Ленина 51, Кафедра теоретической физики

В работе проведено исследование магнетокалорического эффекта для ферримагнитной спиновой цепочки $(5/2, 1)$ при помощи предложенного в [1] квантового способа расчета параметров кластера (cluster solver). На основе рассчитанного спектра состояний кластера была построена кривая намагничивания $m(H)$, адиабатические кривые зависимости температуры T от приложенного поля H (Рис. 1а) и проведено исследование поведения системы вблизи поля H_c , разрушающего плато основного состояния.

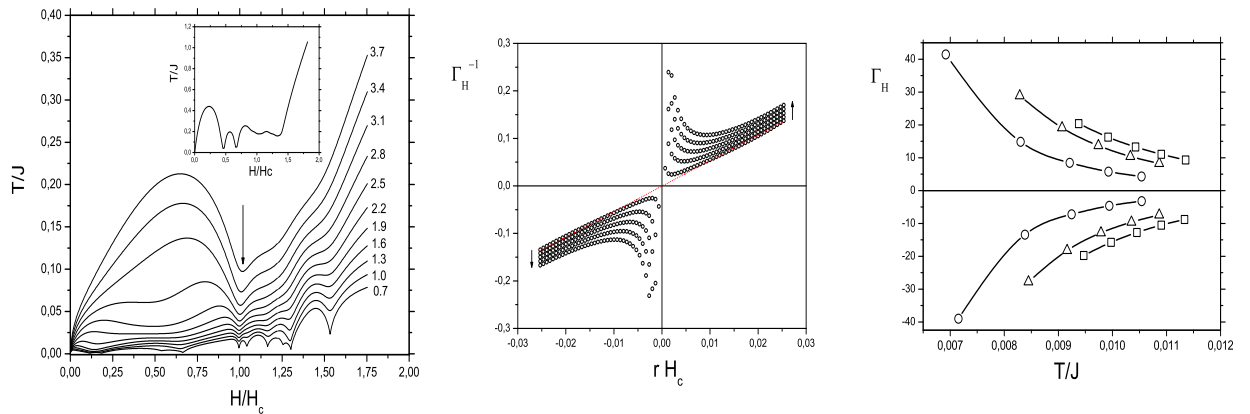


Рис. 1: (а) Магнетокалорический эффект в ферримагнитной цепочке $(5/2, 1)$. (b) Смена знака магнитного параметра Грюнайзена при изменении поля H . (с) Расходимость параметра Грюнайзена при уменьшении температуры при различных значениях H вблизи H_c .

Вычисленная зависимость магнитного параметра Грюнайзена $\Gamma_H = 1/(dT/dH)_S$ от поля H ($r = (H - H_c)/H_c$) проявляет явные черты квантового фазового перехода вблизи H_c . В частности, обнаружена характерная смена знака Γ_H при прохождении через H_c (Рис. 1b) и степенная расходимость Γ_H при уменьшении температуры (Рис. 1с), что соответствует предсказаниям скейлинговой теории [2, 3].

1. V.E. Sinitsyn, Bostrem, Ovchinnikov, J.Phys.A:Theor.Math.**40**, 645 (2007)
2. L. Zhu, M. Garst, A. Rosch, Q. Si, Phys. Rev. Lett. **91**, 066404 (2003)
3. M. Garst, A. Rosch, Phys. Rev. B **71**, 205129 (2005)

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКА ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ВТОРОГО РОДА

Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А.

Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, 644077 Омск, пр. Мира, 55а
E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

Все материалы содержат дефекты структуры, поэтому актуальной является задача изучения влияния дефектов структуры на динамическое поведение системы вблизи температуры фазового перехода второго рода. В динамике фазовых переходов существует ряд физически важных процессов, определяемых поведением многоспиновой корреляционной функции и поэтому особенно сложных для теоретического описания. Это, например, тепловые процессы вблизи критической точки для системы жидкость-газ, поглощение энергии электромагнитного поля при явлениях магнитного резонанса, аномальное поглощение и рассеяние акустических волн в средах при фазовых переходах. Особенности неравновесного поведения систем вблизи температуры фазового перехода второго рода T_c находят свое проявление в аномально сильном поглощении и дисперсии скорости ультразвука в твердых телах за счет эффектов взаимодействия низкочастотных акустических колебаний с долгоживущими и аномально большими по амплитуде флуктуациями параметра порядка.

В настоящей работе представлено теоретическое описание влияния дефектов структуры на характеристики распространения ультразвука в неупорядоченных трехмерных изингоподобных системах с учетом эффектов релаксации. В результате совместного решения уравнений критической динамики для упругих и спиновых переменных из выражений для получаемых функций отклика выделено асимптотическое поведение коэффициента поглощения и дисперсии скорости ультразвука от частоты звука ω и приведенной температуры $\tau = (T - T_c)/T_c$ в гидродинамической ($\omega\tau^{-z\nu} \ll 1$, критической ($\omega\tau^{-z\nu} \gg 1$ и предкритической «переходной» областях.

Показано, что наличие дефектов структуры приводит к более сильному, чем для однородной системы, увеличению коэффициента поглощения и дисперсии скорости звука по мере приближения к критической температуре уже в гидродинамической области. В критической области для структурно неупорядоченных систем должна наблюдаться как более сильная частотная, так и температурная зависимость акустических характеристик по сравнению с их однородными аналогами. Результаты расчетов представлены в виде температурных зависимостей характеристик ультразвука для однородных и неупорядоченных систем [1,2].

Предсказывается проявление динамических эффектов влияния дефектов структуры в аномальном поглощении и дисперсии скорости звука в более широком температурном интервале относительно критической температуры (уже в гидродинамической области), чем в других экспериментальных методах, в которых для выявления данных эффектов необходимо проводить исследования в узком температурном интервале вплоть до $\tau \simeq 10^{-4}$. Таким образом, полученные в данной работе результаты могут служить ориентиром для целенаправленных экспериментальных исследований динамических эффектов влияния структурных дефектов на критическое поведение твердых тел акустическими методами.

Исследования поддержаны грантом МК-8738.2006.2 программы Президента РФ.

1. Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А., ФММ, **104**, 235 (2007).
2. Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А., ЖЭТФ, в печати (2008).

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА КРИТИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ВТОРОГО
РОДА

Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А.

Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, 644077 Омск, пр. Мира, 55а
E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

В последние годы много теоретических и экспериментальных работ было посвящено исследованию влияния замороженных дефектов структуры на критическое поведение твердых тел. В большинстве работ исследование ограничивается рассмотрением низкой концентрации точечных дефектов структуры, что позволяет считать дефекты структуры и создаваемые ими эффекты типа «случайной локальной температуры» гауссовски-распределенными и δ -коррелированными. В то же время вопрос о влиянии на критическое поведение эффектов корреляции дефектов значительно менее исследован. В рамках этой же проблемы можно поставить вопрос о влиянии на критическое поведение протяженных дефектов, таких как дислокации или плоские дефекты структуры, возникающие, например, на границе зерен. Можно ожидать, что дальнедействующая корреляция в пространственном распределении дефектов может модифицировать критические свойства неупорядоченных систем.

В работе [1] была предложена модель критического поведения неупорядоченных систем, в которых корреляционная функция случайной локальной температуры $g(x - y) = \langle\langle T_c(x) T_c(y) \rangle\rangle - \langle\langle T_c(x) \rangle\rangle^2$ убывает с расстоянием по степенному закону $|x - y|^{-a}$. В работе [1] было показано, что для $a > d$, где d - размерность системы, корреляция дефектов не сказывается на критическом поведении систем. Для $a < d$ корреляция дефектов является существенной и более широкий класс неупорядоченных систем, а не только трехмерная модель Изинга, как в случае δ -коррелированных дефектов, может характеризоваться новым типом критического поведения.

В настоящей работе обобщены методы теоретико-полевого описания критического поведения систем с дальнедействующей корреляцией дефектов [2] на случай исследования влияния эффектов корреляции дефектов на характеристики распространения ультразвука в неупорядоченных трехмерных системах вблизи температуры фазового перехода. Показано, что эффекты корреляции дефектов приводят в критической области к аномальному увеличению коэффициента поглощения и дисперсии скорости звука по отношению к их значениям для однородной системы и систем с точечными дефектами [3].

Для проверки теоретически предсказанного влияния эффектов корреляции дефектов было проведено компьютерное исследование критического поведения трехмерной модели Изинга и ХУ-модели со случайно распределенными линейными дефектами. Для определения динамического и статических критических индексов применен метод коротковременной динамики, позволяющий определять характеристики критического поведения систем на ранних этапах релаксации системы. Сопоставление показало хорошее согласие полученных значений динамического и статических критических индексов [4] с результатами проведенных ранее теоретико-полевых ренормгрупповых расчетов [2].

Исследования поддержаны грантом МК-8738.2006.2 программы Президента РФ.

1. Weinrib A., Halperin B.I., Phys. Rev. B **27**, 413 (1983).
2. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A., Phys.Rev. B **62**, 8777 (2000).
3. Прудников П.В., Прудников В.В., Носихин Е.А., ФММ, **104**, 235 (2007).
4. Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н. и др., ЖЭТФ, **132**, 417 (2007).

РЕНОРМ-ГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Прудников В.В., Прудников П.В., Калашников И.А.

Омский государственный университет им.Ф.М.Достоевского, 644077 Омск, пр. Мира, 55а
E-mail: prudnikov@univer.omsk.su

Данная работа посвящена изучению влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности $m(t)$ ферромагнитной системы в критической точке. Известно, что аномальные особенности в явлениях критической динамики определяются прежде всего эффектами дальнедействующей корреляции долгоживущих флуктуаций ряда термодинамических переменных. Фундаментальный интерес, в связи с этим, представляет исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния, созданного, например, при температурах много больших критической и характеризуемого поэтому малой корреляционной длиной, в сильно коррелированное состояние при критической температуре. Как показано в работе [1], критическая эволюция системы из начального неравновесного состояния с малой намагниченностью $m_0 = m(0) \ll 1$ приводит к универсальному скейлинговому поведению для $m(t)$ на коротко-временном этапе ее критической эволюции и характеризуется аномальным увеличением намагниченности системы со временем, описываемым степенным законом $m(t) \sim t^\theta$. Вычисление нового независимого критического показателя, характеризующего данную временную зависимость намагниченности, было осуществлено в работе [1] в рамках ренормгруппового описания с применением метода ε -разложения в двухпетлевом приближении. Последующее исследование явления неравновесной критической релаксации трехмерной модели Изинга в коротко-временном режиме методами компьютерного моделирования [2] подтвердило предсказание теории о степенном характере эволюции намагниченности ферромагнитных систем, однако определенное значение показателя $\theta = 0.108(2)$ находится в неудовлетворительном соответствии с теоретическим значением $\theta = 0.130$, получаемым при непосредственной подстановке параметра $\varepsilon = 1$ для случая трехмерных систем, или значением $\theta = 0.138$, получаемым при использовании метода Паде-Бореля для суммирования имеющегося очень короткого ряда теории по ε . В настоящей работе впервые осуществлен расчет динамического критического индекса коротко-временной эволюции θ в следующем трехпетлевом приближении ренорм-групповой теории в рамках метода ε -разложения и получено хорошее согласие с результатами компьютерного моделирования при применении метода Паде-Бореля для суммирования трехчленного ряда теории при $\varepsilon = 1$ ($\theta = 0.1078$).

1. Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B., Z.Phys. B **73**, 539 (1988).
2. Jaster A. et al., J.Phys. A **32**, 1395 (1999).

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА И ПРОДУКТОВ ЕГО КАРБОНИЗАЦИИ

Сапожникова Т.С., Мирзоев А.А.

Южно-Уральский Государственный Университет, 454080, Челябинск, пр. В.И. Ленина, 76

Поливинилиденфторид (ПВДФ) – полимер, который нашел широкое применение в промышленности благодаря своим свойствам (высокой механической прочности, эластичности, химической инертности, термостойкости и другим параметрам), а также перспективный материал для электроники и медицины. Определенные виды воздействий (рентгеновское излучение, бомбардировка заряженными частицами, химические реагенты) приводят к карбонизации поверхности полимера (отщеплению атомов фтора и водорода и образованию карбиновых фрагментов). Данный процесс представляет интерес с нескольких точек зрения - как деградация устойчивого к различного рода воздействиям полимера и как метод синтеза карбиновых структур.

По результатам обработки экспериментальных данных авторами [1] была предложена математическая модель карбонизации ПВДФ. Согласно этой модели нами была разработана методика моделирования процесса карбонизации. Затем методами квантово-химических расчетов [2] проведено компьютерное моделирование геометрической и электронной структуры молекул ПВДФ, карбина и промежуточных структур, образующихся в ходе карбонизации.

По результатам расчетов строились полные и парциальные плотности состояний рассматриваемых молекул и сравнивались с экспериментальными данными – фотоэлектронными и NEXAFS спектрами пленки ПВДФ, снятыми по мере карбонизации. Установлено, что расчетные спектры (основного уровня атомов углерода, свободных состояний атомов фтора, полной плотности состояний) воспроизводят данные экспериментов при моделировании карбонизации согласно математической модели.

Таким образом, разработана методика моделирования процесса карбонизации галогенсодержащего полимера, которая реалистично воспроизводит электронные свойства ПВДФ и его карбонизованных производных и может быть использована для изучения процесса дегидрогалогенирования полимеров (в том числе образования карбиноподобных структур).

1. I.V. Voinkova *et al*, Polymer Degradation and Stability, **89**, 471 (2005).
2. M.W. Shmidt *et al*, J. Comp. Chem., **14**, 1347 (1993).

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРБОНИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Шахова И.В., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Карбин - термодинамически неравновесная структурная разновидность углерода, состоящая из углеродных атомов в состоянии *sp* гибридизации, получить которую возможно из полимеров, имеющих углеродный цепочечный каркас, наиболее близкий по структуре к структуре карбиновых цепочек. Одними из наиболее перспективных материалов для получения карбина являются СФН полимеры. Углеродный каркас этих полимеров может быть трёх основных структурных разновидностей α , β и γ . СФН полимеры, имеющие одинаковую конфигурацию углеродного каркаса, могут иметь разный химический состав и структуру в зависимости от порядка соединений фтора и водорода с каркасом - поливинилиденфторидную $(-\text{CH}_2-\text{CF}_2)_n$, полидифторэтиленовую $(-\text{CFH}-\text{CFH})_n$, поливинилфторидную $(-\text{CFH}-\text{CH}_2)_n$ и политрифторэтиленовую $(-\text{CF}_2-\text{CFH}-)_n$.

В данной работе методами молекулярной механики была теоретически исследована возможность формирования карбина из СФН полимеров при их карбонизации. При моделировании карбонизации предполагалось, что удаление не углеродных атомов происходит поатомно, независимо и в первую очередь удаляются атомы водорода. Принималось допущение, что образование новых углерод-углеродных связей происходит между любыми соседними углеродными атомами, у которых есть оборванные связи, независимо от того находятся ли углеродные атомы в одной цепочке или соседних. При моделировании процесса карбонизации полимеров, было установлено, что наиболее перспективными из них для синтеза карбиноподобных структур являются α - и β - модификации полидифторэтилена $(-\text{CFH}-\text{CFH}-)_n$, так как только в этом полимере при поатомном удалении атомов водорода нескомпенсированные связи могут замкнуться внутри каждой отдельной цепочки, и соседние цепочки не будут стремиться к сшивкам друг с другом. Другие же три разновидности СФН полимеров, не имеют возможности замкнуть оборванные связи внутри цепочки, и цепочки стремятся к сшивкам друг с другом, в результате чего должны образовываться не карбиноидные, а графитоподобные структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-03-96027.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ АЛЮМИНИЯ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ГЕКСАГОНАЛЬНОГО КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

Институт химии твердого тела УрО РАН, 620619, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91.

Гексагональный карбид вольфрама WC обладает рядом уникальных свойств, например, высокой твердостью в широком интервале температур и применяется в качестве материала для изготовления износостойких инструментальных сплавов и др. Хорошо известно, что с помощью введения примесей замещения или внедрения в кристаллическую решетку, можно изменять свойства имеющегося соединения. Недавно синтезированы новые сплавы $W_{1-x}Al_xC$ [1, 2] с “нестандартным” типом замещения – атомов вольфрама на p -элемент (алюминий). В настоящей работе в рамках первопринципного метода FLAPW-GGA исследованы зонная структура и некоторые физические свойства сплава $W_{0,5}Al_{0,5}C$ в сравнении с бинарными карбидами (WC и Al_4C_3).

Результаты расчета полной и парциальных плотностей состояний $W_{0,5}Al_{0,5}C$ представлены на рис. 1. Основной вклад в прифермиевскую область вносят $C-2p$ ($\sim 33\%$) и $W-5d$ ($\sim 21\%$) состояния. Были вычислены энергии образования сплава $W_{0,5}Al_{0,5}C$ путем различных реакций, установлена наибольшая выгодность синтеза соединения из простых элементов. Анализ карт электронной плотности в различных кристаллографических плоскостях установил, что межатомные взаимодействия имеют сложный ковалентно-ионно-металлический характер. На основе зонных расчетов выполнены оценки коэффициентов низкотемпературной теплоемкости (γ , константы Зоммерфельда) и парамагнитной восприимчивости Паули (χ).

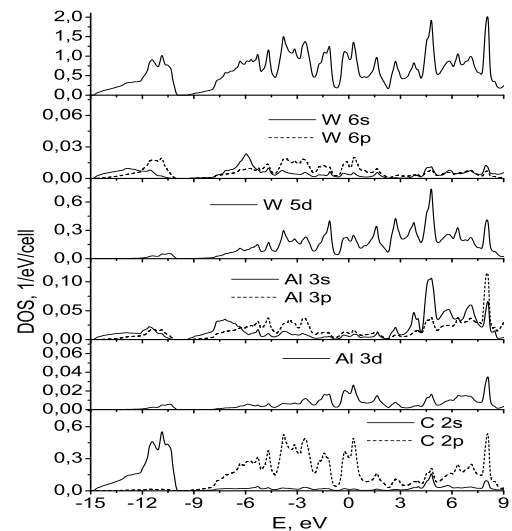


Рис. 1: Полная и парциальные плотности состояний $W_{0,5}Al_{0,5}C$

1. J. Yan *et al.*, Mater. Res. Bull., **39**, 707 (2004).
2. J. Yan *et al.*, J. of Sol. St. Chem., **177**, 2265(2004).

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СПЛАВАХ
Ni – Mn – Ga МЕТОДОМ МОНТЕ – КАРЛО

Соколовский В.В., Бучельников В.Д., Таскаев С.В.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

Недавние исследования нестехиометрических сплавов с эффектом памяти формы $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ показали универсальную тенденцию к повышению температуры структурного перехода и понижению температуры магнитного перехода при отклонении от стехиометрии [1]. В ряде композиций ($x = 0.18 \div 0.27$) наблюдается совмещение температур магнитного и структурного переходов, приводящее к большим значениям магнитокалорического эффекта (МКЭ). В данной работе проводится моделирование МКЭ в сплавах $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ ($x = 0.18, 0.20, 0.22, 0.24, 0.27$) методом Монте – Карло.

В представленной трехмерной решеточной модели учитывается взаимодействие магнитной и структурной подсистемы. Магнитная подсистема описывается моделью Поттса пяти состояний [2], в которой спиновое число магнитной подсистемы может иметь пять проекций на внешнее магнитное поле. Структурная подсистема рассматривается с помощью вырожденной модели трех состояний Блюме – Эмери – Гриффитса [3], в которой спиновые переменные характеризуют деформации узлов кубической решетки при структурном переходе. Моделирование решетки проводится с помощью стандартного алгоритма Метрополиса с динамикой изменения состояния выбранного узла решетки в магнитной и структурной подсистемы на какое – либо возможное [4].

С помощью данной модели получены температурные зависимости магнитного и структурного параметров порядка, теплоемкости, внутренней энергии, магнитной энтропии и изменения энтропии при изменении величины магнитного поля от 0 до 5 Т. В качестве сравнения с энтропией, рассчитанной методом Монте – Карло непосредственным интегрированием теплоемкости, приведена энтропия, рассчитанная в приближении молекулярного поля.

1. V.V. Khovailo *et al.*, J.Phys.: Condens. Matter, **13**, 9655, (2001).
2. F.Y. Wu, Reviews of Modern Physics, **54**, 235, (1982).
3. T. Castan *et al.*, Phys. Rev. B, **60**, 7071, (1999).
4. Х. Гулд, *Компьютерное моделирование в физике. Часть 2*, – М.: Мир, (1990).

МОДЕЛИРОВАНИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВАХ Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Таскаев С.В., Бучельников В.Д., Соколовский В.В.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Недавно было обнаружено, что в некоторых сплавах Гейслера кроме магнитного фазового перехода из парамагнитной фазы (ПМ) в ферромагнитную фазу (ФМ) может иметь место структурный фазовый переход, который сопровождается переходом из ФМ фазы в антиферромагнитную (АФМ) фазу. В этом случае реализуется следующая последовательность фазовых переходов: ПМ кубическая фаза - ФМ кубическая фаза - АФМ кубическая фаза. Описанная ситуация наблюдается в сплавах Гейслера Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) [1] и сплавах допированных атомами переходных элементов, например атомами Co [2]. В сплавах Гейслера Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) другого стехиометрического состава может наблюдаться более сложная последовательность магнитных и структурных фазовых переходов: ПМ кубическая фаза - ФМ кубическая фаза - ПМ тетрагональная фаза - ФМ тетрагональная фаза [3]. Расчеты из первых принципов, показывают, что в рассматриваемых сплавах обменные интегралы являются осциллирующими функциями от межатомного расстояния, то есть могут принимать как положительные, так и отрицательные значения [4].

Отличительной особенностью метамагнитоструктурного перехода в сплавах Ni-Co-Mn-X и Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb) от магнитоструктурного перехода в сплавах Ni-Mn-Ga является то, что данный переход очень чувствителен к величине магнитного поля и при нем наблюдаются значительно большее изменение намагниченности [2]. Это позволяет предположить, что сплавы Гейслера с метамагнитоструктурным переходом будут перспективными при управлении деформациями и эффектом памяти формы магнитным полем меньшей величины, а также в качестве рабочих тел в магнитном охлаждении.

В данной работе теоретически исследуются фазовые диаграммы сплавов Гейслера Ni-Mn-X (X = In, Sn, Sb), в которых может иметь место инверсия обменного взаимодействия при помощи методов статистической физики, в частности методом Монте-Карло.

1. K. Oikava et al. Appl. Phys. Lett., **88**, 122507 (2006).
2. R. Kainuma et al. Nature, **439**, 957 (2006).
3. T. Krenke et al. Phys. Rev. B., **73**, 174413 (2006).
4. E. Sasioglu et al. Phys. Rev. B., **71**, 014412 (2005).

ИЗОСТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ОЦК ЦИРКОНИИ, СВЯЗАННЫЕ С ОСОБЕННОСТЯМИ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Трубицын В.Ю.¹, Долгушева Е.Б.²

¹Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Ижевск, ул.Кирова, 132
E-mail: tvynew@otf.pti.udm.ru

²Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Ижевск, ул.Кирова, 132
E-mail: elena@otf.pti.udm.ru

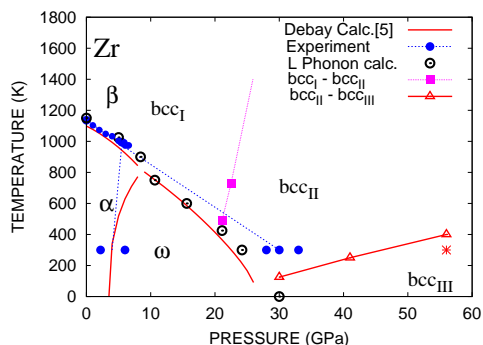


Рис. 1: P-T фазовая диаграмма циркония. Звездочкой обозначен изоструктурный переход из работы [1]

В работе [1] экспериментально было обнаружено, что в bcc-Zr при комнатной температуре и давлении $P = 56$ GPa наблюдается резкое уменьшение (примерно на 1.2%) объема решетки. Авторы работы [1] предположили, что это изменение связано с наличием $s - d$ изоструктурного перехода в bcc цирконии. Тем не менее, последующие подробные теоретические расчеты зонной структуры, проведенные разными авторами, не подтвердили существования такого перехода.

В работах [1,2] мы показали, что для теоретического определения области стабильности bcc-Zr можно ограничиться изучением характера движения псевдочастицы в двумерном ангармоническом эффективном потенциале. Температурнозависимый эффективный потенциал определялся как изменение

свободной энергии кристалла при смещениях атомов, соответствующих одновременно продольной и поперечной ветви колебательного спектра с волновым вектором $\mathbf{k} = \frac{2}{3}(1, 1, 1)$ (L_l и L_t -фононы). В работах [1,2] было продемонстрировано, что частота колебаний поперечной L_t моды циркония может быть использована в качестве индикатора, указывающего на то, какая структура (bcc или ω) более вероятны при данной температуре и давлении, а также определена линия равновесия $bcc - \omega$ фаз на P-T плоскости.

В настоящей работе, используя аналогичный подход будет показано, что на P-T фазовой диаграмме циркония, в области существования bcc фазы, имеются три области с различным характером динамики решетки. А именно, при низких давлениях и высоких температурах происходит динамическая стабилизация сильно ангармонической решетки за счет значительного смещения атомов от положения равновесия в течение одного периода колебаний (на рисунке обозначена как bcc_I). При высоких давлениях bcc структура характеризуется незначительным ангармонизмом продольной L моды и небольшими смещениями атомов около положений равновесия в решетке (bcc_{III}). В области промежуточных давлений наблюдаются колебания двух типов: продолжительные колебания вблизи положений равновесия атомов bcc решетки; и колебания, соответствующие перестройке bcc решетки снова в bcc решетку, но с другой пространственной ориентацией (область bcc_{II}). Такие переходы происходят через "виртуальную" ω фазу. Определены линии равновесия между этими областями и обсуждена возможность изоструктурных переходов в Zr, связанных с изменением колебаний решетки.

1. Y. Akahama, M. Kobayashi, and H. Kawamura, J. Phys. Soc. Japan, **60**, 10, 3211 (1991).
2. V.Yu. Trubitsin Phys.Rev. B, **73**,214303 (2006).
3. V.Yu. Trubitsin Phys.Rev. B, **73**,214304 (2006).

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДАМИ
РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКСОМЕТРИИ И ФМР

Турков В.К.¹, Власов В.С.¹, Ефимец Ю.Ю.¹, Котов Л.Н.¹, Носов Л.С.¹, Петраков А.П.¹,
Калинин Ю.Е.², Ситников А.В.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55
²Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж, Московский пр.

14

Композитные плёнки на основе ферромагнитных и диэлектрических компонент, особенно вблизи перколяционного перехода, являются ещё мало изученными материалами. В данной работе исследовались композитные пленки составов $(Fe_{40}Co_{40}Zr_{20})_x(Al_2O_3)_{1,00-x}$, ($0,3 < x < 0,6$) с толщиной плёнок 2–6 мкм, напылённых на ситалловую подложку. При концентрациях $x < 0,35$ частицы сплава $Fe_{40}Co_{40}Zr_{20}$ хаотично распределены в диэлектрической матрице Al_2O_3 . При концентрациях $x > 0,5$ частицы из Al_2O_3 хаотично распределены в металлической фазе $Fe_{40}Co_{40}Zr_{20}$. При исследованиях использовались две серии плёнок при одинаковых концентрациях, полученных методом ионно-лучевого напыления в атмосферах аргона и кислорода. Для определения размеров и степени кристалличности кластеров применялся интегральный метод рентгеновской рефлексометрии, в котором определялась зависимость коэффициента отражения от угла скольжения. В работе получены зависимости размеров включений и степени кристалличности металлической и диэлектрической фаз и расстояний между ними от концентрации x для двух серий плёнок. Для этих же плёнок были исследованы спектры ФМР на ЭПР спектрометре при частоте СВЧ поля 9,4 ГГц. Определены значения резонансных полей $H_{рез}$ и ширин линии резонансной кривой однородной процессии вектора намагниченности ΔH при тангенциальной ориентации пленки относительно направления постоянного магнитного поля. Выявлено, что ΔH и $H_{рез}$ являются чувствительными к структурным изменениям материала: при увеличении x наблюдается аномальный рост величины ΔH , а величина $H_{рез}$ резко уменьшается. Данные значения концентраций находятся в доперколяционной области [1]. В области выше порога перколяции экспериментальные кривые слабо меняются с ростом x . Экспериментальные зависимости объясняются на основе решений для вектора намагниченности из уравнений Ландау-Лифшица в ферромагнитных наночастицах с разным соотношением диполь-дипольных и обменных взаимодействий. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. L.N. Kotov *et al.*, JMMM, **316**, 20 (2007)

РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ ФИЛЬТРАЦИИ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

Усманова С.М., Сабурова Р.В.

Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, ул.
Красносельская, 51

Рассматриваются задачи плоской фильтрации как несжимаемых, так и сжимаемых одно-, двух- и трехфазной жидкостей в неоднородной горизонтальной изотропной среде прямоугольной конфигурации, когда внутри неё расположены стоки и источники. Предполагается, что фильтрация жидкости следует линейному закону Дарси. Задаются различные переменные граничные и начальные условия.

При определённых предпосылках относительно неоднородности среды и свойств фильтрующейся в ней жидкости использованы эффективные подходы аналитического решения для последовательно усложняющихся математических моделей вышеупомянутых задач теории фильтрации. Кроме того, для их решения при более общих предположениях о свойствах жидкости применен известный конечно-разностный метод.

Полученные аналитические решения краевых задач представляют самостоятельный интерес подобно всем задачам математической физики, находящим приложения в разных областях науки. Они могут быть использованы для различных гидродинамических исследований и также в качестве эталонов для оценки точности приближённых методов их реализации на ЭВМ. Наряду с этим они дают возможность корректно ставить и решать широкий круг задач оптимального управления процессом вытеснения жидкостей из неоднородных сред по выбранному критерию качества решения.

На основе анализа результатов численных экспериментов для разнообразных неоднородных гипотетических сред и фильтрующихся в них жидкостей, причем в отдельных случаях с учетом их реальных свойств, получены качественные выводы по различным аспектам процесса фильтрации жидкости в неоднородной среде.

РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ И ГАЗА ВОДОЙ

Усманова С.М., Сабурова Р.В.

Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, ул.
Красносельская, 51

Работа посвящена решению краевых задач трехфазной фильтрации на основе двумерной модели фильтрации бинарной углеводородной смеси с водой, являющейся обобщением модели Маскета-Мереса и частным случаем фильтрации многокомпонентных смесей, когда число углеводородных компонентов равно двум и углеводородная смесь разделена условно на нелетучую нефть и газ постоянного состава. Фазовые превращения, изменения физических свойств нефти и газа учитываются на основе экспериментально полученных на линии насыщения зависимостей количества растворенного газа, объемных коэффициентов и вязкостей от давления при постоянной температуре. Приведены результаты решения конкретных задач. Оценивается влияние понижения забойных давлений добывающих скважин ниже давления насыщения на технологические показатели разработки нефтяного пласта в условиях девятиточечной системы заводнения.

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ (СТАРЕНИЕ, ОМОЛОЖЕНИЕ И ПАМЯТЬ) В ОДНОМЕРНЫХ КЛАССИЧЕСКИХ СПИНОВЫХ ЦЕПОЧКАХ

Бузиелло Г.¹, Газеева Е.В.², Сабурова Р.В.², Хайбутдинова И.Р.², Чугунова Г.П.³

¹Отделение физических наук, Университет, 840081, Салерно, Баронисси-Салерно и ИНФМ-Салерно, Италия

²Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, ул. Красносельская, 51

³Казанский государственный технологический университет, 420015, Казань, ул. К.Маркса, 68

Аналитически и численно изучена низкотемпературная неравновесная динамика в одномерной классической изинговской спиновой цепочке в хаотическом поле. Обращено особое внимание на эффекты омоложения и памяти. Мы рассматриваем хаотическое поле и температуру намного меньшими, чем обменная связь. Небольшое изменение температуры в состоянии “омолодить” уже стареющую систему. Динамическая восприимчивость системы, стареющей при низкой температуре T_1 и внезапно охлажденной до температуры T_2 , очень близка к восприимчивости более “молодой” системы, непосредственно охлажденной от высокой температуры до температуры T_2 . В хаотических системах неравновесная динамика играет даже более важную роль, чем в чистых системах. Методом расчета неравновесных величин в нашей работе является метод ренормализационной группы (РГ) в реальном пространстве. Несмотря на приближенный характер, этот метод приводит к асимптотически точным результатам для многих величин. В нашей работе этот метод хорошо работает. Найдено старение в нескольких временных режимах, характеризуемых различными свойствами. Впервые рассмотрены интересные эффекты омоложения и памяти для динамической восприимчивости посредством изучения температурных сдвигов и циклов. Проведен краткий анализ этих эффектов. Свойства, обусловленные старением, могут быть рассчитаны точно для рассматриваемой нами модели. Нами показано, что двухвременные корреляционные функции имеют интересную зависимость от истории системы и зависят от обоих времен (t и t_w). Мы использовали модель, в которой энергетический ландшафт иерархический (как в модели Синая). Фазовый переход в модели отсутствует, поведение системы “контролируется” нуль-температурной фиксированной точкой. Сделано сравнение с другими моделями разупорядоченных систем.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОДЕЛЯХ МАГНИТНЫХ СВЕРХРЕШЕТОК МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

Хизриев К.Ш.¹, Муртазаев А.К.¹, Уздин В.М.²¹Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. Ярагского, 94²МЦ ДПО СПбГУ, 199178, Санкт-Петербург, 14 линия В.О., 29

Магнитные сверхрешетки Fe/V с тонкими чередующимися слоями магнитного и немагнитного вещества являются удобными объектами для изучения эффектов, связанных с размерностью системы в многослойных структурах. Минимальная толщина слоев Fe, при которой они остаются магнитными, составляет два атомных монослоя, причем температура Кюри зависит не только от количества магнитных монослоев, но и от толщины слоев немагнитного ванадия. Одна из причин влияния немагнитной прослойки на температуру фазового перехода связана с тем, что межслойное взаимодействие носит знакопеременный характер. В сверхрешетках Fe/V, помещенных в атмосферу водорода, происходит увеличение толщины прослойки ванадия за счет адсорбции водорода в подрешетке ванадия, поэтому имеется возможность управлять обменным взаимодействием и даже менять знак обменной константы. Следовательно, в таких системах может наблюдаться переход от трехмерного к двумерному магнетизму.

Особый интерес представляют сверхрешетки, в которых направление намагниченности соседних магнитных слоев антипараллельно. Именно в таких системах наблюдается эффект гигантского магнетосопротивления. В сверхрешетках Fe/V антиферромагнитное межслойное взаимодействие имеет место при толщинах прослойки ванадия 13-14 монослоев и железа 2-3 монослоя. Для таких сверхрешеток удастся подобрать диапазон давлений водорода, при котором межслойное обменное взаимодействие меняется от антиферромагнитного к ферромагнитному, проходя через ноль.

Таким образом, магнитные сверхрешетки, в частности сверхрешетки Fe/V, представляют собой уникальные системы, удобные для исследования динамики фазовых переходов при изменении размерности системы.

Нами для исследования фазовых переходов, магнитных и тепловых свойств магнитных сверхрешеток предложены модели сверхрешеток Fe₂/V_n/Fe₃. Для этих моделей рассчитаны температурные и полевые зависимости намагниченности, теплоемкости и восприимчивости. Эти же термодинамические величины исследованы в зависимости от числа слоев немагнитной прослойки. Построены фазовые диаграммы. Полученные результаты рассмотрены в свете имеющихся экспериментальных результатов и сопоставлены с теоретическими предсказаниями для модельных систем. Установлены особенности и количественные значения параметров, при которых в таких системах происходит переход от трехмерного к квазидвумерному поведению. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 06-02-96602, 07-02-00194).

РАЗЛИЧНЫЕ ТИПЫ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ АНИЗОТРОПИЯ ЯДРА СВЕРХДИСЛОКАЦИЙ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ti_3Al

Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е.

Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург 620041, С.Ковалевской, 18

В связи с возрастанием требований к материалам нового поколения, используемым в аэрокосмической промышленности, автомобилестроении и др., в последние годы все большее внимание исследователей обращено на алюминиды титана (Ti_3Al с гексагональной структурой $D0_{19}$, двухфазные сплавы $TiAl/Ti_3Al$). Алюминиды титана обладают низкой плотностью, высокой температурой плавления, стабильными модулями упругости и повышенными прочностными характеристиками. Среди важных характеристик поведения интерметаллидов можно выделить сильную ориентационную и температурную зависимость предела текучести, сложную геометрию скольжения, низкую пластичность и хрупкость при комнатной температуре. Как правило, для упорядоченных сплавов высокие прочностные свойства сочетаются с низкими пластическими характеристиками. В Ti_3Al такая закономерность сохраняется для пирамидального скольжения. Однако существует и другая важная особенность деформационного поведения Ti_3Al , ориентированного для призматического и базисного скольжения: значения предела текучести близки, тогда как значения деформации до разрушения отличаются в сотни раз.

Пластическая деформация алюминидов титана, как и других интерметаллидов, определяется характером расщепления и структурой ядра сверхдислокаций, осуществляющих деформацию. В настоящее время экспериментальные данные не могут дать детальной информации о тонкой структуре ядра $a/2$ сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы или $c+a/2$ свехдислокаций в плоскостях пирамиды I и II типа, и не позволяют прояснить механизм дислокационных превращений, ответственных за особенности деформационного поведения в этих плоскостях скольжения монокристаллического Ti_3Al . Использование компьютерного моделирования дислокаций в различных плоскостях скольжения в Ti_3Al позволило проанализировать структуру ядра дислокаций, выявить дислокационные конфигурации с наиболее низкой энергией, сопоставить энергии дислокаций в скользящих конфигурациях и в конфигурациях дислокационных барьеров. В результате проведенных расчетов дано объяснение экспериментально наблюдаемым типам температурных зависимостей деформационных характеристик Ti_3Al , ориентационной и температурной зависимости наблюдаемой дислокационной структуры.

”E“

**Электронные свойства
низкоразмерных систем**

МАКРОСКОПИЧЕСКИЙ СИММЕТРИЙНЫЙ ПОДХОД В ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА

Меньшенин В.В., Куркин М.И., Николаев В.В.

Институт физики металлов УрО РАН 620041, Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 18
E-mail: menshenin@imp.uran.ru

Обзор посвящен рассмотрению некоторых аспектов макроскопического симметричного подхода к описанию физических свойств магнитоупорядоченных кристаллов. Основным из них является следующее утверждение. Такое описание может быть вполне последовательным и полным только, если оно базируется на кристаллохимической симметрии среды, то есть на кристаллохимических пространственных группах $G_F\mathbf{1}'$, где G_F - федоровская пространственная группа, $\mathbf{1}'$ - инверсия времени.

Данное утверждение основано на двух обстоятельствах. Дело в том, что при коллинеарном магнитном упорядочении (локализованные магнитные моменты) магнитное состояние кристалла характеризуется, во-первых, обменной магнитной структурой (ОМС), то есть взаимной ориентацией магнитных моментов, связанной с обменными взаимодействиями между моментами, и, во-вторых, магнитным состоянием, то есть направлением этих моментов относительно кристаллографических осей [1]. Симметрия магнетика, определяемая ОМС и ее ориентационным состоянием, описывается магнитной пространственной группой. Однако описание симметрии магнетиков с помощью магнитных (шубниковских) пространственных групп не является полным [2]. Кроме того, если меняется хотя бы ориентационное состояние, то, как правило, изменяется и соответствующая ему группа магнитной симметрии. Поэтому, если рассматривается магнитоупорядоченная среда в условиях, когда либо магнитная группа изменяется, либо необходимо определить акустические, кинетические и т.п. свойства среды, то целесообразно исходить из кристаллохимической симметрии. Более того, использование магнитных групп по большому счёту оказывается не нужным.

Другим важным аспектом данного подхода оказывается необходимость учета пространственной симметрии при анализе инвариантности антиферромагнитных структур. Из-за различного поведения векторов антиферромагнетизма при перестановках атомов система характеризуется существованием центросимметричных или центроантисимметричных ОМС. Физические свойства кристаллов с ОМС такого типа оказываются различными. Эти различия можно обнаружить экспериментально, например, путем определения наличия или отсутствия у среды линейного магнитоэлектрического эффекта.

1. Е.А. Туров, А.В. Колчанов, В.В. Меньшенин, И.Ф. Мирсаев, В.В. Николаев. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. М., Физматлит, 2001, 560 с.
2. Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. М.: Атомиздат, 1981. 311с.

НЕРАВНОВЕСНЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР И ЕГО ПРИЛОЖЕНИЯ К КИНЕТИКЕ ПАРАМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПРОВОДЯЩИХ КРИСТАЛЛАХ

Ляпилин И.И.

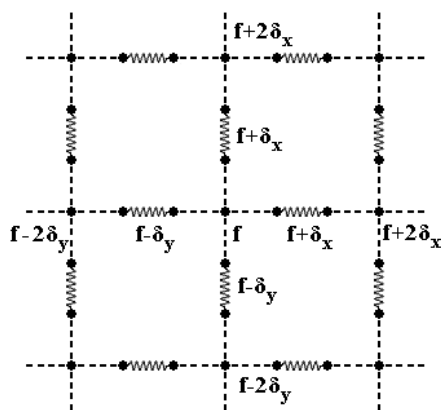
Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: lyapilin@imp.uran.ru

За последние годы предложен целый ряд новых методов, позволяющих решать различные задачи теории необратимых процессов. Большинство из этих методов основано на весьма сходных физических предпосылках, но конкретные математические формы их сильно отличаются друг от друга. Данная лекция посвящена изложению метода неравновесного статистического оператора с единой точки зрения современной теории неравновесных процессов. Излагаемый в лекции подход позволяет получить описание широкого круга неравновесных систем с помощью единого метода; показать как эквивалентность, так и взаимную связь целого ряда методов теории неравновесных процессов. Будут изложены простые и удобные формы теории возмущений для неравновесных статистических операторов и уравнений переноса. Рассмотрены различные практические применения данного метода.

О ФОРМИРОВАНИИ КОСВЕННОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧЕРЕЗ СПИНОВЫЕ ДИМЕРЫ В КВАЗИНИЗКОМЕРНЫХ МАГНЕТИКАХ

Вальков В.В.^{1,2}, Гуськов Д.А.¹¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38,²Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79.

E-mail: vvv@iph.krasn.ru



Экспериментальные исследования магнитных свойств квазидвумерных квантовых кристаллов привели к установлению комплекса необычных характеристик таких материалов в низкотемпературной области. В частности, было обнаружено значительное падение магнитной восприимчивости, что обычно связывается с переходом системы в квантовое магнитно неупорядоченное состояние. В этой связи представляется актуальным исследование природы немагнитной фазы низкоммерных квантовых магнетиков. В качестве одного из сценариев основного состояния без магнитного порядка может выступать сценарий синглетного упорядочения. Сама же причина индуцирования синглетной фазы в квантовых магнетиках

может быть различной. В ряде материалов разрушение магнитной фазы связано с наличием фрустрированных взаимодействий. В других кристаллах (например, в CaV_4O_9) синглетное состояние формируется за счет геометрического расположения обменных связей. В кристалле $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_6$ [1] структура расположения магнитных моментов такова, что отчетливо выделяются группы из двух и четырех спиновых моментов, а также изолированные спиновые моменты. Причем обменные связи внутри отмеченных групп заметно превышают интенсивность обменных связей между спиновыми моментами, принадлежащих различным группам.

Для упрощения теоретического рассмотрения магнитных свойств этого кристалла была введена упрощенная спин-димерная модель, показанная на рисунке. В этой модели учитываются только одиночные спины и блоки, состоящие из двух спинов. Предполагается, что такая система спиновых моментов описывается гамильтонианом Гейзенберга, причем антиферромагнитное взаимодействие внутри димера (параметр J) много больше параметра антиферромагнитного взаимодействия (I) между одиночными спинами и спинами из димера. В рамках операторной формы теории возмущений [2] при использовании параметра малости $I/J \ll 1$ получен эффективный гамильтониан и исследованы характеристики спектра элементарных возбуждений спин-димерной модели. В частности показано, что через виртуальный заброс димеров из синглетного состояния в магнитные триплетные состояния возникает косвенная обменная связь между одиночными изначально не взаимодействующими спинами. Это взаимодействие носит антиферромагнитный характер с интенсивностью $\sim I^2/J$. Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая макрофизика РФФИ (грант № 07-02-00226), а также Интеграционного проекта СО РАН.

1. Петраковский Г.А., Саблина К.А., Воротинов А.М. и др. Синтез и магнитные свойства монокристаллов $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_6$, ФТТ 41, 677-680 (1999)
2. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма, Наука М.(1965)

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПИРОКСЕНОВ - НОВОГО КЛАССА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАГНЕТИКОВ

Стрельцов С.В.¹, Хомский Д.И.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

E-mail: streltsov@optics.imp.uran.ru

²II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Zùlpicher Straße 77, D-50937 Köln, Germany

Пироксены с общей формулой $ATMX_2O_6$, где A – щелочной элемент, TM – трехвалентный ион переходного металла, а X – Si или Ge, широко известны в геологии и минералогии. Они являются одним из основных составляющих скалистых пород земной коры. Кроме того пироксены были обнаружены на Луне и в метеоритах. Для физики конденсированного состояния пироксены представляют интерес в первую очередь из-за необычных магнитных свойств.

В данной работе были выполнены зонные расчеты электронных и магнитных свойств пироксенов (с $TM = Ti, V, Cr, Mn, Fe$) в рамках метода LSDA+U. Было показано, что анизотропный характер орбитального упорядочения приводит к появлению спиновой-щели в спектре магнитных возбуждений в соединении $NaTiSi_2O_6$. Представлен детальный анализ различных вкладов во внутрицепочечное обменное взаимодействие, выполненный как аналитически, в рамках теории возмущений, так и численно на основе результатов зонных расчетов. Показано, что антиферромагнитный $t_{2g} - t_{2g}$ обмен постепенно уменьшается при переходе от Ti к Fe. В случае хромовых пироксенов он практически компенсируется ферромагнитным взаимодействием между наполовину заполненными t_{2g} и пустыми e_g орбиталями. Небольшие различия в кристаллической структуре определяют результирующий характер взаимодействия, и соединения $LiCrSi_2O_6$ и $NaCrSi_2O_6$ являются антиферромагнетиками с малой T_N , в то время как $NaCrGe_2O_6$ оказывается ферромагнетиком. Сочитание ферромагнетизма, присущего $NaCrGe_2O_6$, и изоляторного типа электронной структуры, характерного для всех пироксенов является редким явлением среди оксидов переходных металлов. Дальнейшее увеличение полного числа электронов в пироксенах на основе Mn и Fe приводит к заполнению e_g под-оболочки и к антиферромагнетизму $t_{2g} - e_g$ вклада и полного обменного взаимодействия в данных соединениях. Другой интересной особенностью является сильная поляризация кислородных состояний в железных пироксенах. Как правило подобными эффектами пренебрегают, но в железных пироксенах он приводит к уменьшению полного обмена \sim на $2/3$.

Последней и, возможно, наиболее важной особенностью пироксенов является тот факт, что они представляют новый класс мультиферроиков.

Данная работа была выполнена при поддержке Мин. Образования и науки РФ и CRDF в рамках проектов Y4-P-05-15 и МК-1184.2007.2. Кроме того автор (С.С.) выражает благодарность фонду Династия.

1. S. Jodlauk, P. Becker, J.A. Mydosh, D.I. Khomskii, T. Lorenz, S.V. Streltsov, D.C. Hezel, L. Bohaty J. Phys.: Condens. Matter, **19**, 432201 (2007)
2. S.V. Streltsov, D.I. Khomskii cond-mat/0710.5351

МАГНИТООПТИКА ОДНОМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Виноградов А.П.^{1,2}, Дорофеев А.В.^{1,2}, Мерзликин А.М.^{1,2}, Грановский А.Б.³, Лисянский А.А.⁴, Иноуэ М.⁵

¹Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412, Москва, Ижорская, 13/19

²Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный МО, Институтский пер., 9

³Московский государственный университет, Физический факультет, 119992, Москва, Ленинские горы

⁴Department of Physics, Queens College of the City University of New York, Flushing, NY 11367

⁵Department of Electrical and Electronic Engineering, Toyohashi University of Technology, 1-1 Hibari-Ga-Oka, Tempaku, Toyohashi 441-8580, Japan

Магнитооптический (МО) эффект Фарадея, который заключается в повороте плоскости поляризации электромагнитной волны, прошедшей через намагниченную среду [1], может быть усилен пространственно-неоднородными структурами. Примерами являются резонанс Фабри-Перо в однородной пластине, дефект-мода в фотонном кристалле [2] и таммовское поверхностное состояние на границе двух фотонных кристаллов [3]. Во всех этих случаях при нулевой намагниченности наблюдается резонансное прохождение света. В присутствии намагниченности пик прохождения расщепляется на два, соответствующих двум круговым поляризациям. Угол фарадеевского вращения θ определяется полуразностью набегов фаз циркулярно поляризованных волн: $\theta = 0.5(\varphi^+ - \varphi^-)$. Масштаб изменения этой величины задается не малыми МО свойствами, а сдвигом фазы колебаний по разные стороны резонанса т.е. этот масштаб равен π . Действительно, при расщеплении полюсов, малом по сравнению с их шириной, удается представить угол Фарадея как произведение, в котором один из множителей связан с МО свойствами, а остальные – со свойствами резонанса. В случае, когда расщепление сравнимо с шириной резонанса, используется представление прошедшей волны в виде суммы волн, испытавших многократное отражение в структуре (метод Эйри).

Обычно большая величина эффекта Фарадея соответствует малой интенсивности сигнала. Тем не менее, мы приводим пример системы, в которой теория предсказывает максимально возможный угол Фарадея 90° при полном прохождении.

1. А.К. Звездин, В.А. Котов, *Магнитооптика тонких пленок*, - М.:Наука (1988).
2. A. Figotin and V. Gorenstveig, Phys. Rev. B, **58**, 180 (1998)
3. A.P. Vinogradov *et al.*, Phys. Rev. B, **74**, 045128 (2006)

ВЗАИМОСВЯЗЬ ОПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА МАГНУСА, ОПТИЧЕСКОГО
ЭФФЕКТА ХОЛЛА И ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ.
СВЯЗЬ ФАЗЫ БЕРРИ С ОБРАТНЫМ ОПТИЧЕСКИМ ЭФФЕКТОМ
МАГНУСА.

Садыков Н.Р.

РФЯЦ-Всероссийский НИИ Технической физики, Челябинская обл, г.Снежинск, 456770, а/я
245
E-mail: sadykov@vniitf.ru

В последнее время наблюдается очередной ажиотаж вокруг оптического аналога эффекта Магнуса [1, 2]. Как снежный ком растет область применимости этого эффекта: световоды (простые и на фотонных кристаллах [3, 4]), диссипативные солитоны [5], движение ультрахолодных нейтронов [6], в материалах из ферромагнитных микропроводов [7] и т.д. Такое большое разнообразие проявления оптического эффекта Магнуса приводит к переоткрытию предсказанных за 15 лет эффектов, переименованию эффектов, появляются различные версии интерпретации этого эффекта [8]. Все это усложняет проведение в конкретных средах исследований на основе этого эффекта, применение полученных результатов.

В докладе будут обобщены результаты теоретических исследований докладчика по поляризационным эффектам и в частности по оптическому эффекту Магнуса. Будет показано, что оптический эффект Магнуса – это дополнительное кручение траектории пучка лучей при движении по искривленной траектории. Будет показано, что фаза Берри приводит к обратному оптическому эффекту Магнуса – дополнительному изгибу траектории при наличии кручения, что не соответствует результатам работы [8]. Будут рассмотрены три метода вывода уравнений траектории пучка лучей, позволяющих описать в частности оптический эффект Магнуса: вывод уравнения траектории пучка лучей с учетом поляризации из канонических уравнений Гамильтона [9], из принципа Ферма и укороченных векторных волновых уравнений [2]. Будет показано, что полученные в [2] уравнения применительно к оптическому эффекту Магнуса совпадают с результатами метода мод, а полученные в [8, 9] уравнения дают по сравнению с методом мод в два раза больший результат.

1. Б.Я. Зельдович и др., Квантовая электроника, **17**, 493 (1990).
2. Н.Р. Садыков, Квантовая электроника, **20**, 1137 (1993).
3. Н.Р. Садыков, Теоретическая и математическая физика, **149**, 65 (2006).
4. Masary Onoda, Phys. Rev. Letters, **93**, 083901-1 (2004).
5. Н.Н. Розанов и др., ЖЭТФ, **125**, 486 (2004).
6. Н.Р. Садыков, Теоретическая и математическая физика, **135**, 280 (2003).
7. А.В. Иванов и др., Письма в ЖЭТФ, **85**, 694 (2007).
8. К.Ю. Блиох и др., Письма в ЖЭТФ, **79**, 647 (2004).
9. V.S. Liberman *et al.*, Phys. Rev., **A 46**, 5199 (1992).

ВЫВОД СИСТЕМЫ МАТЕРИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ С УДЛИНЕННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИСадыков Н.Р.

Российский Федеральный Ядерный Центр-Всероссийский Научно-Исследовательский
Институт Технической физики, Челябинская обл., г.Снежинск, 456770, а/я 245
E-mail: sadykov@rambler.ru

Интенсивные исследования, связанные с наличием пылевых частиц в нейтральной газовой среде, являются перспективными в связи с различными технологическими приложениями: процессы горения, плазменные технологии, физика атмосферы, управляемый термоядерный синтез. В случае плазменных технологий большой интерес вызывает кристаллизация пылевых частиц в газоразрядной плазме – образование упорядоченных структур. Вызывает определенный интерес процессы, связанные с процессом взаимодействия излучения с наночастицами и наноструктурами [1, 2].

В докладе для удлинённых наночастиц слабой концентрации получена система материальных (лазерных) уравнений, на основе которых для СВЧ-излучения в диапазоне длины волны $\lambda \sim 1 \div 10$ см предлагается способ усиления в активной среде, где накачка среды производится с помощью воздействия стационарного (квазистационарного) электрического поля на распыленные в воздухе удлинённые электропроводящие наночастицы. В работе оценены объемная концентрация наночастиц в воздухе (доля занимаемого наночастицами объема в воздухе $c_0 \approx 10^{-3} \div 10^{-2}$), необходимое значение стационарного электрического поля для накачки среды (плотность энергии ~ 10 Дж / м³) и коэффициент усиления бегущей волны ($\Gamma \sim 10^{-3}$ м⁻¹).

Рассматривается на основе полученных уравнений возможность создания резонатора для СВЧ-излучения. В воздухе в случае приведенных выше данных характерное время усиления излучения составит $T \sim 10^{-8} \div 10^{-7}$ сек.

1. В.А. Зацепин и др, Оптика атмосферы и океана, **17**, 168 (2004).
2. В.А. Зацепин и др, Оптика атмосферы и океана, **20**, (2007) (принята в печать).

О ВОЗМОЖНОСТИ ОБНАРУЖЕНИЯ ЭФФЕКТОВ КИРАЛЬНОСТИ МАГНИТООПТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Дружинин А.В., Варенков В.И., Кузьмин Ю.И.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: druzhinin@imp.uran.ru

Бурное развитие технологии синтеза микронеоднородных метаматериалов, обладающих сложными магнитными состояниями, требует новых методик для их физической аттестации. Естественная оптическая активность [1], обусловленная киральной структурой среды, и магнитная гиротропия (эффекты Фарадея, Керра и др.) могут быть разделены на опыте в силу их различной четности относительно инверсии хода светового луча. Такое разделение эффектов относительно просто реализовать на массивных объектах в области их прозрачности. В случае поглощающих планарных образцов необходимо работать в отражательной схеме измерений малых эффектов гиротропии.

В настоящей работе представлена методика (рис. 1), позволяющая измерять нечетный магнитооптический эффект в отраженном свете при трех режимах пространственного изменения намагниченности образца. Первый режим – классический: неподвижный образец перемагничивается в экваториальном направлении на частоте 25 Гц. Второй режим – образец намагниченный до насыщения постоянным полем вращается с той же частотой. Третий режим – образец вращается и синхронно перемагничивается. Последний режим нужен для нахождения паразитного сигнала из-за возможной неидеальности отражающей поверхности.

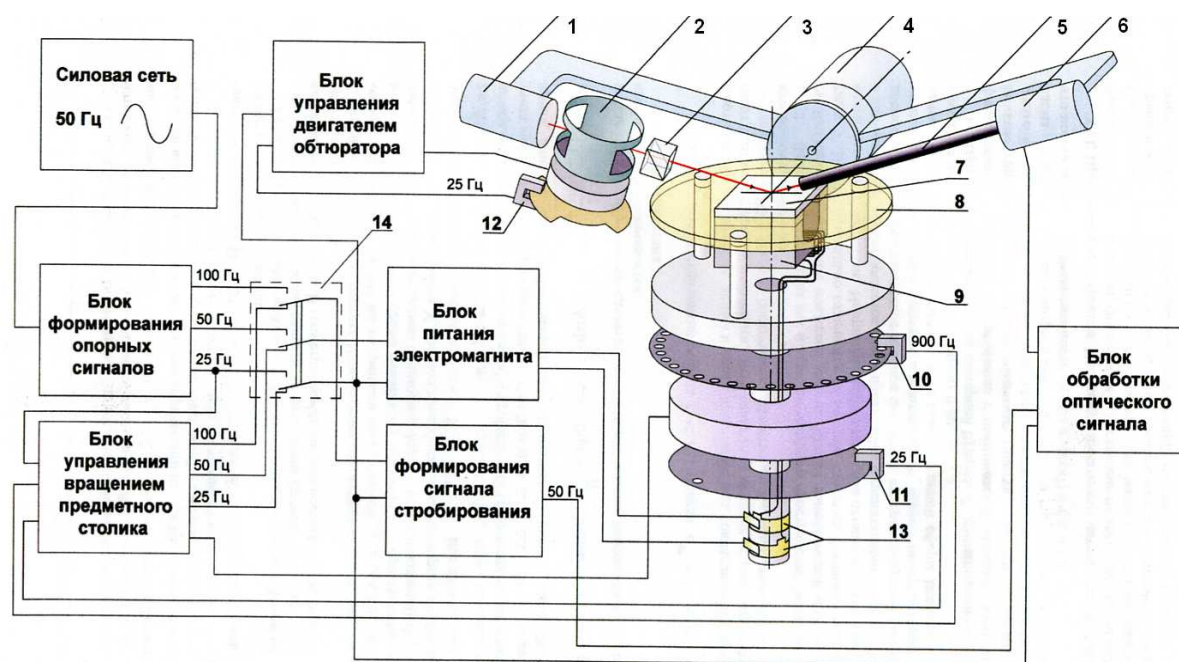


Рис. 1: 1 – лазер, 2 – обтюратор, 3 – поляризационная призма, 4 – гониометр, 5 – световод, 6 – фотоприемник, 7 – образец, 8 – предметный столик, 9 – электромагнит, 10 – , 11 – , 12 – оптопары, 13 – скользящие контакты, 14 – переключатель режимов измерений

Методика может быть использована также для исследования гиротропных свойств постоянных магнитов.

РЕЗОНАНСНОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РЕЛЬЕФ СПИНОВОГО ДИМЕРА

Вальков В.В.^{1,2}, Аксенов С.В.²

¹)Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38,

²)Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79.

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Проблема спин-зависящего транспорта в наноструктурах является одной из основных в магнитоэлектронике [1]. Практический интерес соответствующих исследований связан с возможностью активного воздействия внешним магнитным полем на прохождение электронов через потенциальные рельефы [2]. В этом отношении перспективными могут оказаться структуры, в которых спин-зависящий потенциальный рельеф, соответствующий основному состоянию, может меняться при прохождении частиц через потенциальную структуру.

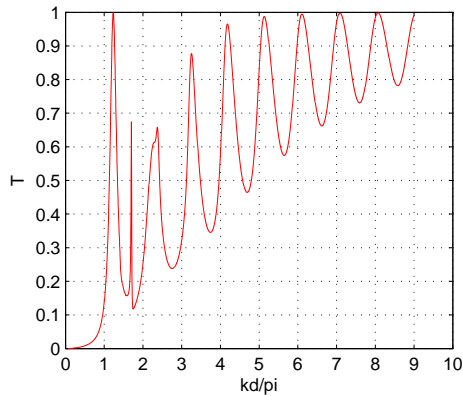


Рис. 1: Коэффициент прохождения без магнитного поля.

В данной работе была рассмотрена задача о прохождении электрона через систему, состоящую из двух спинов, образующих димер. Предполагается, что между спиновыми моментами, принадлежащими димеру, существует обменное взаимодействие антиферромагнитного типа. Поэтому, в основном состоянии спиновый димер находится в синглетном состоянии. Между спиновым моментом проходящей частицы и спинами димера реализуется хорошо известное $s - f$ -обменное взаимодействие. Именно это взаимодействие и формирует спин-зависящий потенциальный рельеф для проходящей частицы. Тогда гамильтониан, описывающий прохождение и отражение квантовой частицы через отмеченную структуру может быть представлен в виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - Aa \left\{ (\vec{s}, \vec{S}_1)\delta(x+a) + (\vec{s}, \vec{S}_2)\delta(x-a) \right\} + I(\vec{S}_1, \vec{S}_2) - g\mu_B \left((\vec{S}_1 + \vec{S}_2), \vec{H} \right) - g_e\mu_B(\vec{s}, \vec{H}), \quad (1)$$

где A - константа $s - f$ - обменного взаимодействия; I - постоянная спин-спинового обмена внутри димера; $\vec{s}, \vec{S}_1, \vec{S}_2$ - операторы спинов квантовой частицы и двух барьеров соответственно; g - фактор Ланде димера; $g_e \approx 2$ - фактор Ланде электрона; μ_B - магнетон Бора; a - половина расстояния между барьерами. В основном состоянии димер находится в синглетном состоянии. При подлете электрона к первому спину димера включается $s - f$ -обменное взаимодействие. В результате, из-за наличия недиагонального по спиновому индексу взаимодействия, состояние димера будет представлять суперпозицию синглета и триплета. Это означает, что после взаимодействия димер содержит примесь возбужденного состояния. Соответственно этому потенциальный профиль также будет изменен. Решение уравнения Шредингера с последующим применением компьютерных вычислений позволило проанализировать зависимость коэффициента прохождения электрона T через димер от параметров димера и характеристик налетающей частицы. Типичная зависимость для коэффициента прохождения показана на рисунке.

1. Ведяев А.В., УФН **172**, 1458 (2002)
2. Moodera J.S., Mathon G.J., J. Magn. Magn. Mater. **200**, 248 (1999)

ВЛИЯНИЕ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ ИОНОВ НА УПРУГИЕ, МАГНИТНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ ЛАНТАН-СТРОНЦИЕВЫХ МАНГАНИТОВ

Богданова Х.Г.¹, Булатов А.Р.², Голенищев-Кутузов В.А.², Потапов А.А.²

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского КазНЦ РАН 420029, Казань, Россия

²Казанский государственный энергетический университет 420066, Казань, Россия

Манганиты интенсивно исследуются уже более двадцати лет. В зависимости от температуры и состава они проявляют богатую фазовую диаграмму с различными типами взаимосвязанных зарядовых, орбитальных и спиновых упорядочений, что позволяет считать их модельными сильно коррелированными системами. Однако наиболее интересные из обнаруженных эффектов, такие как колоссальное магнитосопротивление (КМС) и наноразмерные неоднородности, пока не получили полного объяснения. В исследованиях последних лет наибольшее внимание уделяется роли ян-теллеровских (ЯТ) ионов и вызываемых ими искажений в большинстве обнаруженных эффектов, но их роль также не совсем определена. В обзорном докладе обсуждается вопрос о влиянии ЯТ ионов на транспортные, упругие и магнитные свойства слаболегированных лантан стронциевых манганитов и природе КМС. Приводятся результаты комплексного изучения особенностей распространения высокочастотных акустических волн (500–700 МГц), электросопротивления и намагниченности в зависимости от температуры и приложенных магнитных полей. На основе полученных данных проанализировано влияние локальных искажений кислородных октаэдров и кооперативных искажений кристаллической решетки на структурные и магнитные упорядоченности и фазовые переходы между ними. Особое внимание обращено на процессы конкурентного взаимодействия локальных и кооперативных ЯТ искажений с магнитными полями. Путем сравнительного анализа данных, полученных ранее [1–3] с помощью рентгеновской и нейтронной дифракции и высокочастотной акустической спектроскопии [4, 5] установлены определенные закономерности и сделан ряд замечаний о роли как локальных, так и кооперативных ЯТ искажений на возникновение КМС и структурных неоднородностей в слаболегированных манганитах.

1. E.S. Bosin *et al.*, Phys. Rev. Lett, **98**, 137203 (2007).
2. J. Geck *et al.*, Phys. Rev. Lett, **95**, 236401 (2005).
3. A.O. Sboychakov *et al.*, Phys. Rev. B, **74**, 014401 (2006).
4. Х.Г. Богданова и др., ФТТ, **49**, 496 (2007).
5. Х.Г. Богданова и др., Письма в ЖЭТФ, **80**, 354 (2004).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВКЛАДА ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ В ШИРИНУ ЛИНИИ ЭПР МАНГАНИТОВ $La_{1-x}Ca_xMnO_3$.

Яцык И.В.¹, Еремина Р.М.¹, Муковский Я.М.²

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, 420029, Казань, Сибирский тракт 10/7.

²Московский государственный институт стали и сплавов, 119049, Москва, Ленинский проспект 4
E-mail: I.Yatzyk@gmail.com

Эффект колоссального магнитосопротивления наблюдается в окрестности точки Кюри для кристаллов $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ ($0.22 < x < 0.5$). В данных соединениях при малых индексах допирования наблюдается богатая фазовая диаграмма [1]. В соответствии с фазовой диаграммой, $x \approx 0.2$ представляет собой критическую область допирования, которая разделяет ферромагнитный изолятор и область зарядового упорядочения от ферромагнитного металлического состояния. На фазовой диаграмме при $x < 0.2$ представлена линия в парамагнитной области при переходе через которую происходит структурный переход из орторомбической O фазы в псевдокубическую O' . Так как кристаллическое поле дает вклад в ширину линии ЭПР, то структурные изменения должны непосредственно отразиться на поведении ширины линии ЭПР, что продемонстрировано в нашей работе.

Измерения спектров ЭПР в монокристаллах $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ ($x=0.18; 0.2; 0.22; 0.25; 0.3$) проводились на спектрометрах Bruker и Varian в X- диапазоне в широком температурном интервале от 210 К до 600 К. В парамагнитной области в спектре ЭПР наблюдалась одна Лоренцева линия. При повышении температуры ширина линии ЭПР растет для всех изучаемых в данной работе образцов. В ходе температурной зависимости ширины линии ЭПР монокристаллов $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ с $x=0.18$ и 0.2 при температурах $T \approx 260$ К и $T \approx 240$ К ширина линии ЭПР уменьшается примерно на 50 Э, а при дальнейшем повышении температуры продолжает монотонно возрастать. На фазовой диаграмме работы [1] эти температуры совпадают с положениями фазового перехода из орторомбической фазы O в псевдокубическую фазу O' . Следовательно, уменьшение ширины линии ЭПР при данной температуре связано с тем, что параметр кристаллического поля D в фазе O' равен нулю, и вклада в ширину линии ЭПР не дает. Мы полагаем, что величина, на которую уменьшилась ширина линии ЭПР ~ 50 Э, равна вкладу одноионной анизотропии.

Ширина лоренцевой линии ЭПР определяется комбинацией M_2 – второго и M_4 – четвертого моментов: $\Delta H = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{M_2^3}{M_4} \right)^{1/2}$.

Гамильтониан взаимодействий имеет вид: $H = H_{ex} + H_{cr}$,

где $H_{ex} = \sum_{i=1}^6 J_{ij} S_i S_j$ - гамильтониан гейзенберговского обменного взаимодействия,

а $H_{cr} = DS_z'^2 + E(S_x'^2 - S_y'^2)$ - гамильтониан кристаллического поля в локальной системе координат для каждого магнитно-неэквивалентного положения иона марганца. Теоретически рассчитан второй и четвертый моменты линии ЭПР, учитывая взаимодействие спина иона марганца только с шестью ближайшими соседями. Используя полученные выражения, определили величину D .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №06-02-17401.

1. G. Biotteau, M. Hennion, F. Moussa, J. Rodriguez-Carvajal, L. Pinsard, A. Revcolevsch, Y.M. Mukovskii, and D. Shulyatev, Phys.Rev.B **64**, 104421 (2001).

ПАРАМАГНИТНЫЕ ЦЕНТРЫ В CuTe_2O_5

Гаврилова Т.П., Еремина Р.М.

Казанский физико-технический институт им Е. К. Завойского, 420029, Казань, Сибирский тракт 10/7

E-mail: tatyana.gavrilova@gmail.com; REremina@yandex.ru

В работе [1] показано, что в CuTe_2O_5 при понижении температуры также как и в CuGeO_3 магнитная восприимчивость уменьшается вдоль трех кристаллографических направлений. Анализ структурных данных позволил предположить, что в CuTe_2O_5 происходит димеризация спинов меди. То есть, так же как в CuGeO_3 образуются димеры с синглетным основным состоянием. Ранее в работах [2, 3] установлено, что при температурах от 25 К до 300 К спектр ЭПР ионов меди в CuTe_2O_5 состоит из одной линии лоренцевой формы с $g \sim 2$. В районе 25 К линия расщепляется на несколько компонент. Угловая зависимость положений линий в спектре ЭПР в Q-диапазоне в плоскости (bc) приведена на рис.1.

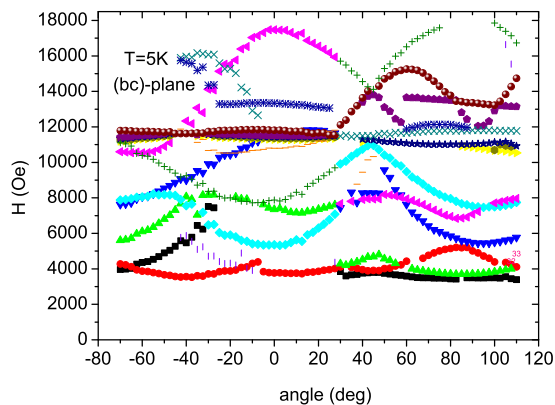


Рис. 1: Угловая зависимость положений линий в спектре ЭПР CuTe_2O_5 при температуре 5К в Q-диапазоне в плоскости (bc).

Мы связываем появление этих сигналов в спектре ЭПР с образованием парамагнитных центров со спином $S=1$ в кристалле CuTe_2O_5 . Основываясь на предположении, что пары ионов меди образуют димеры со спином $S=1$, Гамильтониан взаимодействия записывается в виде:

$$H = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2) + \sum_{\alpha=a^*,b,c} g\mu_B H_\alpha S_\alpha,$$

где первые два слагаемые представлены в локальных осях пары, а третье слагаемое отвечает за взаимодействие с магнитным полем.

Сопоставление экспериментальных и теоретических данных позволило определить параметры спинового гамильтониана.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17401.

1. P. Lemmens *et al.*, Physics Reports **375** (2003)
2. J. Deisenhofer *et al.*, Phys. Rev. B. **74**, 174421 (2006)
3. Р.М. Еремина *et al.*, ФТТ **50**, 273 (2008)

ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ С КОНТРАСТОМ НА ЗАТУХАНИИ

Ерохин С.Г.^{1,2}, Лисянский А.А.², Дейч Л.И.², Мерзликин А.М.³, Виноградов А.П.³,
Грановский А.Б.¹

¹)Физический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²)Queens College, CUNY, New York, USA

³)Институт теоретической и прикладной электродинамики, ОИВТ, РАН, Москва, Россия

Модельная задача движения электронов в периодическом потенциале была решена в работе Р. Кронига и У.Дж. Пенни в 1931 г., в которой было объяснено появление запрещенных зон в кристалле. Заметим, что в квантовой механике модель Кронига-Пенни является чисто иллюстративной задачей, а в оптике ее аналогом являются одномерные фотонные кристаллы. Обычно фотонные кристаллы стараются изготавливать из диэлектрических материалов с малыми потерями. Наименее чувствительны к потерям одномерные кристаллы. Такие кристаллы состоят из слоёв, толщины которых сравнимы с длиной волны падающего света, причём контраст (отношение диэлектрических проницаемостей слоёв) состоит в отличии действительных компонент диэлектрических проницаемостей слоев.

В данной работе впервые производится теоретическое рассмотрение одномерных фотонных кристаллов, в которых контраст импеданса слоев достигается за счет отличия мнимых частей диэлектрических проницаемостей слоёв (действительные компоненты диэлектрических проницаемостей берутся равными). Рассмотренная модель принципиально отличается от модели Кронига-Пенни в теории твердого тела, в которой мы всегда имеем дело с эрмитовыми операторами.

В работе сравнивается два типа структур: фотонный кристалл с контрастом на затухании и гомогенизированный слой. В результате в видимой области спектра коэффициенты прохождения периодической и гомогенизированной структур совпадают с точностью не менее 0.1% за исключением промежутка длин волн около 420 нм, где наблюдается сильное отличие: разница составляет около 3%.

Это может говорить только о том, что в случае фотонных кристаллов на затухании мы сталкиваемся с конструктивной интерференцией совсем другого типа, отличной от брэгговских систем, используемых для получения запрещённых зон в определенном диапазоне длин волн. Найденные сильные расхождения в зависимости коэффициентов прохождения для периодических и гомогенизированных структур от длины волны падающего света и признаков наличия конструктивной интерференции в представленных периодических структурах позволяют судить о следующем:

- фотонные кристаллы могут быть построены только на контрасте мнимых компонент диэлектрической проницаемости
- на прохождение света в структуре оказывает влияние расположение поглощающих центров
- фотонные кристаллы на затухании выявляют тип конструктивной интерференции, отличный от типа интерференции в брэгговских системах.

СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ИОНА Co^{3+} В КРИСТАЛЛЕ $LaCoO_3$

Ефремов А.В., Ларин А.В., Никифоров А.Е., Попов С.Э., Агзамова П.А.

Уральский государственный университет, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина 51

E-mail: basis@hotmail.ru

В кобальтатах основным состоянием Co^{3+} является орбитально невырожденное низкоспиновое состояние 1A_1 (LS, S=0), вблизи которого находится либо высокоспиновое состояние 5T_2 (HS, S=2), либо промежуточное спиновое состояние 3T_1 (IS, S=1). Традиционная модель кристаллического поля поддерживает первый вариант [1], и результаты электронного спинового резонанса хорошо объясняются в этом предположении [2]. Однако, расчет электронной структуры в LDA+U приближении дает в качестве первого возбужденного состояния IS состояние [3]. При термическом заполнении IS состояния $^3T_1(t_2^5e^1)$ сильным является электронно-колебательное взаимодействие с e-электроном, возникает орбитальное упорядочение. Прямое наблюдение орбитального порядка в $LaCoO_3$ сообщено в работе [4]. Возникновение орбитального порядка при T=100 К и спиновый переход подтверждаются ИК и рамановской спектроскопией, нейтронным рассеянием и ультразвуковыми исследованиями. Для расчета электронного спектра кластера $[CoO_6]^{9-}$ в кристалле использовалась модель, предложенная Цунгером [5], которая учитывает редукцию кулоновских и обменных взаимодействий электронов незаполненных оболочек, обусловленную эффектами гибридизации d-функций магнитного иона и s, p-функций лигандов.

Для расчета более тонких эффектов: спин-орбитального взаимодействия, низкосимметричного тригонального кристаллического поля, Яна-Теллера, использовалась модель, предложенная Цукерблатом [6].

Известно, что электронные состояния, относящиеся к 3d металлу, в оксидах являются сильно локализованными, следовательно, приближение внедренного кластера, позволяющее асимптотически точно учесть эффекты межэлектронной корреляции при использовании метода МО ЛКАО и конфигурационного взаимодействия (КИ), лучше подходит для описания электронной структуры иона Co^{3+} . Для описания кластера методом МО ЛКАО использовался комплекс квантовохимических программ US GAMESS [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке CRDF (REC-005), РФФИ 04-02-16204, 04-02-96078, и Министерства образования UR.01.01.435.

1. Tanabe Y., Sugano S. J. Phys. Soc. Jap., v. **9**, 766, 1954
2. Noguchi et. al. Phys. Rev. B., v. **66**, 094404 (2002); Phys. Rev. B., v. **67**, 172401, 2003
3. Korotin M.A. et. al. Phys. Rev. B, v. **54**, 5309, 1996
4. Maris G. et. al. Phys. Rev. B. v. **67**, 224423, 2003
5. A. Fazzio, M. J. Caldas, Alex Zunger, Physical Review, **30**, 3430, 1984
6. Kim R. Dunbar, Eric J. Schelter, Boris S. Tsukerblat, Andrey V. Palii, Segei M. Ostrovsky, Vadim Yu. Mirovitskii and Sophia I. Klokishner, Quanyum Chemistry, v. **44**, pp. 413-428, 2003
7. M.W. Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.J. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery // J. Comput. Chem. **14**, 1347, 1993

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $RTiO_3$ и RVO_3

Можегоров А.А., Ларин А.В., Никифоров А.Е., Гончарь Л.Э.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького,
620083, Екатеринбург, просп. Ленина, 51
E-mail: alexey.mozhegorov@usu.ru

В последнее время наблюдается возрастание интереса исследователей к $3d-t_{2g}$ -системам. Благодаря сильной связи решёточных, орбитальных и магнитных степеней свободы в них, главные представители t_{2g} -систем — редкоземельные перовскиты титана и ванадия — обладают сложными магнитными и орбитальными фазовыми диаграммами [1], что делает их изучение особенно актуальным.

В данной работе предпринимается попытка описания в рамках современного микроскопического подхода статических и динамических магнитных свойств ряда редкоземельных титанатов и ванадатов. Особое внимание уделено антиферромагнитному резонансу — мощному методу исследования орбитальной и магнитной структур кристалла. Магнитные свойства $RTiO_3$ и RVO_3 (R — редкоземельный элемент или Y) определяются подсистемами $3d$ -ионов Ti^{3+} и V^{3+} соответственно. Для описания этих свойств нами развивается следующая схема исследования:

- строится вибранный гамильтониан (H_{vib}), в котором явно учтено взаимодействие электронов $3d$ -иона со сдвигами первых и вторых соседей этого иона;
- в кластерном расчёте с помощью программного пакета GAMESS(US) [2] определяются параметры H_{vib} ;
- низкоэнергетическая часть спектра Ti^{3+} (V^{3+}), полученная из решения H_{vib} , используется для определения параметров сверхобмена;
- параметры сверхобмена определяются в рамках модели Хаббарда [3, 4]. Используемые при этом параметры модели Хаббарда (t_{mn} , U , J_H) рассчитываются на основе теории функционала плотности;
- в приближении парных взаимодействий ближайших соседей строится эффективный спин-гамильтониан (ЭФГ) [5], основное состояние которого есть магнитная структура исследуемого соединения;
- в рамках линейной теории рассматриваются спектры спиновых волн и, в частности, полевые спектры антиферромагнитного резонанса (АФМР).

При исследовании кристаллов $RTiO_3$ и RVO_3 выяснилось, что спектры спиновых волн являются мало чувствительными к орбитальным флуктуациям, возможным в рассматриваемых соединениях. По сравнению с СВ-спектрами, полевые спектры АФМР оказались качественно разными в предельных случаях орбитальной жидкости, с одной стороны, и статического орбитального порядка без флуктуаций — с другой.

Работа поддержана фондом "Династия грантами CRDF REC-005 и Российской федеральной научной программой "Развитие научного потенциала высшей школы".

1. Mochizuki M., Imada M., New J. of Physics, **6**, 154 (2004)
2. Schmidt M.W. et al., J. Comput. Chem., **14**, 1347 (1993)
3. Anderson P.W., Phys. Rev., **115**, 2 (1959)
4. Moriya T., Phys. Rev., **120**, 91 (1960)
5. Митрофанов В.Я., Никифоров А.Е., Черепанов В.И., Спектроскопия обменно-связанных комплексов в ионных кристаллах, Наука (1985)

МАГНИТНЫЕ СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ИЗОТОПЕ ^{17}O В МАНГАНИТАХ

Агзамова П.А., Никифоров А.Е.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр.
Ленина, 51
E-mail: polina.agzamova@usu.ru

В настоящее время в физике манганитов как широко обсуждается вопрос, какая картина зарядового упорядочения реализуется в системах $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ при некоторой концентрации x .

Одним из локальных экспериментальных методов исследования зарядово-упорядоченных состояний в манганитах является ядерный магнитный резонанс (ЯМР), наблюдаемый на изотопе ^{17}O . Данный метод является чувствительным к локальному магнитному окружению атома кислорода. Известно, что при электронном допировании системы AMnO_3 , где ион марганца является четырехвалентным, появляются свободные носители заряда (электроны), что приводит к появлению в промежуточной системе

$\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ (например, при $x=0.5$) наряду с ионами Mn^{4+} ионов Mn^{3+} , а при полном замещении щелочноземельного элемента ионами редкоземельного допанта в системе RMnO_3 остаются только ионы трехвалентного марганца. При этом вклад в сверхтонкое поле на ядре кислорода от трех- и четырехвалентных ионов Mn будет различным, что чувствует ЯМР на ядре атома кислорода [1]. Таким образом, чтобы прояснить картину зарядового упорядочения в манганитах методом ЯМР на ядрах ^{17}O , целесообразно отдельно исследовать вклады в сверхтонкое поле от ионов Mn^{4+} и Mn^{3+} .

В данной работе исследованы механизмы образования магнитных сверхтонких взаимодействий на ядре кислорода в системах CaMnO_3 (где только ионы Mn^{4+}), PrMnO_3 (где только ионы Mn^{3+}) и $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ (где присутствуют как ионы Mn^{4+} , так и Mn^{3+}).

В ходе исследования нами предложена следующая теоретическая модель:

1. Рассматривается связь Mn-O-Mn, т.е. учитывается вклад в магнитное сверхтонкое поле на ядре кислорода от двух ближайших ионов марганца.
2. Магнитное сверхтонкое взаимодействие на ^{17}O обусловлено взаимодействием s-оболочек кислорода с 3d-оболочкой марганца через перенесенную спиновую плотность (изотропное взаимодействие) и поляризацией p-оболочек кислорода при взаимодействии с 3d-оболочкой марганца (анизотропное взаимодействие). Вклады от поляризации p_σ - и p_π -оболочек кислорода различны.
3. Учитывается реальная кристаллическая структура соединений, которая дает искажение связи Mn-O-Mn.
4. Учитывается магнитная структура для системы $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($x=0, 0.5, 1$).

Предложенная модель позволяет качественно объяснить механизмы формирования магнитных сверхтонких взаимодействий на ядре атома кислорода и оценить вклад в магнитное сверхтонкое поле на изотопе ^{17}O от ионов марганца различной валентности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Некоммерческих Программ "Династия".

1. A. Trokiner, et al., PRB, **74**, 092403 (2006)

ОСОБЕННОСТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В CaMnO_3 ПО ДАННЫМ ЯМР ^{17}O

Михалев К.Н.¹, Бузлуков А.Л.¹, Литвинов И.Е.¹, Нигаматьянова З.Н.¹, Верховский С.В.¹, Якубовский А.Ю.², Кауль А.Р.³, Кумагаи К.⁴, Фурукава Ю.⁴, Трокинер А.⁵.

¹Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

²Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182, Москва,

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва, Ленинские горы

⁴Университет Хоккайдо, 060-0810, Саппоро, Япония

⁵Высшая школа промышленной физики и химии, 75231, Париж, Франция

Манганиты интенсивно изучаются в последние двадцать лет, так как являются сильно-коррелированными системами с аномально-тесной взаимосвязью между спиновыми, зарядовыми и решеточными степенями свободы [1]. Следствием такой взаимосвязи являются необычные физические свойства, которые демонстрируют эти оксиды, в частности, эффект колоссального магнитосопротивления (КМС).

Все большую значимость представляют исследования, которые проясняют с микроскопической точки зрения сам процесс локализации дырок в этих оксидах вблизи фазовых переходов. В этом контексте особую роль играют ионы кислорода, так как в наиболее популярной модели двойного обмена [2], качественно объясняющей эффект КМС, движение дырки между ионами марганца осуществляется через мостиковый кислород, где она может локализоваться при определенных условиях.

В данной работе измерены спектры ЯМР ^{17}O и ^{55}Mn , времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации а также температурная зависимость магнитной восприимчивости в поликристаллическом образце CaMnO_3 , обогащенном (до 20%) изотопом ^{17}O . Определены сверхтонкие поля на ядрах ^{55}Mn , в упорядоченном состоянии. По данным ЯМР ^{17}O построена температурная зависимость подрешеточной намагниченности в упорядоченном состоянии, определены точка Нееля (122(1) К), критический индекс (0,32(6)). Показано, что исследуемый манганит является 3D – Гейзенберговским антиферромагнетиком. Обсуждается поведение спин-спиновой и спин-решеточной релаксации ^{17}O как в парамагнитной области, так и в упорядоченном состоянии.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 06-02-17386, № 06-02-91171), программой Президиума РАН.

1. Y. Tokura, Rep. Progr. Phys. **69**, 797 (2006).
2. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, УФН **171**, 121 (2001).

ГИГАНТСКИЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ИЗОТОП-ЭФФЕКТ В
($\text{La}_{0.25}\text{Pr}_{0.75}$) $_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ПО ДАННЫМ ЯМР ^{139}La

Михалев К.Н.¹, Литвинов И.Е.¹, Нигаматьянова З.Н.¹, Якубовский А.Ю.², Кауль А.Р.³,

¹Институт физики металлов УрО РАН, 620041, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

²Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182, Москва,

³Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва, Ленинские горы

Ярким свидетельством возможного влияния динамики решетки на проводимость манганитов является изотоп-эффект, когда при замещении $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$ в ряде манганитов в определенной области температур инициируется переход металл-изолятор. Наибольший изотоп-эффект наблюдался в манганите $(\text{La}_{0.25}\text{Pr}_{0.75})_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ [1].

В этой работе представлены результаты анализа спектров ЯМР ^{139}La и измерений скорости спин-спиновой релаксации в области температур 80 - 350 К и в магнитных полях 5, 9.4 Тл для образцов манганита $(\text{La}_{0.25}\text{Pr}_{0.75})_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{Mn}^{18}\text{O}_3$, обогащенных разными изотопами кислорода: ^{16}O (ЛРСМО¹⁶) и ^{18}O (ЛРСМО¹⁸).

Спектры ^{139}La в ЛРСМО¹⁸ демонстрируют почти такую же форму линии ЯМР, как и спектры, полученные для ЛРСМО¹⁶. Поведение сдвига линии в зависимости от температуры также совпадает в поле 5 Тл для обоих образцов. Однако сигнал ЯМР исчезает в ЛРСМО¹⁸ во внешнем магнитном поле 5 Тл в области температур ниже 180 К, где было обнаружено состояние зарядового упорядочения. Для выяснения природы этого явления были измерены времена спин-спиновой релаксации ^{139}La . Оказалось, что для образца с более тяжелым изотопом кислорода скорость спин-спиновой релаксации резко возрастает в области зарядового упорядочения в поле 5 Тл, а для ЛРСМО¹⁶ наоборот, уменьшается. При увеличении внешнего магнитного поля до 9.4 Тл, разница в поведении скорости релаксации также наблюдается, однако величина эффекта уменьшается. В этом магнитном поле поведение сдвигов линий в области зарядового упорядочения также отличается для ЛРСМО¹⁶ и ЛРСМО¹⁸.

Показано, что аномалия в поведении скорости релаксации для образца с более тяжелым изотопом кислорода связана со значительным ростом анизотропии флуктуирующих магнитных полей в области зарядового порядка.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 06-02-17386, № 06-02-91171), программой Президиума РАН.

1. N. A. Babushkina, L. M. Belova, et al., Nature, **391**, 159 (1998).

НЕОБЫЧНОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОНТАКТОВ ДЖОЗЕФСОНА С
ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПРОСЛОЙКОЙ, НЕОДНОРОДНЫХ В ПЛОСКОСТИ

Куприянов М.Ю., Пугач Н.Г., Ведяев А.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва, Ленинские горы

За последние годы значительно выросло число публикаций, посвященных исследованию контактов Джозефсона с ферромагнитной прослойкой (F), которые могут находиться в “0” или “ π ” основном состоянии. Новым предметом активного изучения стали контакты, неоднородные в плоскости, у которых, при определенных условиях, одна часть контакта может находиться в “0”, а другая в “ π ” фазе.

Наша работа посвящена изучению контакта, состоящего из сверхпроводящих берегов (S), разделенных ферромагнитной прослойкой (F), покрытой тонким слоем диэлектрика (I). При этом прозрачность F/S границы считается неоднородной, предполагается, что она изменяется скачком вдоль контакта. К ферромагнетику может быть добавлен слой немагнитного металла (N), тогда неоднородной считается N/S граница. Расчет проводился в рамках линеализованного уравнения Узаделя. Показано, что неоднородность границы приводит к неоднородному распределению плотности критического тока вдоль контакта. Причем характерный размер этой неоднородности порядка ξ_N для SIFNS структуры, значительно превышает масштаб неоднородности в SIFS контакте, который определяется величиной ξ_F . (ξ_N , ξ_F – длина когерентности в немагнитном или магнитном металле, соответственно). Это результат корреляции в плоскости контакта, наведенной в ферромагнетике благодаря соседству с нормальным металлом. Такая неоднородность приводит к тому, что при определенной толщине ферромагнетика, зависимость максимального Джозефсоновского тока через контакт от внешнего магнитного поля имеет не Фраунгоферову форму, характерную для однородного контакта Джозефсона. При этом для SIFNS структуры во Фраунгоферовой зависимости синус заменяется косинусом, что обычно характерно для возникновения микровихря сверхтока, связанного с неоднородностью. А при отсутствии нормального слоя и равном нулю критическом токе вдали от неоднородности вблизи нее может возникать точечный контакт, у которого критический ток возрастает с увеличением внешнего магнитного поля. Этот эффект может быть использован для создания чувствительных магнитных датчиков, которые могут регистрировать не только вариацию магнитного поля, но и его абсолютное значение.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ МАГНИТНЫХ И
МАГНИТООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОМУЛЬТИСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ
[(Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)₃₅(Al₂O₃)₆₅(X)/α-Si:H(Y)]₃₀ ОТ ТОЛЩИНЫ
ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СЛОЯ.

Ганьшина Е.А.¹, Перов Н.С.¹, Пхонгхирун С.¹, Мигунов В.Е.¹, Калинин Ю.Е.², Ситников А.В.²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Россия. 119992, Москва, Воробьевы Горы

²Воронежский государственный технический университет. Россия. 394026, Воронеж, Московский проспект, 14
E-mail: eagan@mail.ru

В настоящей работе представлены результаты исследования магнитных и магнитооптических свойств в сложных наномультислойных (МС) системах [(Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀)₃₅(Al₂O₃)₆₅(X)/α-Si:H(Y)]₃₀ с аморфной структурой, полученных ионно лучевым распылением. Толщина полупроводникового слоя (Y) непрерывно изменялась от 0.45 до 5.5 нм, а магнитного слоя (X) от 1.08 до 1.88 нм. Магнитные слои представляли собой наноккомпозит до порога перколяции, в котором магнитные наногранулы сплава Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀ были хаотически распределены в диэлектрической матрице Al₂O₃. Использование в качестве магнитного слоя композита металл-диэлектрик, позволяет, с одной стороны свести к минимуму влияние контактов гранул соседних слоев на макроскопические свойства системы, а с другой стороны наличие барьерного диэлектрического слоя уменьшает процессы образования силицидов на интерфейсе композит-полупроводник.

Магнитостатические измерения проведены на вибрационном анизометре. Магнитооптические свойства изучены в геометрии экваториального эффекта Керра (ЭЭК) в области энергий 0.5-4.2 эВ.

Обнаружено, что с увеличением толщины Si до 1.3 - 1.7 нм возрастают величина экваториального эффекта Керра, намагниченности и коэрцитивной силы. Изменение свойств многослойных наноструктур в области толщин 1.3-2 нм связано с образованием межгранульной прослойки Si на ФМ гранулах CoFeZr. Из концентрационных зависимостей $\rho(d_{a-Si})$ следует, что перколяция в многослойной системе композит – полупроводник происходит в области толщин d_{a-Si} порядка 1.5 нм.

Наблюдаемое усиление МО отклика в данной системе также связано с перколяционным переходом, что неоднократно наблюдалось и для других наноккомпозитов [1]. Рост намагниченности и коэрцитивной силы с увеличением толщины прослойки Si доказывает, что образование межгранульной полупроводниковой прослойки αSi:H в многослойной системе приводит к возникновению сильного эффективного обменного взаимодействия между изолированными гранулами ФМ сплава Co₄₅Fe₄₅Zr₁₀, и переходу от суперпарамагнитного поведения к ферромагнитному.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-02-16604а и № 07-02-91583.

1. Е.А. Ганьшина, М.В. Вашук, и др., ЖЭТФ **125**, вып.5, 1172 (2004)

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ СВЕРХРЕШЕТОК Fe/V С ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНОЙ СЛОЕВ ЖЕЛЕЗА

Маслов Д.А.¹, Кудасов Ю.Б.^{1,2}¹ Саровский государственный физико-технический институт, ул. Духова 6, Саров, 607188² Российский Федеральный Ядерный Центр – ВНИИЭФ, пр. Мира 37, Саров, 607188

В работе разработана феноменологическая модель магнитного упорядочения в монокристаллических сверхрешетках Fe/V с переменной толщиной слоев железа. Техника изготовления таких сверхрешеток и их основные свойства достаточно хорошо изучены [1, 2]. В качестве элементов сверхрешетки предполагались тонкие слои железа толщиной 2 и 3 монослоя (Fe₂ и Fe₃) с прослойками ванадия толщиной 12 монослоев. Температура магнитного упорядочения для одиночного слоя Fe₂ в сэндвиче V/Fe/V составляет около 50 К, а Fe₃ – 110 К. Изменением толщины прослоек ванадия можно изменять межслойное обменное взаимодействие между слоями железа и, следовательно, температуру упорядочения сверхрешетки в целом. Нами анализировалась магнитная структура сверхрешеток с антиферромагнитным межслойным обменом.

Сильная магнитная анизотропия формы слоев железа в сочетании со слабой внутрислойной анизотропией дает возможность исследования одиночного слоя железа в рамках XY-модели. Электронные состояния слоев Fe₂ и Fe₃ в матрице ванадия отличаются друг от друга, поэтому следует ожидать различных значений для параметра межслойного взаимодействия. Закон, определяющий межслойное взаимодействие был взят в форме $J(\vec{m}_i \vec{m}_j)$, \vec{m}_i – намагниченность i -ого слоя железа. Таким образом, сверхрешетка может быть описана XY-моделью с эффективным магнитным полем, которое представляет собой сумму внешнего и обменных полей, аналогичной использованной в работе [3]. Все параметры модели могут быть оценены из экспериментальных данных сверхрешеток Fe₂/V, Fe₃/V и Fe₂/V/Fe₃/V.

Проведены расчеты магнитной структуры сверхрешеток Fe₂/V/Fe₃/V, а также сверхрешеток с более сложными законами чередования толщины слоев железа. Расчеты проводились с периодическими граничными условиями (неограниченная сверхрешетка) и для сверхрешетки с конечным числом слоев. Для сверхрешеток Fe₂/V/Fe₃/V получено хорошее согласие с экспериментальными данными [4, 5]. Показано, что для решеток с законом чередования слоев железа 3-2-2, возникает своеобразное “фрустрированное” состояние, индуцированное магнитным полем: магнитные моменты слоев Fe₃ выстраиваются вдоль направления внешнего поля, а слои Fe₂ упорядочиваются неколлинеарно.

1. Isberg P., Hjorvarsson B., Wappling R., Svedberg E. B. and Hultman L., *Vacuum*, **48** (1997) 483.
2. Hjorvarsson B., Dura J. A., Isberg P., Watanabe T., Udovic T. J., Andersson G., and Majkrzak C. F., *Phys. Rev. Lett.*, **79** (1997) 901.
3. Ito M., *Prog. Theor. Phys.*, **66** (1981) 1129.
4. K. Eftimova, A.M. Blixt, B. Hjorvarsson, R. Laiho, J. Salminen, J. Raittila, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **246** (2002) 54–61.
5. K. Eftimova, A.M. Blixt, B. Hjorvarsson and P. Svedlindh, *J. Phys.: Condens. Matter* **14** (2002) 12575–12583.

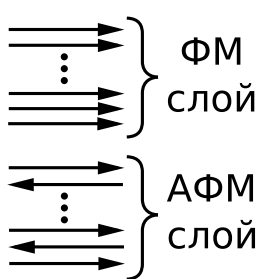
КВАНТОВЫЙ СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ КОНЕЧНОСЛОЙНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА НА ЗАКРЕПЛЁННОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Вальков В.В.^{1,2}, Шкляев А.А.¹

¹Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036, Красноярск

²Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск

E-mail: vv@iph.krasn.ru



Изучение эффектов, возникающих на поверхности раздела тонких слоёв антиферромагнетика и ферромагнетика продолжается более пятидесяти лет. Одним из наиболее интересных свойств магнитных систем, содержащих границу раздела ферромагнетик – антиферромагнетик является обменная анизотропия, приводящая к смещению петли гистерезиса вдоль оси магнитных полей. В настоящее время большой интерес представляет практическое применение свойств таких структур в устройствах магнитной памяти, устройствах спинтроники, в магнитных датчиках.

За годы исследований было предложено множество теоретических моделей для объяснения необычных свойств структур с ферро- антиферромагнитными слоями. Тем не менее, на сегодняшний день не удалось точно установить физическую причину обменного смещения. В этой связи представляется интересным изучить влияние квантовых эффектов на магнитные свойства систем с границей раздела антиферромагнетика и ферромагнетика.

В работе рассмотрена модель конечнослойной структуры, содержащей границу раздела ферромагнетик-антиферромагнетик. Величина спина S считается равной $1/2$. Антиферромагнитный слой состоит из конечного числа антиферромагнитно связанных ферромагнитных плоскостей. Ферромагнитный слой представляет собой структуру из конечного числа ферромагнитно связанных ферромагнитных плоскостей. Ориентация спиновых моментов в нижней плоскости антиферромагнетика считается заданной. Теоретически это обеспечивается введением множителя Лагранжа. Такой подход обеспечивает дальний магнитный порядок в системе.

Для нахождения спектра возбуждений, расчёта квантовых поправок и описания термодинамического поведения системы использовался метод запаздывающих функций Грина, построенных на спиновых операторах. Система уравнений на эти функции замыкалась посредством применения расщепления Тябликова. На основе теоремы о спектральной интенсивности вычислены спиновые корреляторы и получена система уравнений самосогласования, определяющая среднюю намагниченность каждой из плоскостей структуры. Число уравнений этой системы равно числу плоскостей рассматриваемой структуры.

На основе численного решения получен спектр возбуждений системы для различного числа антиферромагнитных и ферромагнитных плоскостей. Вычислены температурные зависимости намагниченностей отдельных плоскостей как в ферромагнитном, так и в антиферромагнитном слоях. Проанализирована зависимость спектра и намагниченности от величины параметра закрепления для различного соотношения интегралов взаимодействия в антиферромагнетике и ферромагнетике, а также между ними.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовая макрофизика”, РФФИ (грант № 07-02-00226) и Интеграционного проекта СО РАН.

ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В БИ-ПЛЕНКЕ ФЕРРОМАГНИТНЫЙ МЕТАЛЛ / СВЕРХПРОВОДНИК В ПРОДОЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Авдеев М.В.¹, Прошин Ю.Н.², Хусаинов М.Г.³, Царевский С.Л.⁴¹)Казанский государственный университет, 420008 Казань, ул. Кремлёвская, 18
E-mail: avdeyev_mv@mail.ru²)Казанский государственный университет, 420008 Казань, ул. Кремлёвская, 18
E-mail: Yurii.Proshin@ksu.ru³)Казанский государственный технический университет, филиал "Восток 422950 Чистополь,
ул. Энгельса 127а

E-mail: mgkh@vostok-inc.com

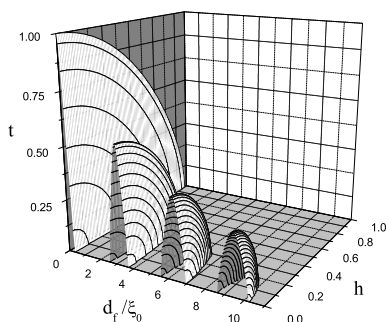
⁴)Казанский Государственный Университет, 420008 Казань, ул. Кремлёвская, 18
E-mail: Sergey.Tsarevskii@ksu.ru

Рис. 1: Зависимость приведённой температуры t от приведённого магнитного поля h и толщины ферромагнитного слоя d_f в единицах ξ_0 . ($2I\tau_f = 7$, $d_s/\xi_0 = 0.625$, $l_s/\xi_0 = 0.25$, $a_f/\xi_0 = 0.05$, $\sigma_s = 3$, $n_{sf} = 1$)

Современная нанотехнология позволяет создавать тонкоплёночные многослойные структуры из материалов, обладающих различными свойствами, сочетание которых в естественной природе часто даже невозможно. Особый интерес представляют гетероструктуры сверхпроводник / ферромагнетик, поскольку сосуществование синглетной сверхпроводимости и ферромагнитного упорядочения в объёмных образцах трудноосуществимо. Однако в искусственно созданных слоистых структурах такое сосуществование становится возможным. В данной работе рассмотрено влияние внешнего продольного магнитного поля на эффект близости в биплёнке ферромагнитный металл / сверхпроводник (ФМ/S). Получена зависимость критической температуры T контакта как функция толщин d_s и d_f S и ФМ для различных значений H , обменного интеграла I ФМ, коэффициента прозрачности σ_s и диффузии D электронов проводимости (э.п). На рис. 1 представлен пример такого расчёта ($t = T/T_c$ и $h = H/H_c$, T_c и H_c критическая температура и критическое поле S, ξ_0 — длина когерентности S при нулевой температуре, a_f — длина спиновой жёсткости в ФМ, τ_f и l_s — время и длина свободного пробега э.п. в ФМ и S соответственно, n_{sf} — коэффициент, определяемый из принципа детального равновесия при прохождении э.п. через границу контакта). Как видно из рис. 1, увеличение магнитного поля приводит к уменьшению T и к изменению границ перехода в нормальное состояние при возникновении возвратной сверхпроводимости. Магнитное поле существенно меняет транспортные свойства ФМ/S — контакта.

Работа поддержана РФФИ и фондом ПВНШ.

1. Изюмов Ю.А., Прошин Ю.Н., Хусаинов М.Г. Конкуренция сверхпроводимости и магнетизма в гетероструктурах ферромагнетик / сверхпроводник. — Успехи физических наук, **172**, (2002), № 2, 113

Современная нанотехнология позволяет создавать тонкоплёночные многослойные структуры из материалов, обладающих различными свойствами, сочетание которых в естественной природе часто даже невозможно. Особый интерес представляют гетероструктуры сверхпроводник / ферромагнетик, поскольку сосуществование синглетной сверхпроводимости и ферромагнитного упорядочения в объёмных образцах трудноосуществимо. Однако в искусственно созданных слоистых структурах такое сосуществование становится возможным. В данной работе рассмотрено влияние внешнего продольного магнитного поля на эффект близости в биплёнке ферромагнитный металл / сверхпроводник (ФМ/S). Получена зависимость критической температуры T контакта как функция толщин d_s и d_f S и ФМ для различных значений H , обменного интеграла I ФМ, коэффициента прозрачности σ_s и диффузии D электронов проводимости (э.п). На рис. 1 представлен пример такого расчёта ($t = T/T_c$ и $h = H/H_c$, T_c и H_c критическая температура и критическое поле S, ξ_0 — длина когерентности S при нулевой температуре, a_f — длина спиновой жёсткости в ФМ, τ_f и l_s — время и длина свободного пробега э.п. в ФМ и S соответственно, n_{sf} — коэффициент, определяемый из принципа детального равновесия при прохождении э.п. через границу контакта). Как видно из рис. 1, увеличение магнитного поля приводит к уменьшению T и к изменению границ перехода в нормальное состояние при возникновении возвратной сверхпроводимости. Магнитное поле существенно меняет транспортные свойства ФМ/S — контакта.

ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В НЕСОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК-СВЕРХПРОВОДНИК

Прошин Ю.Н.¹, Лучкин Р.Г.¹, Хусаинов М.Г.^{1,2}

¹)Казанский государственный университет, 420025, Казань, ул. Кремлёвская, 18

E-mail: Yuri.Proshin@ksu.ru

²)Филиал “Восток”, Казанский государственный технический университет, 422981, Чистополь

Совокупность явлений и свойств, связанных с передачей сверхпроводящих свойств от сверхпроводника (S) находящемуся с ним в контакте изначально несверхпроводящему металлу, называется эффектом близости. В последние 10-15 лет достигнуты значительные успехи в экспериментальном и теоретическом исследовании этого эффекта в слоистых системах ферромагнитный металл/сверхпроводник (F/S) (см. обзоры [1,2] и приведённые в них ссылки). Как правило, исследовались мультислойные системы с высокой степенью симметрии.

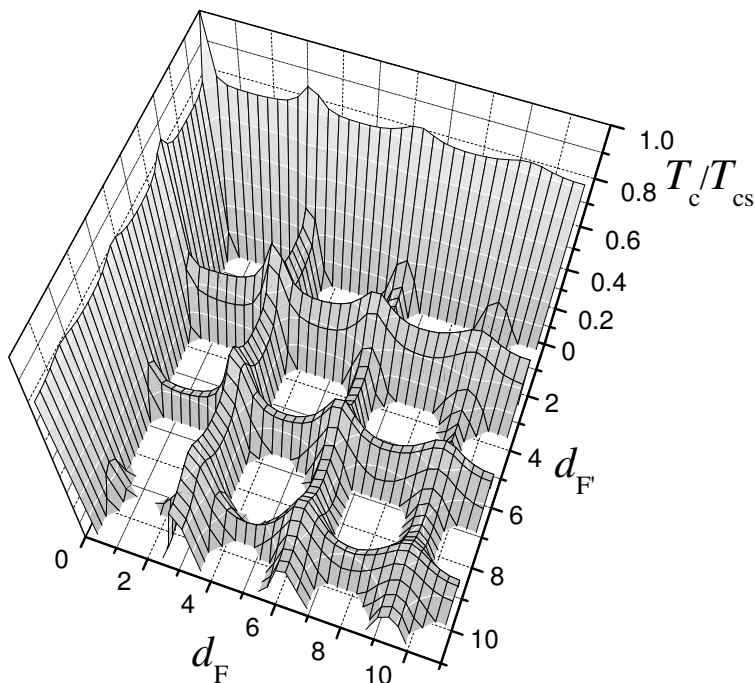


Рис. 1: Фазовая диаграмма с $T_c(d_F, d_{F'})$ -интерференцией для системы F/S/F'. Диагональное сечение с $d_F = d_{F'}$ соответствует примеру из работы [1] с периодически возвратной сверхпроводимостью. Здесь T_{cs} - критическая температура массивного сверхпроводника S, а толщины ферромагнитных слоев, изготовленных из одинакового материала, измеряются в единицах длины спиновой жесткости.

F/S/F'/S'). Наряду с иерархией критических температур для всех рассмотренных систем предсказана своеобразная интерференция критической температуры ($T_c(d_F, d_{F'})$ -interference) для систем с несоразмерными толщинами ферромагнитных слоев (d_F and $d_{F'}$) (см. рис.1).

Работа частично поддержана РФФИ (05-02-16369 и 08-02-01376).

В настоящей работе делается обзор по эффекту близости в несимметричных мультислойных системах F/S. В рамках оригинальной теории эффекта близости рассмотрено взаимное влияние неоднородной сверхпроводимости и магнетизма в несоразмерных гибридных систем, состоящих из конечного числа слоев достаточно грязных металлов. Рассмотрены различные причины несоразмерности: различия в материалах слоев F и F', их толщинах (d_F and $d_{F'}$) и, наконец в локальном окружении сверхпроводящих и ферромагнитных слоев, приводящему к различным граничным условиям.

Последовательно рассмотрены двух- (F/S), трех- (F/S/F' и S/F/S') и четырех- (F/S/F'/S') слойные системы. При этом возникает усложнение фазовых диаграмм, связанное с появлением и учетом π -фазного магнетизма (F/S/F' и F/S/F'/S') и π -фазной сверхпроводимости (S/F/S' и

1. Изюмов Ю.А., Прошин Ю.Н., Хусаинов М.Г., УФН, **172**, 113 (2002)

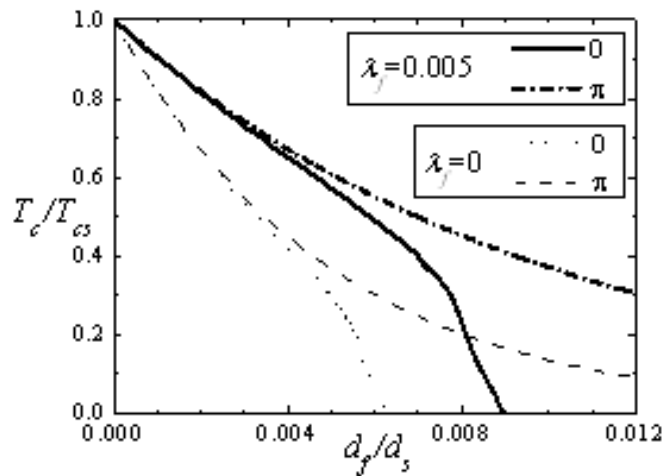
2. Buzdin A. Rev. Mod. Phys. **77**, 935 (2005)

КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА СВЕРХРЕШЕТКИ ФЕРРОМАГНЕТИК-СВЕРХПРОВОДНИК С УЧЕТОМ МЕЖЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Попов И.И.¹, Хусаинов М.М.¹, Хусаинов М.Г.^{1,2}, Прошин Ю.Н.¹

¹Казанский государственный университет, 420008, Казань

²Филиал "Восток", Казанский государственный технический университет, 422981, Чистополь



Теоретически исследованы возможные сверхпроводящие и магнитные состояния в слоистых наноструктурах чистый ферромагнитный металл/чистый сверхпроводник (FM/S). В рамках 3D-теории эффекта близости [1] учтено электрон-электронное взаимодействие в FM слое. Из уравнений Эйлера-Вейера в куперовском пределе получена зависимость критической температуры T_c от относительных толщин FM (d_f) и S (d_s) слоёв для сверхрешетки FM/S. Одна из таких зависимостей показана на фазовой диаграмме. Здесь

использованы следующие безразмерные параметры электрон-электронного взаимодействия: $\lambda_s = 0.01$, $\lambda_f = 0.005$; и $\xi_s/a_f = 10$, где a_f — длина спиновой жесткости, ξ_s — длина когерентности, T_{cs} — критическая температура массивного сверхпроводника S (для сравнения показаны кривые без учета межэлектронного взаимодействия с $\lambda_f = 0$). При $\lambda_f \geq 0$ неоднородное сверхпроводящее состояние Ларкина-Овчинникова-Фульде-Феррелла возможно только в случае параллельной ориентации намагниченностей соседних FM-слоев (0-фаза). В случае же их антипараллельной ориентации (π -фаза) реализуется традиционное БКШ спаривание во всем образце, поскольку вследствие идеальной прозрачности и куперовского предела происходит обобществление всех взаимодействий и парамагнитный эффект обменного поля I взаимно компенсируется не только в S слоях, но также внутри FM областей. Это объясняет неожиданно высокое значение T_c , которое было обнаружено в короткопериодных сверхрешетках Gd/La [2] с $d_{Gd} \approx 3d_{La}$ (обычно сверхпроводимость наблюдается в образцах с $d_f \ll d_s$) и позволяет определить величину межэлектронного взаимодействия в Gd ($\lambda_{Gd} \approx \lambda_{La} \approx 0.3$).

Работа частично поддержана грантами РФФИ (05-02-16369) и ПВНШ.

1. Ю.Н. Прошин, М.М. Хусаинов, М.Г. Хусаинов *JMMM* **300**, 243 (2006)
2. J.P. Goff, J.P. *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **240**, 592, (2002)

ТРИПЛЕТНОЕ СПАРИВАНИЕ И ГЕЛИКОИДАЛЬНЫЕ ФАЗЫ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ.

Кабанов В.В.Институт Йозефа Стефана, Любляна 1000, Словения
E-mail: viktor.kabanov@ijs.si

Показано, что в присутствии сверхпроводящего тока в d-волновом сверхпроводнике спин-орбитальное взаимодействие приводит к появлению дополнительной p-волновой компоненты параметра порядка [1]. Этот эффект приводит к частичному исчезновению нулей параметра порядка на поверхности ферми. Показано, что эффект связан с существованием в свободной энергии инвариантов Лифшица. Если спин-орбитальное взаимодействие достаточно сильное, инварианты Лифшица приводят к появлению геликоидальных фаз в сверхпроводящем состоянии [2,3] и перенормируют лондоновскую глубину проникновения. Рассмотрена возможность детектирования эффекта в смешанной абрикосовской фазе в сверхпроводниках второго рода [3].

В случае слабого спин-орбитального взаимодействия появление инвариантов Лифшица связано с парамагнитным эффектом [3,4]. Показано, что глубина проникновения магнитного поля существенно зависит от поля. При этом верхнее критическое поле становится нелинейной функцией температуры и $d^2H_{c2}(T)/dT^2 > 0$ [3]. Рассмотрена возможность возвратной сверхпроводимости в сильных магнитных полях.

1. Kabanov V.V. Phys. Rev. B, **69**, 052503 (2004).
2. Минеев В.П., Самокхин К.В., ЖЭТФ, **105**, 747 (1994)
3. Kabanov V.V. Phys. Rev. B, **76**, 172501 (2007).
4. Lebed A.G. Phys. Rev. Lett., **96**, 037002 (2006).

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТЕЙ И ИНТЕРФЕЙСОВ ВО
ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕУздин С.В.Физический факультет Санкт-Петербургского государственного университета, Петергоф,
198904, Санкт-Петербург

Магнитные свойства поверхностей переходных металлов часто отличаются от свойств массивного образца. В наноструктурах роль поверхностных атомов в формировании магнитных свойств особенно важна в связи с увеличением относительной доли таких атомов. Это делает актуальной задачу расчета магнитных конфигураций вблизи металлических поверхностей и интерфейсов. Если поверхность немагнитна, то нанесение на нее малых кластеров, состоящих из 3d элементов, приводит, как правило, к формированию неколлинеарного магнитного порядка. Этот результат, полученный впервые в рамках метода модельных гамильтонианов [1,2] для атомов, образующих тримеры на поверхности немагнитных металлов, подтвержден последнее время расчетами из первых принципов [3]. Если кластеры помещены на магнитную поверхность, то влияние подложки аналогично воздействию внешнего магнитного поля. При этом появляется несколько метастабильных магнитных состояний с близкой энергией [4]. Включение дополнительного магнитного поля позволяет стимулировать переходы между разными магнитными состояниями и приводит к большому изменению полного магнитного момента кластера [5]. Это может быть использовано при создании новых магнитных устройств.

В работе предложен микроскопический подход для расчета неколлинеарной магнитной структуры поверхностей и интерфейсов, произвольно ориентированных относительно кристаллографических осей, а также магнитных кластеров на поверхности в присутствии внешнего магнитного поля. Зависимость полного магнитного момента выделенной подсистемы атомов от величины внешнего поля (петля гистерезиса) позволяет судить об устойчивости различных магнитных состояний этой подсистемы. Для ряда 3d-металлов построена послойная зависимость намагниченности от расстояния до поверхности образца. Во внешнем поле форма петли гистерезиса каждого слоя существенно зависит как от расстояния между слоем и поверхностью, так и от ориентации поверхности.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-02-16722

1. S. Uzdin *et al.*, *Europhys. Lett.*, **47**, 556 (1999)
2. S. Uzdin *et al.*, *Surface science*, **482-485**, 965 (2001)
3. A. Bergman *et al.*, *Phys. Rev. B* **75**, 224425 (2007)
4. S. Lounis *et al.*, *Phys. Rev. B* **75**, 174436 (2007)
5. S. Uzdin *et al.*, *Computational Materials Science*, **17**, 441 (2000)

НЕКОЛЛИНЕАРНЫЙ МАГНЕТИЗМ В СПИНОВЫХ ПРУЖИНАХ

Уздин В.М., Молчанова М.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

Спиновые пружины представляют собой обменно связанные слои мягкого и жесткого магнетика. Во внешнем магнитном поле, направленном противоположно намагниченности жесткого магнетика, в мягком магнетике образуется неколлинеарная спиральная структура, меняющаяся при изменении амплитуды поля. Большая коэрцитивность жесткого магнетика в сочетании с большой намагниченностью насыщения мягкого приводит существенному увеличению площади петли гистерезиса спиновой пружины, что имеет большие практические приложения [1]. Структуры из обменно-связанных мягких и жестких магнетиков могут также служить основой для создания среды с высокой плотностью магнитной записи [2].

В рамках метода модельных гамильтонианов для коллективизированных электронов разработан теоретический подход для расчета эволюции магнитной структуры мягкого магнетика при изменении внешнего поля. Теория содержит всего 2 феноменологических параметра для каждого химического элемента, причем их значения определяются из сравнения с экспериментальными данными и расчетами из первых принципов для ряда идеальных систем. Новых параметров по сравнению с теорией, разработанной для расчета магнитной структуры коллинеарных магнетиков, не возникает. Параметры универсальны, т.е. не зависят от локального окружения атома данного химического элемента, что позволяет проводить расчеты сложных, пространственно-неоднородных структур, не увеличивая их числа.

Проведены расчеты магнитной конфигурации мягкого магнетика различной толщины в зависимости от величины и направления приложенного внешнего поля. Построена обратимая часть петли гистерезиса спиновой пружины как при изменении величины поля, приложенного вдоль или перпендикулярно оси легкого намагничивания жесткого магнетика, так и при изменении направления поля, когда его величина остается постоянной. Результаты расчетов воспроизводят все характерные особенности процесса перемагничивания спиновых пружин. Предложенный подход допускает обобщение на случай некопланарного упорядочения спинов мягкого магнетика во внешнем поле.

Работа поддержана грантом РФФИ 07-02-01065

1. S.D. Bader, Rev. Mod. Phys. **78**, 1 (2006)
2. D. Suess, J. Magn. Magn. Mat., **308**, 183 (2007)

ОСОБЕННОСТИ КЛАССИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ХОЛЛА В ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

Березин В.М., Соловьев А.А.

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, пр. Ленина 76

Известно, что электрокинетические эффекты в тонких металлических пленках проявляют ряд особенностей, связанных с механизмами рассеяния электронных носителей и особенностями микроструктуры самих пленок. В литературе преимущественно обсуждаются отличия удельной электропроводности тонких металлических пленок и объемных образцов.

В данной работе предлагается модель формирования холловской ЭДС в тонких металлических пленках на диэлектрических подложках. Приводятся результаты измерений эффекта Холла на тонкопленочных образцах. Образцы вместе с контактами напылялись на поликорковых подложках термовакuumным методом через маску. Пленки имели стандартную прямоугольную форму с четырьмя зондами-электродами. Геометрическая толщина пленок, а также их микроструктура измерялась с помощью зондового сканирующего микроскопа Solver Pro - 47. Теоретический подход, примененный в работе, основывается на учете влияния барьеров Шоттки на границах разделов пленка-подложка, пленка-окисел, а также структурных дефектов поверхности металлической пленки. При этом предполагается, что толщина пленки не на много превышает размеры поверхностных слоев, толщина которых определяется поверхностными дефектами и потенциальными барьерами. Вводится эффективная толщина пленки, которая меньше геометрической (измеренной) - d на $2l$, где l - величина порядка длины свободного пробега электронов в пленке. В соответствии с принятой моделью, величина эффекта Холла определяется именно эффективной толщиной пленки. Носители, движущиеся в поверхностных слоях толщиной l , не дают существенного вклада в эффект Холла ввиду их малой подвижности. В соответствии с принятой моделью, разность напряжений Холла определенная из модели свободных электронов и измеренная в эксперименте (с использованием геометрической толщины пленок), связана не с постоянной Холла, а с эффективной толщиной пленки. Экспериментальные проверки выполненные на пленках меди, серебра толщиной около 150 нм, подтверждают предложенную теоретическую модель. Обнаруженная в пленках слабая отрицательная температурная зависимость (от температуры жидкого азота до комнатной) на измеряемое напряжение Холла, также указывает на влияние длины свободного пробега электронов на его величину.

ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В СТРУКТУРЕ НЕМАГНИТНЫЙ ПРОВОДНИК-ФЕРРОМАГНЕТИК

Буцько Л.Н., Бучельников В.Д., Бычков И.В.

Челябинский государственный университет, 454021 Челябинск, Россия

Одна из основных трудностей, возникающих при разработке систем электромагнитной защиты, обусловлена тем, что диапазон частот, в котором работают современные технические средства, находится в интервале от нескольких герц до сотен гигагерц. А поскольку широко применяемые сегодня виды материалов даже при их комбинации сохраняют защитные свойства лишь в ограниченном диапазоне частот, то создание эффективных систем, обеспечивающих экранирование как низкочастотных, так и высокочастотных и СВЧ электромагнитных полей, является крайне сложной задачей. В связи с этим в данной работе проведен расчет и выявлена причина поглощения в структуре немагнитный проводник (НМП) – ферромагнетик (ФМ). Оценены значения проводимости и толщины верхнего слоя (σ_{Me}, d_{Me}), а также основных параметров ФМ слоя ($\sigma_{fm}, d_{fm}, K, M_0$), при которых получаются наиболее широкие области поглощения ЭМВ.

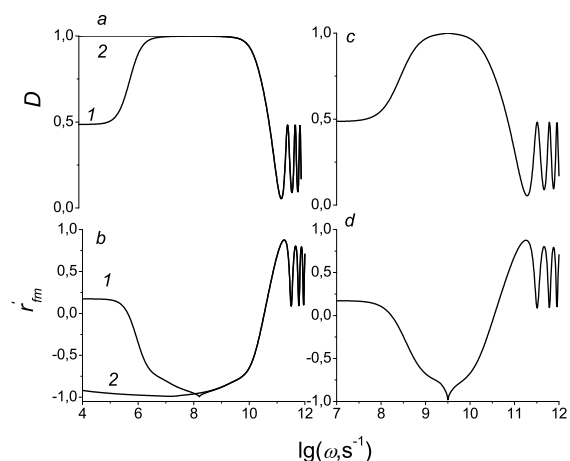


Рис. 1: Зависимость КП ЭМВ всей структуры (a, c) и действительной компоненты амплитудного КО ЭМВ отдельного полупроводящего ФМ слоя r'_{fm} (b, d) от частоты для различных значений внешнего магнитного поля H . a, b: 1 — вблизи ориентационного фазового перехода (ОФП); 2 — в точке ОФП; c, d — в отсутствии поля.

Получено, что в такой структуре на частотных зависимостях коэффициента поглощения (КП) имеются широкие области частот, в которых КП стремится к единице. В области ОФП этот диапазон частот простирается от 0 до десятков ГГц. Исследования распространения и отражения ЭМВ проводились методом, основанным на решении связанной системы уравнений Максвелла, Ландау - Лифшица совместно с граничными условиями. Совместное решение вышеперечисленных уравнений позволило определить частотные зависимости коэффициента поглощения (КП) электромагнитной волны (ЭМВ). На рис 1. приведена частотная зависимость КП для различных полей.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал-07-02-96030.

АНОМАЛИИ ОТРАЖЕНИЯ И ПРЕЛОМЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА “НЕМАГНИТНЫЙ ДИЭЛЕКТРИК – ЛЕГКООСНЫЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК” В СКРЕЩЕННЫХ МАГНИТНОМ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЯХ

Кулагин Д.В., Савченко А.С., Тарасенко С.В.

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, 83114, г. Донецк,
ул. Р.Люксембург, 72
E-mail: kulagin_@mail.ru

Известно, что в последние годы число работ посвященных анализу различных аспектов распространения электромагнитных волн в одномерных магнитных фотонных кристаллах на основе антиферромагнитной среды непрерывно растет [1–2]. Это обусловлено не только необходимостью освоения ближнего ИК диапазона, но и возможностью целенаправленного и эффективного влияния на характер распространения и локализации электромагнитных волн в таких средах с помощью легко реализуемых внешних полей. На этом фоне практически отсутствуют работы связанные с влиянием на поляритонную динамику ограниченного магнитного фотонного кристалла постоянного внешнего электрического поля, несмотря на то, что создание синтетических (искусственных) мультиферроиков приобретает в последнее время все большую актуальность. Одним из ключевых вопросов для понимания особенностей распространения электромагнитных волн в таких средах является анализ поляритонной динамики вблизи границы раздела магнитной и немагнитной сред в условиях одновременного наложения как магнитного, так и электрического поля.

В данной работе рассмотрен антиферромагнетик в скрещенных магнитном и электрическом полях: $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{H}_0 \parallel OX$ (\mathbf{l}_0 – вектор антиферромагнетизма). Для данной геометрии детально изучено влияние внешнего постоянного электрического поля на характер преломления объемной ТМ и ТЕ электромагнитной волны на границе раздела магнитной и немагнитной сред. Для этого рассмотрены уравнения кривых, определяющих сечения поверхности рефракции волны плоскостью падения $\mathbf{k} \in YZ$. В случае легкоосного антиферромагнетика форма сечения поверхности волновых векторов (ПВВ) имеет вид:

$$\frac{k_z^2}{a^2} + \frac{(k_y + c)^2}{b^2} = 1$$

Здесь a , b и c являются функциями частоты, E_0 , H_0 . Для внешней немагнитной среды ПВВ определяется следующим выражением

$$k_z^2 + k_y^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\epsilon}.$$

На основе анализа записанных уравнений для ПВВ в немагнитном диэлектрике и легкоосном антиферромагнетике показано, что в зависимости от частоты и угла падения электромагнитной волны возможна реализация множества аномальных режимов преломления и отражения на границе раздела “немагнитный диэлектрик – легкоосный антиферромагнетик”. В частности возможны: 1) эффект полного внутреннего отражения; 2) эффект отрицательной оптической рефракции (проекции на границу раздела групповых скоростей падающей и преломленной волн имеют разные знаки, при этом аналогичные проекции фазовых скоростей этим свойством не обладают); 3) эффект двулучепреломления.

1. Р. В. Писарев, Физика магнитных диэлектриков, Наука, (1974).
2. V. I. Belotelov, and A. K. Zvezdin, J. Opt. Soc. Am. B, **22**, 286, (2005).

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ПОЛЯРИТОНЫ В 1-D ГИРОТРОПНОМ МАГНИТНОМ ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ В ПОСТОЯННОМ ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Кулагин Д.В., Савченко А.С., Тарасенко С.В.

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, 83114, г. Донецк,
ул. Р.Люксембург, 72
E-mail: kulagin_@mail.ru

Целью данной работы является изучение влияния квадратичного магнитооптического взаимодействия на условия формирования поверхностной поляритонной волны (ТМ или ТЕ типа) в одномерном гиротропном магнитном фотонном кристалле (МФК), находящемся в скрещенных магнитном и электрических полях. В качестве примера такого фотонного кристалла рассмотрена сверхрешетка, состоящая из двух чередующихся слоев. Первый слой – это нескомпенсированный (за счет приложенного внешнего магнитного поля $|a_1^\alpha d_1 - q_2^\alpha d_2| < |b_1^\alpha| d_1$) легкоосный антиферромагнетик, а второй – немагнитный диэлектрик.

С помощью матрицы перехода T_{ik}^α ($\alpha = p$ соответствует ТМ волне, $\alpha = s$ – ТЕ волне) проанализированы особенности спектра коллективных поверхностных поляритонов в полуограниченном 1-D МФК для двух случаев: 1) внешнее постоянное электрическое поле \mathbf{E}_0 коллинеарно легкой магнитной оси \mathbf{l}_0 антиферромагнетика и нормали \mathbf{n} к границе раздела “МФК – немагнитный диэлектрик” $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ \parallel \mathbf{n}$; 2) $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \mathbf{n}, \mathbf{n} \parallel OY$.

Обратная глубина проникновения β^α неоднородной электромагнитной волны в 1-D МФК может быть определена с помощью теоремы Флоке: $\text{ch}(\beta^\alpha D) = (T_{11}^\alpha + T_{22}^\alpha)/2$.

Анализ последнего выражения показывает, что в рассматриваемом фотонном кристалле возможно существование трех типов коллективной поверхностной поляритонной волны ($(\beta^\alpha)^2 > 0$):

1. $(q_2^\alpha)^2 > 0$; $(q_1^\alpha)^2 < 0$, причем $q_1^\alpha = [\pi(2n+1)i]/d_1$, ($n = 1, 2, 3, \dots$) (то есть на первом слое вмещается нечетное число полуволн электромагнитной волны, а во втором слое волна поверхностная). Тогда $\beta^\alpha = [q_2^\alpha d_2 + (2n+1)\pi i]/D$.
2. $(q_2^\alpha)^2 > 0$; $(q_1^\alpha)^2 < 0$, причем $q_1^\alpha = [\pi \cdot 2ni]/d_1$, ($n = 1, 2, 3, \dots$) (то есть на первом слое вмещается четное число полуволн электромагнитной волны, а во втором слое волна поверхностная). Тогда $\beta^\alpha = q_2^\alpha d_2/D$.
3. $(q_2^\alpha)^2 > 0$; $(q_1^\alpha)^2 > 0$ (то есть в обоих слоях 1-D МФК формируются поверхностные поляритонные волны). Тогда $\beta^\alpha = (q_1^\alpha d_1 - q_2^\alpha d_2)/D$.

Здесь под q_j и d_j следует понимать обратную глубину проникновения поляритонной волны в j -ом слое и толщину j -ого слоя соответственно ($j = 1, 2$); $D = d_1 + d_2$.

Следует отметить, что в отличие от $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{H}_0 \parallel OX$, $\mathbf{n} \parallel OY$ для конфигурации $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{H}_0 \parallel OX$, $\mathbf{n} \parallel OZ$ спектры всех найденных выше типов поверхностных поляритонных волн как ТМ, так и ТЕ типа обладают невзаимностью относительно инверсии направления распространения вдоль оси OY . Кроме того, различным оказывается и характер спада найденных типов поверхностных поляритонов вглубь МФК при наличии скрещенных магнитного и электрического полей. Так в случае $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{H}_0 \parallel OX$, $\mathbf{n} \parallel OZ$ амплитуда поверхностной электромагнитной волны просто экспоненциально спадает вглубь рассматриваемого 1-D МФК, а для $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{l}_0 \parallel OZ$, $\mathbf{H}_0 \parallel OX$, $\mathbf{n} \parallel OY$ наряду с экспоненциальным спаданием вглубь 1-D МФК волна будет также и осциллировать.

РЕЗОНАНСНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ПРИСУТСТВИИ СВЧ ИЗЛУЧЕНИЯ

Ляпилин И.И., Патраков А.Е.

Институт физики металлов УрО РАН,
620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
Lyapilin@imp.uran.ru

Интерес к теоретическим исследованиям явлений переноса в двумерных электронных системах в присутствии микроволнового излучения значительно возрос после обнаружения в "сверхчистом" образце GaAs/Al_xGa_{1-x}As осцилляций диагональных компонент тензора электропроводности в классическом интервале изменения напряженности магнитного поля [1,2].

Наряду с осцилляциями диагональных компонент тензора проводимости, которые обусловлены поглощением свободными носителями заряда энергии СВЧ излучения и переходами электронов между уровнями Ландау, экспериментально были обнаружены также и биения [2], которые наблюдались в интервале более слабых магнитных полей. Такого рода биения связывают, как правило, с проявлениями взаимодействия между кинетическими и спиновыми степенями свободы электронов проводимости. Таким взаимодействием является, например, спин—орбитальное взаимодействие, которое, приводит к возможности переходов электронов проводимости в магнитном поле между уровнями Ландау на частотах комбинированного резонанса [3].

Спин-орбитальное взаимодействие представляет собой канал по которому происходит обмен энергией между подсистемами трансляционных и спиновых степеней свободы электронов. При этом средние температуры кинетических T_k и спиновых T_s степеней свободы электронов проводимости получают добавки δT_k , и δT_s по отношению к равновесной температуре системы T . В этом случае *любой* кинетический коэффициент $\mathcal{L} \sim (T_k, T_s)$ будет иметь соответствующую резонансную добавку $\delta \mathcal{L}$, которая может быть найдена из уравнений баланса средних энергий кинетических и спиновых степеней свободы электронов.

Проведенный анализ показал, что добавки к кинетическим коэффициентам имеют резонансный характер и заметно отличны от нуля в некотором частотном интервале порядка ширины линии вблизи каждой из резонансных частот. Величина эффекта определяется величиной амплитудой поля, а сам эффект должен быть легко наблюдаем и может использоваться для детектирования резонансов.

1. M. A. Zudov and R. R. Du, L. N. Pfeiffer et.al. Phys. Rev. Lett. **90**, 046807 (2003).
2. R. G. Mani, J. H. Smet, K. von Klitzing, et.al. Nature **420**, 646 (2002).
3. Э.И. Рашба, УФН. **84** 557, (1964).

МАГНИТОСТАТИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ БЕСКОНЕЧНОЙ ПОЛОСЫ С КОНЕЧНОЙ ПОЛОСТЬЮ

Дякин В.В., Раевский В.Я., Умергалина О.В.

Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: ovu@impr.uran.ru

Для практических приложений (например, в дефектоскопии) актуально решение магнитостатической задачи для различных моделей магнитных тел и источников внешнего поля. В качестве математической постановки задачи выбрано интегродифференциальное уравнение, эквивалентное (для магнитостатики) системе уравнений Максвелла:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) - \nabla \operatorname{div} \int_{\Omega} \frac{(\mu - 1)\mathbf{H}(\mathbf{r}')}{4\pi R} d\mathbf{r}' = \mathbf{H}^0(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (1)$$

где $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ – напряженность результирующего поля, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ – область, занятая магнетиком с магнитной проницаемостью μ , $\mathbf{H}^0(\mathbf{r})$ – поле внешних источников, $R := |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Рассматривается задача в следующей постановке: в пластине с проницаемостью $\mu = \text{const}$, ограниченной плоскостями Γ_1 (с уравнением $z = -d_1$) и Γ_2 ($z = -d_2$) находится полость (дефект), ограниченная конечной гладкой поверхностью S . Для этого случая уравнение (1) принимает вид:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) + \frac{\mu - 1}{4\pi} \nabla \left\{ \int_{\Gamma_1} \frac{H_n(\mathbf{r}')}{R} d\mathbf{r}' + \int_{\Gamma_2} \frac{H_n(\mathbf{r}')}{R} d\mathbf{r}' + \int_S \frac{H_n(\mathbf{r}')}{R} d\mathbf{r}' \right\} = \mathbf{H}^0(\mathbf{r}). \quad (2)$$

В [1] приводится решение схожей задачи, но о полупространстве с конечным дефектом, где показано, что аналогичное уравнение приводится к виду, содержащему интегралы только по поверхности дефекта S . В данной задаче о пластине аналогичными приемами и использованием преобразования Фурье также удастся выразить нормальные составляющие результирующего поля H_n на граничных плоскостях Γ_1 и Γ_2 через интегралы от этой составляющей только по поверхности дефекта S . Подставляя полученные выражения в (2), получаем уравнение вида:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) + \frac{\mu - 1}{4\pi} \nabla \left\{ \int_S \frac{H_n(\mathbf{r}')}{R} d\mathbf{r}' + \lambda \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{2k} \int_S H_n(\mathbf{r}') \left[\frac{1}{R_k^{(1)}} + \frac{\lambda}{R_k^{(2)}} + \frac{1}{R_k^{(3)}} + \frac{\lambda}{R_k^{(4)}} \right] d\mathbf{r}' \right\} = \mathbf{H}^0(\mathbf{r}),$$

где $R_k^{(1)} = \sqrt{\rho + (|z + d_1| + d_1 + 2kd + z')^2}$, $R_k^{(2)} = \sqrt{\rho + (|z + d_1| + d_2 + 2(k+1)d - z')^2}$,
 $R_k^{(3)} = \sqrt{\rho + (|z - d_2| + d_2 + 2kd - z')^2}$, $R_k^{(4)} = \sqrt{\rho + (|z - d_2| + d_1 + 2(k+1)d + z')^2}$,
 $\rho = (x - x')^2 + (y - y')^2$, $\lambda = (\mu - 1)/(\mu + 1)$, $d = d_1 + d_2$.

В работе в качестве примера рассмотрен дефект шаровой формы в однородном (продольном к пластинам) внешнем поле. Если искать нормальную составляющую H_n на сфере S в виде разложения по сферическим функциям, то из последнего уравнения можно получить бесконечную систему линейных уравнений относительно коэффициентов этого разложения, после решения которой выражение для нормальной составляющей подставляется в это уравнение, из которого вычисляется результирующее поле в любой точке.

Работа выполнена по плану РАН (тема № г.р.01.2.006 13393) и проекта № 32 программы президиума РАН.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ МАГНИТНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПО СПЕКТРАМ ОТРАЖЕНИЯ И ПРОХОЖДЕНИЯ ЭМ ВОЛН МЕТОДОМ ГАЛЁРКИНА

Емец В.Н., Бычков И.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, 454021 Челябинск

E-mail: bychkov@csu.ru

Рассматривается задача определения магнитной проницаемости μ слоя по спектрам отражения $R(\lambda)$ или прохождения $T(\lambda)$ ЭМ волны. В операторном виде задача имеет вид: $\hat{R}(\lambda, \mu) = R(\lambda)$. Для решения этого уравнения итерационными методами предполагается, что $\mu(z) = \sum_{i=1}^n \mu_i \phi_i(z)$, где $\phi_i(z)$ - известный набор базисных функций. Для решения уравнения используется метод Левенберга-Марквардта [1].

Выражения для операторов \hat{R} и \hat{T} находятся из решения прямой задачи методом Галёркина [2]. Прямая задача определения $R(\lambda)$ и $T(\lambda)$ по известной $\mu(z)$ для нормально падающей ТЕ-волны сводится к решению уравнения $\frac{d^2 U}{dz^2} - \frac{d \ln(\mu)}{dz} \frac{dU}{dz} + k^2 \epsilon(z) \mu(z) U = 0$ [3]. Методом Галёркина уравнение сводится к системе линейных алгебраических уравнений: $M(\lambda, \mu) \vec{x} = b(\lambda, \mu)$, $\vec{x} = [r \ t \ \vec{u}]^T$, \vec{u} - значения амплитуды волны в слое, r и t - амплитуды отражённой и прошедшей волны у границ слоя. Тогда $\hat{R} = |M_1^{-1} \vec{b}|^2$, $\hat{T} = |M_2^{-1} \vec{b}|^2$, индекс указывает номер строки обратной матрицы M^{-1} .

Показана возможность применения метода к решению задачи синтеза многослойных покрытий с заданными коэффициентами прохождения, отражения или поглощения. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал-07-02-96030.

1. Васин В.В., Мокрушин А.А., Доклады академии наук, 371, с. 35-37, (2000)
2. Флетчер К., Численные методы на основе метода Галёркина, Мир (1988)
3. Борн М., Вольф Э., Основы оптики, Наука (1973)

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СПЕКТРЫ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$

Уляшев А.М.¹ Беляев Ю.Н.¹, Котов Л.Н.¹, Калинин Ю.Е.², Ситников А.В.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

²Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж, Московский пр.

14

Исследование частотных диэлектрических и магнитных свойств (диэлектрических и магнитных спектров) композитных плёнок в ВЧ области, проводилось лишь в отдельных работах. Совместное исследование диэлектрических и магнитных спектров позволяет выявить наличие взаимодействия ферромагнитных и диэлектрических наночастиц в таких плёнках и определить механизм потерь, обусловленных этим взаимодействием.

Диэлектрические и магнитные спектры исследованы для пленок $(\text{Fe}_{45}\text{Co}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1,00-x}$ ($0,2 < x < 0,6$), полученных в атмосферах аргона и кислорода [1]. Толщина полученных плёнок составляла 2,2-6,2 мкм. Измерения проницаемостей проводились с использованием измерителя добротности Е4-11 по измеряемым значениям индуктивности, емкости конденсатора и добротности Q контура с катушкой индуктивности при комнатной температуре в диапазоне частот 50-160 МГц с амплитудой переменного поля порядка 1мЭ. Были получены формулы для расчета вещественной и мнимой компонент диэлектрической (ϵ' и ϵ'') и магнитной (μ' и μ'') проницаемостей с учётом коэффициента заполнения композитной пленкой катушки и конденсатора. Обнаружено, что вещественные компоненты ϵ' , μ' уменьшаются с ростом частоты для обоих типов пленок в большой области x . Уменьшение μ' с ростом частоты наблюдается для пленок, выращенных в атмосфере кислорода, только для больших концентраций металлической фазы $x > 0,45$. Для пленок, полученных в атмосфере кислорода, мнимые компоненты ϵ'' , μ'' увеличиваются с ростом частоты для всех концентраций x , а для плёнок, полученных в атмосфере аргона, только при больших значениях x . Очевидно, что разница в поведении двух типов пленок, связана с частичным окислением металлической фазы в плёнках, изготовленных в атмосфере кислорода, и возникновением в пленке границ с плавным переходом: проводник-полупроводник-диэлектрик. Полученные результаты анализируются на основе проводимости композитных плёнок, динамики намагниченности ферромагнитных частиц и их взаимодействия, а также динамики поляризации диэлектрика. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. L.N. Kotov *et al.*, ЖМММ, **316**, 20 (2007). (2004)

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЯ СВЧ-ВОЛН ОТ
МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МЕТАЛЛ-СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ
ПЛЕНОКГущин Н.Н.¹, Котов Л.Н.¹, Петрунёв С.Н.¹, Антонец И.В.¹, Калинин Ю.Е.², Ситников А.В.²¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55²Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж, Московский пр.14

В работе [1] исследовано отражение сантиметровых электромагнитных волн в диапазоне частот 8-25 ГГц от металл-диэлектрических пленок составов $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ ($0,3 < x < 0,6$). В интервале частот 19-25 ГГц обнаружен значительный рост коэффициента отражения R (амплитуда скачка достигает 25%). Такая аномальная частотная зависимость $R(f)$ открывает значительные перспективы использования тонкопленочных покрытий для создания новой СВЧ-техники, например, селективных усилителей и поглотителей. Для их внедрения необходимы пленки, которые характеризуются таким скачком в различных СВЧ интервалах. Поэтому целью данной работы является изучение зависимостей $R(f)$ для пленок с различными типами металлической и диэлектрической фаз и выявление механизма аномального поведения $R(f)$.

В работе приведены исследования частотных зависимостей коэффициента отражения для четырех серий металл-диэлектрических пленок: $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ (с таким составом получены две серии плёнок в атмосфере аргона и кислорода), $(Co_{100})_x(LiNbO_3)_{1-x}$, $(Cu_{100})_x(Al_2O_3)_{1-x}$. Скачок на зависимостях $R(f)$ наблюдается для пленок только трех первых серий. Для пленок с сегнетоэлектрической фазой скачок значительно расширяется по частоте. Для плёнок $(Cu_{100})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ с немагнитной металлической фазой отсутствует аномальное поведение $R(f)$. Поэтому, можно предположить, что скачок на зависимости $R(f)$ обусловлен наличием ферромагнитной фазы в плёнках. На более высоких частотах (свыше 25 ГГц) поведение исследуемых зависимостей качественно повторяют друг друга, следовательно, топология структуры пленок при больших x становится одинаковой с точки зрения отражения СВЧ волн [2]. Поведение зависимостей $R(f)$ обсуждается на основе теории отражения волн от полупроводящих магнитных и немагнитных сред.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Yu.E. Kalinin *et al.* Изв. РАН. Сер. физ. **69**, 1195 (2005).
2. I.V. Antonets Yu.E. ЖТФ, **74**, 102 (2004).

ОСОБЕННОСТИ ФМР-СПЕКТРОВ ПЛЕНОК С ФАЗАМИ:
МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК, СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК

Ефимец Ю.Ю.¹, Котов Л.Н.¹, Власов В.С.¹, Турков В.К.¹, Носов Л.С.¹, Калинин Ю.Е.²,
Ситников А.В.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

²Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж, Московский
пр.14

В качестве исследуемых образцов в работе использованы композитные пленки составов $Co_x(NbLiO_3)_{1-x}$ ($0,12 < x < 0,82$) и $(Fe_{45}Co_{45}Zr_{10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ ($0,2 < x < 0,63$) двух серий: плёнок, напылённых методом ионной бомбардировки на ситалловые подложки в атмосфере аргона и в атмосфере кислорода. Толщина изменялась в зависимости от концентрации x и составляла 2–6 мкм. Для плёнок, полученных в атмосфере аргона, явление перколяции наблюдается при $x \approx 0,4$. Для плёнок, полученных в атмосфере кислорода, порог перколяции не выявлен. Исследования проводились методом ферромагнитного резонанса (ФМР) на ЭПР спектрометре при частоте поля 9,43 ГГц при разной ориентации плоскости пленки относительно направления постоянного магнитного поля [1]. В результате исследования полученных ФМР спектров было обнаружено, что значения резонансного поля H_{res} и ширины линии ФМР спектров ΔH и форма спектров сильно зависят от x . Выявлено принципиальное отличие формы линии ФМР спектров для однородной прецессии намагниченности ΔH для образцов, напылённых в атмосферах аргона и кислорода, с концентрациями металлической фазы до и после порога перколяции для 1 серии. Спектры значительно отличаются для этих серий до и после температурного отжига в интервале температур 480-800 К. Для первой серии плёнок происходит смена формы линии (уширение линии) и ее смещение в сторону более низких значений резонансных полей, вследствие чего форма линии приобретает “релаксационный” характер. Для второй серии плёнок форма линии меняется для всех x . Для плёнок с ферромагнитной и сегнетоэлектрической фазой $Co_x(NbLiO_3)_{1-x}$ наблюдаются более широкие линии спектров ФМР и имеют более сложную структуру. Для этих плёнок наблюдаются зависимости, характерные для других плёнок: уменьшение H_{res} и увеличение ΔH с ростом x . Экспериментальные зависимости объясняются на основе решений для вектора намагниченности из уравнений Ландау-Лифшица в ферромагнитных наночастицах с учётом диполь-дипольных и обменных взаимодействий между ферромагнитными гранулами. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №06-02-17302.

1. L.N. Kotov *et al.*, JMMM, **316**, 20 (2007)

РАСЧЕТ СРЕДНИХ ПОЛЕЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ФЕРРИТЕ

Асадуллин Ф.Ф.², Котов Л.Н.¹, Власов В.С.¹, Гольчевский Ю.В.¹, Носов Л.С.¹, Полециков С.М.², Асадуллина Н.С.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

²Сыктывкарский лесной институт, 167000, Сыктывкар, ул. Ленина, 39

В данной работе приведен метод вычисления среднего поля поликристаллического феррита при отсутствии внешнего постоянного магнитного поля. Среднее поле $\langle H \rangle$ определяется намагниченностью насыщения M_S , константой анизотропии K_1 (или полем анизотропии) $H_A = K_1/M_S$ и функцией распределения частот естественного ферромагнитного резонанса $\varphi(f_0)$ в зернах поликристалла. Такой метод вычисления значения среднего поля и, соответственно, максимальных значений компонент магнитной проницаемости μ' , μ'' , $|\mu|$ [1] и ширины области релаксации Δf_R не требует больших затрат времени. Зная значение среднего поля можно оценить компоненты максимальной магнитной проницаемости спектра $\langle |\mu(f)| \rangle$, ширину низкочастотного плато $\Delta f \approx B_1 / X$, где $X = H_A/M_S$, и ширину области релаксации Δf_R .

Дисперсию собственных частот B_1 можно задать по известным характеристикам поликристаллического феррита – параметру диссипации α , пористости p , полем анизотропии H_A и размагничивания H_{dd} .

В работе были определены значения среднего поля в зависимости от p , α и X . При больших потерях, т.е. больших значениях $\alpha \geq 0.3$ максимальные значения μ' будут определяться только значением намагниченности насыщения. Сопоставляя расчетное значение $\langle |\mu| \rangle$ на низкочастотном плато с экспериментальными данными, можно решить и обратную задачу, то есть найти пористость p и параметр диссипации потерь α .

Таким образом, используя результаты данной работы, можно определять максимальные значения компоненты динамической магнитной проницаемости ферритовых сред и предсказывать свойства вновь синтезированных ферритов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Б.А. Голдин *et al.*, *Спин - фононные взаимодействия в кристаллах (ферритах)*, - Л.: Наука (1991).

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЯ ТОНКИХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛЕНОК: ОДНОРОДНАЯ И НЕОДНОРОДНАЯ

Носов Л.С.¹, Устюгов В.А.¹

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55
E-mail: nosov@syktsu.ru

В работах [1,2] рассматривается возможность высокочастотной переориентации намагниченности однодоменных ферромагнитных частиц переменным магнитным полем. При этом исследуется только однородная динамика намагниченности. Однако вопросы неоднородных нелинейных колебаний является не менее актуальным [3].

Динамика намагниченности однодоменной частицы с кубической анизотропией может быть описана уравнением Ландау-Лифшица с затуханием в форме Гильберта [4], которое для безразмерного времени [1,2] $t^* = t \cdot 2\gamma K_1/M$ (γ – гиромагнитное отношение, K_1 – первая константа кубической анизотропии, $M = |\mathbf{M}|$ – модуль вектора намагниченности \mathbf{M} частицы) может быть представлено в виде:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt^*} = -[\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}] + \alpha \left[\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt^*} \right] \quad (1)$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$ – вектор направляющих косинусов намагниченности; $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{an} + \mathbf{H}_p + \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_{alt}$ – эффективное магнитное поле, состоящее из поля анизотропии \mathbf{H}_{an} , размагничивающего поля \mathbf{H}_p , обменного поля \mathbf{H}_{ex} и внешнего переменного поля \mathbf{H}_{alt} . При этом рассматривается зависимость намагниченности только от одной пространственной координаты z (рис. 1).

Очевидно, что вдали от частот СВР колебания будут носить однородный характер, однако с появлением неоднородных мод колебаний возможна перекачка части энергии однородных колебаний в неоднородные (параметрический распад), что значительно ухудшает возможность высокочастотной переориентации и приводит к увеличению пороговой амплитуды переориентации.

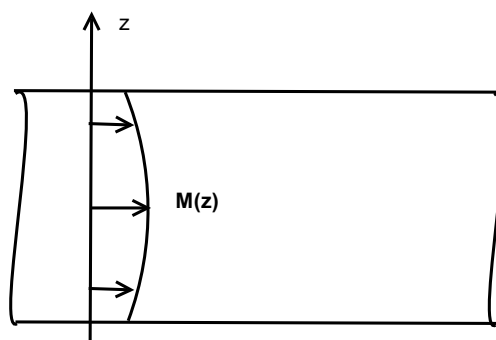


Рис. 1: Геометрия задачи.

1. Котов Л.Н., Носов Л.С., Письма в ЖТФ **29**, 38 (2003)
2. Котов Л.Н., Носов Л.С., ЖТФ **75**, 55 (2005)
3. Шамсутдинов М.А., Калякин Л.А., Известия РАН. Серия физическая, **71** (2007)
4. Гуревич А.Г., Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках, Наука (1973)

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ ОДНОДОМЕННЫХ ЧАСТИЦ ПУТЕМ ЧАСТИЧНОГО ЗАХВАТА В РЕЗОНАНС

Носов Л.С.¹, Котов Л.Н.¹, Асадуллин Ф.Ф.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55
E-mail: nosov@syktsu.ru.ru

²Сыктывкарский лесной институт, 167000, Сыктывкар, ул. Ленина, 39

Исследование нелинейной динамики намагниченности является актуальным в связи с поиском новых методов записи и считывания информации для магнитных накопителей [1-3], и в связи с поиском управляемых режимов динамики намагниченности [4]. Особенно интересным явлением с этой точки зрения будет явление автофазировки или захвата к резонанс, при воздействии на однодоменную частицу переменным магнитным полем [4].

Динамика намагниченности однодоменной частицы с кубической анизотропией может быть описана уравнением Ландау-Лифшица с затуханием в форме Гильберта [5], которое для безразмерного времени $t^* = t \cdot 2\gamma K_1/M$ [1,2] (γ – гиромагнитное отношение, K_1 – первая константа кубической анизотропии, $M = |\mathbf{M}|$ – модуль вектора намагниченности \mathbf{M} частицы) может быть представлено в виде:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt^*} = -[\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}] + \alpha \left[\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt^*} \right] \quad (1)$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M$ – вектор направляющих косинусов намагниченности; $\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{an} + \mathbf{H}_{alt}$ – эффективное магнитное поле, состоящее из поля анизотропии \mathbf{H}_{an} и внешнего переменного поля \mathbf{H}_{alt} . Авторами работы [4] показано, что для возникновения авторезонансных колебаний в однодоменной частице при наличии затухания необходимо, чтобы зависимость амплитуды переменного магнитного поля от времени была линейной, а частота убывала по линейному или квадратичному закону. При этом указано, что в случае постоянной амплитуды поля захват в резонанс происходит лишь частично. Поэтому, в этой работе предлагается использование явления частичного захвата в резонанс для высокочастотной переориентации однодоменной ферромагнитной сферической частицы с кубической анизотропией.

Как видно из рисунка 1 явление частичного захвата в резонанс может приводить к высокочастотной переориентации однодоменных сферических частиц.

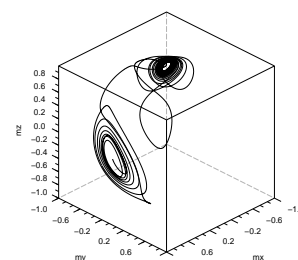


Рис. 1: Траектория высокочастотной переориентации.

1. Котов Л.Н., Носов Л.С., Письма в ЖТФ **29**, 38 (2003)
2. Котов Л.Н., Носов Л.С., ЖТФ **75**, 55 (2005)
3. Thompson D.A., Best J.S., IBM J. Res. and Dev. **44**, 331 (2000)
4. Шамсутдинов М.А., Калякин Л.А., Известия РАН. Серия физическая, **71** (2007)
5. Гуревич А.Г., Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках, Наука (1973)

РЕЛАКСАЦИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ В КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНКАХ И ИХ
НАНОСТРУКТУРА

Котов Л.Н.¹, Власов В.С.¹, Носов Л.С.¹, Петраков А.П.¹, Турков В.К.¹, Калинин Ю.Е.²,

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

²Воронежский государственный технический университет, 394026, Воронеж, Московский пр.14

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию свойств композитных пленок. Интерес к изучению таких плёнок обусловлен их уникальными свойствами, которые возникают из-за наличия в плёнках двух фаз: ферромагнитный металл и диэлектрик. При малой доле металлической компоненты x в плёнке, ферромагнитные частицы с размерами 1-10 нм хаотично разбросаны в диэлектрической матрице. При большой доле металлической компоненты, наоборот, диэлектрические частицы хаотично разбросаны в металлической матрице. В области смешанного распределения разных фаз в некоторых плёнках возникает явление перколяции. В области перколяции может наблюдаться значительное изменение магнитных свойств частиц, частот магнитной релаксации и частот естественного ферромагнитного резонанса (ФМР). Например, наблюдается переход от нормального к критическому затуханию вектора намагниченности в композитных плёнках при изменении концентрации x , отжиге или при понижении температуры [1]. Это поведение пока не достаточно полно описано. Поэтому цель данной работы – обобщение результатов экспериментальных исследований высокочастотных свойств композитных плёнок, а также выявление связи между релаксационным поведением вектора намагниченности и размерами, топологией ферромагнитных частиц, размерами кристаллической фазы в композитных плёнках. Зависимости степени кристалличности зёрен получено методом рентгеновской рефлектометрии. Определение значений времён релаксации вектора намагниченности в различных композитных плёнках проводилось на основе характеристик спектров ФМР для разной ориентации плоскости пленки относительно направления постоянного магнитного поля [2]. Полученные экспериментальные зависимости объясняются на основе соотношений вкладов в общую ширину спектров ФМР: полей анизотропии, диполь-дипольного, обменного взаимодействий между ферромагнитными частицами и естественных потерь в металлической компоненте.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. L.N. Kotov *et al.*, Mat.Sc.& Eng. A, **442**, 352 (2006).
2. L.N. Kotov *et al.*, JMMM, **316**, 20 (2007).

ОБ ИЗМЕНЕНИИ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПЛАСТИН ВЫСОКОЧАСТОТНЫМ ПОЛЕМ

Голов А.В., Котов Л.Н., Носов Л.С.

ГОУВПО “Сыктывкарский государственный университет”, 167001, Республика Коми, г. Сыктывкар, Октябрьский пр-т, 55

Изучением перемангничивания магнитных материалов занимаются с начала XX века. Это связано с тем, что явление намагничивания и перемангничивания тонких магнитных пленок и малых частиц широко используется для записи информации [1]. Под воздействием внешнего переменного магнитного поля структура намагниченности пластины изменяется. После прекращения воздействия поля структура с течением времени возвращается к своему начальному положению.

Известно, что для изменения магнитной структуры материала необходимо воздействовать значительно большими полями на частотах, отличающихся от частоты линейного ферромагнитного резонанса (ФМР) [1]. Изменение магнитной структуры в пластине в зависимости от амплитуды поля носит пороговый характер. В данной работе исследовано явление переориентации в многодоменных пластинах: определена пороговая амплитуда переменного поля при разных параметрах диссипации.

В качестве параметров и констант для расчётов были использованы характеристики марганец-цинковой шпинели (МЦШ) при комнатной температуре ($T=300$ К) и значениях основных констант: намагниченности насыщения $4\pi M_S = 1700Gs$, первой и второй констант анизотропии – $K_1 = 5,5 \cdot 10^3 erg/sm^3$ и $K_2 = -2 \cdot 10^3 erg/sm^3$, обменной постоянной $A^* = 1,4 \cdot 10^{-6} erg/sm$ [2]. По результатам моделирования динамики намагниченности с использованием уравнения Гильберта и стандартных методов микромагнитного моделирования [3] построена зависимость приведенной пороговой амплитуды h_p^* от приведенной частоты ω^* ($\omega^* = \omega \cdot M_S/2\gamma K_1$, $\omega_{FMR}^* = 1$, $H^* = H \cdot M_S/2K_1$) для $\alpha = 0,01$. Выяснено, что на частоте линейного ФМР наблюдается наименьшая амплитуда поля, при котором первоначальное состояние магнитной структуры разрушается. При незначительном уходе частоты поля от резонансной частоты, амплитуда переменного поля, требуемая для изменения структуры намагниченности пластины, резко увеличивается. На гармониках, как при поле с частотой линейного ФМР, наблюдаются области минимума на зависимости $h_p^*(\omega^*)$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Л.Н. Котов *et al.*, ЖТФ **75**, 55 (2005).
2. Б. А. Голдин *et al.*, *Спин-фононные взаимодействия в кристаллах (ферритах)*, Наука, Ленинград (1991).
3. J. Fidler *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, R135 (2000).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМБИНАЦИЙ ПОЛИНОМОВ ДЛЯ РАСЧЕТА МАГНИТНЫХ СПЕКТРОВ ФЕРРИТОВ

Гольчевский Ю.В., Котов Л.Н.

Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

Данная работа посвящена теоретическому изучению поведения и описанию метода расчёта магнитных спектров ферритов различного состава, структуры и формы, заключающегося в нахождении функции на основе комбинации полиномов, описывающей спектры различных ферритовых материалов в зависимости от различных параметров.

Расчеты проводились для поликристаллов железо-иттриевых гранатов и никелевых ферритов с различной пористостью с известными экспериментальными частотными зависимостями действительной $\mu'(f)$ и мнимой $\mu''(f)$ частей магнитной проницаемости.

Было выявлено, что частотные зависимости магнитной проницаемости лучше всего описываются дробно-рациональной функцией на основе комбинации полиномов:

$$\mu(f) = \frac{\sum_n a_n \cdot f^n}{\sum_m b_m \cdot f^m},$$

где a_n и b_m – коэффициенты разложения функции, причем $m > n$.

На основе аппроксимации экспериментальных данных были найдены численные значения коэффициентов a_n и b_m . Выяснено, что магнитные спектры для широкого набора ферритов могут быть предсказаны, если коэффициенты a_n и b_m будут выражены через известные константы ферритов.

Для определения связи коэффициентов с фундаментальными характеристиками использовались формулы, описывающие магнитную проницаемость в ограниченном интервале частот и переменных полей [1,2], а также зависимости спектров от таких характеристик ферритов, как намагниченность насыщения, средние поля в зёрнах поликристаллов, разброс собственных частот или полей, при исследуемой температуре, поле анизотропии, а также пористость материала и др.

Используя статистический анализ, определена степень влияния констант ферритов на форму спектров. В результате были найдены значения корреляции между коэффициентами разложения полиномов и известными характеристиками ферритов. Коэффициенты корреляции изменялись в пределах от -1 до 1 . Существенными считались значения больше $0,5$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Л.Н. Котов *et al.*, Радиотехника и электроника, **44**, 41, (1999).
2. Л.Н. Котов *et al.*, ЖТФ, **68**, 72, (1998).

МАГНЕТИЗМ БИНАРНЫХ И ТРОЙНЫХ ДИАМАГНИТНЫХ ИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ НЕМАГНИТНЫЕ *sp*-ПРИМЕСИ В АНИОННОЙ ПОДРЕШЕТКЕ

Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.

ИХТТ УрО РАН, ул. Первомайская, 91, Екатеринбург, Россия 620041

В качестве одного из перспективных направлений поиска новых магнитных полуметаллов в последние годы было предложено внедрение в анионные подрешетки диамагнитных ионных диэлектриков с широкой запрещенной зоной (MgO , CaO , SrO и т.д.) атомов немагнитных *sp*-элементов (B , C , N и т.д.) [1,2]. В настоящей работе на основе результатов *ab initio* расчетов электронного строения с привлечением полнопотенциального метода присоединенных плоских волн (FLAPW) с обобщенной аппроксимацией (GGA) обменно-корреляционного потенциала было выполнено систематическое исследование электронных и магнитных свойств широкого ряда соединений на основе диамагнитных ионных изоляторов MgO и NaCl , допированных по анионной подрешетке *p*-элементами II-IV периодов (рассматривались соединения формального состава $\text{MgO}_{3/4}\text{X}_{1/4}$ и $\text{NaCl}_{3/4}\text{X}_{1/4}$, симметрия $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$). Согласно результатам расчетов, соединения $\text{MgO}_{3/4}\text{C}_{1/4}$, $\text{MgO}_{3/4}\text{N}_{1/4}$, $\text{MgO}_{3/4}\text{Si}_{1/4}$, $\text{MgO}_{3/4}\text{P}_{1/4}$, $\text{NaCl}_{3/4}\text{B}_{1/4}$ и $\text{NaCl}_{3/4}\text{O}_{1/4}$ относятся к магнитным полуметаллам, соединение $\text{MgO}_{3/4}\text{B}_{1/4}$ представляет собой магнитный псевдо-полуметалл, тогда как соединения $\text{MgO}_{3/4}\text{Ge}_{1/4}$ и $\text{MgO}_{3/4}\text{As}_{1/4}$ являются магнитными металлами, а $\text{NaCl}_{3/4}\text{C}_{1/4}$ - магнитным полупроводником. Для всех перечисленных соединений характерно наличие существенных магнитных моментов на примесных *p*-атомах (~ 0.4 - $1.5 \mu_B$, для $\text{MgO}_{3/4}\text{P}_{1/4}$ и $\text{MgO}_{3/4}\text{As}_{1/4} \sim 0.2 \mu_B$), тогда как магнитные моменты атомов ближайшего окружения примесей, как правило, не превышают ~ 0.05 - $0.1 \mu_B$). Кроме того, впервые было показано, что данный подход к созданию магнитных материалов может быть реализован и в тройных системах - на примере немагнитных перовскитов SrTiO_3 , SrZrO_3 и SrSnO_3 , допированных B , C и N , внедряемыми в кислородную подрешетку (рассматривались соединения формального состава $\text{SrMeO}_{23/8}\text{X}_{1/8}$ и симметрии $\text{P}4/\text{mmm}$). Согласно результатам расчета, соединения $\text{SrTiO}_{23/8}\text{C}_{1/8}$ и $\text{SrSnO}_{23/8}\text{C}_{1/8}$ ведут себя как магнитные полупроводники, тогда как $\text{SrZrO}_{23/8}\text{C}_{1/8}$ и $\text{SrTiO}_{23/8}\text{N}_{1/8}$ представляют собой магнитные полуметаллы, а $\text{SrTiO}_{23/8}\text{B}_{1/8}$ - магнитный псевдо-полуметалл. В указанных соединениях примесные *p*-атомы также обладают существенными магнитными моментами (~ 0.5 - $1.0 \mu_B$), при этом следует отметить заметное увеличение вклада анионной подрешетки в общую намагниченность соединения в рассмотренных тройных системах по сравнению с бинарными.

1. K. Kenmochi et al., *Jap. Journal of Appl. Phys.*, **43**, 934 (2004).
2. K. Kenmochi et al., *Journal of Phys. Soc. Jap.*, **73**, 2952 (2004).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЦЕПОЧКИ С ОРБИТАЛЬНЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ

Пискунова Н.И., Аплеснин С.С.

Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М.Ф. Решетнева, 660014, Красноярск

Магнетики, имеющие двухкратное орбитальное квазивырождение, кроме взаимодействий, не зависящих от спинов, обнаруживают зависимость интеграла обмена от взаимного расположения орбиталей. Это приводит не только к изменению магнитных свойств, но и к изменению транспортных характеристик, например, к гигантскому магнитосопротивлению в манганитах.

Целью исследования является определение изменения магнитных свойств и типа магнитного состояния магнетика при перестройке орбитального упорядочения.

Для этого в работе рассматриваются две модели: с симметричным и ассиметричным альтернированным обменом [1]. При установлении типа упорядочения e_g - орбиталей учтена зависимость интегралов перескока от типа орбиталей и их взаимного расположения.

В качестве метода расчета выбран квантовый метод Монте-Карло, объединяющий два алгоритма [2]: мировых линий (worldline) и непрерывного времени (continuous time) [3] для спинов $S=1/2$, расположенных в узлах одномерной цепочки $L=400$ с неоднородным распределением обмена и с периодическими граничными условиями.

Обнаружено, что асимметрия при альтернировании обмена уменьшает величину энергии между мультиплетами в элементарной ячейке и увеличивает интервал полей, в котором существует плато. Упорядочение орбиталей в магнитном поле индуцирует три типа магнитного порядка: АФМ, ФМ и модулированного ФМ ($\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ – расположение спинов в области плато) с волновым вектором $Q = \pi/2$ в зависимости от соотношения величин магнитного поля и альтернирования обмена. На плоскости магнитное поле – альтернирование обмена построена фазовая диаграмма цепочки с упорядоченным расположением орбиталей.

1. С.С. Аплеснин, Н.И. Пискунова, Письма ЖЭТФ, **85**, 779 (2007).
2. С.С. Аплеснин, ЖЭТФ, **124**, 1080 (2003).
3. N.V. Prokofev, B.V. Svistunov, Phys. Rev. Lett., **81**, 2514 (1998).

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ЧЕТЫРЕХСПИНОВОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА СВОЙСТВА 2D КВАНТОВЫХ МАГНЕТИКОВ

Вальков В.В.^{1,3}, Жолобова Н.Н.^{1,2}, Валькова Т.А.³

¹)Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38,

²) Красноярский государственный педагогический университет, 660049, Красноярск

³)Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, пр. Свободный, 79.

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Открытие высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) стимулировало исследование свойств двумерных антиферромагнетиков (2D-АФМ). Одним из центральных вопросов теории этих систем является вопрос о роли квантовых флуктуаций в проблеме устойчивости неелевской фазы. В простейшем случае изотропного гейзенберговского 2D-АФМ со взаимодействием между ближайшими соседями влияние квантовых флуктуаций при $T=0$ оказывается незначительным даже при минимальном значении спина $S = 1/2$, а разложения по параметру $(1/2S)$ является оправданным.

Из симметричных соображений очевидно, что для спинового гамильтониана, обладающего в спиновом пространстве кубической симметрией, инварианты, описывающие парное взаимодействие, вырождаются в изотропные формы $I_{fm}(\vec{S}_f \vec{S}_m)$. Такие взаимодействия не нарушают инвариантности гамильтониана по отношению к группе $SU(2)$ произвольных вращений в спиновом пространстве. В этом случае, для неелевской фазы имеет место спонтанное нарушение симметрии и, в соответствии с теоремой Голдстоуна, спектр возбуждений является бесщелевым ($\Delta \equiv \omega_{\vec{q}=0} = 0$). При этом вопрос о ренормировке квантовыми флуктуациями щели Δ в спектре возбуждений даже не возникает.

Положение становится иным, если выйти за рамки гейзенберговской модели, когда спиновый гамильтониан, кроме квадратичных инвариантов, содержит инварианты более высокой степени, описывающие анизотропию обменных взаимодействий. Соответственно этому, полный гамильтониан не обладает непрерывной группой симметрии и для неелевской фазы имеет место спонтанное нарушение симметрии лишь относительно дискретной группы. Поэтому, щель в спектре возбуждений отлична от нуля. Тогда, квантовые флуктуации будут приводить к перенормировке "затравочной" щели Δ . Это означает, что по сравнению с изотропным случаем возникают дополнительные условия, определяющие смещение границ устойчивости неелевской фазы. Особого внимания заслуживает вопрос об устойчивости неелевской фазы в условиях анизотропии четырехспинового взаимодействия.

В настоящей работе проанализировано влияние четырёхспинового обменного взаимодействия на спектральные свойства 2D негейзенберговского АФМ на квадратной решётке. Кубическая анизотропия учтена посредством трех четырехспиновых инвариантов. Для различных соотношений между параметрами системы определены области устойчивости трех симметрично допустимых фаз. На основе самосогласованной формы преобразования Боголюбова развита нелинейная теория спектральных свойств рассматриваемого 2D анизотропного негейзенберговского АФМ на квадратной решётке. В рамках такой теории исследовано взаимное влияние кубической анизотропии и фрустрированных взаимодействий на области устойчивости неелевских фаз. Получены ренормировки спин-волновой жесткости и щели в спектре элементарных возбуждений.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая макрофизика РФФИ (грант № 07-02-00226), а также Интеграционного проекта 3.4 СО РАН.

УСЛОВИЯ ФОРМИРОВАНИЯ СПИРАЛЬНЫХ СПИНОВЫХ СТРУКТУР В МАГНЕТИКАХ С КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Тимиргазин М.А.¹, Аржников А.К.²

¹Физико-Технический Институт УрО РАН, 426001, Ижевск, ул. Кирова, 132

E-mail: marat@izhline.net

²Физико-Технический Институт УрО РАН, 426001, Ижевск, ул. Кирова, 132

E-mail: arzhnikov@otf.pti.udm.ru

В последние годы ведется активное изучение систем с неколлинеарным магнитным упорядочением. Условия возникновения такого типа магнитного упорядочения в переходных металлах до сих пор остаются не полностью понятными.

В нашей работе проводится исследование условий формирования спиральных спиновых (СС) структур в рамках модели Хаббарда. С учетом возможной неколлинеарности магнитных моментов построена фазовая диаграмма, состоящая из областей парамагнитного и СС состояний в зависимости от числа электронов n_{el} и параметра U/t (U - параметр кулоновского отталкивания, t - интеграл перекрытия). Фазовая диаграмма показывает, что состояние с СС волной является основным в широкой области параметров модели для переходных металлов. Ферромагнитное и антиферромагнитное состояния в этом случае представляют собой частные случаи СС состояния, и их области сильно сужаются по сравнению с коллинеарной магнитной фазовой диаграммой. Для всех возможных типов магнитного упорядочения проведено исследование поведения магнитного момента в зависимости от различных параметров модели. Полученные данные могут использоваться в первопринципных расчетах магнитной структуры переходных металлов и их сплавов. С технологической точки зрения перспективной выглядит указанная в работе возможность управления длиной СС волны под давлением или путем изменения состава сплава.

КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА НАНОСИСТЕМЫ ФЕРРОМАГНЕТИК / СВЕРХПРОВОДНИК / ФЕРРОМАГНЕТИК С НЕСОРАЗМЕРНЫМИ ТОЛЩИНАМИ

Лучкин Р.Г.¹, Хусаинов М.Г.^{1,2}, Прошин Ю.Н.¹¹Казанский государственный университет, 420025, Казань, ул. Кремлёвская, 18²Филиал “Восток”, Казанский государственный технический университет, 422981, Чистополь

Одним из основных вопросов теории эффекта близости в слоистых наносистемах ферромагнитный металл/сверхпроводник (F/S) является задача о критической температуре T_c таких систем. До сих пор рассматривался случай симметричного расположения ферромагнетиков в системе $F/S/F'$ относительно слоя S (см. обзор [1] и приведенные в нем ссылки). При этом слои F и F' были совершенно одинаковы: совпадали толщины слоев $d_f = d_{f'}$ и значения параметров $2I\tau_f$ (здесь I – величина обменного поля внутри F слоев, τ_f – время свободного пробега электронов проводимости). Предыдущие рассмотрения несимметричности сводились к различным граничным условиям для внутренних и внешних границ [2].

В настоящей работе для системы $F/S/F'$ теоретически исследовано взаимное влияние ферромагнитных слоев на возникновение сверхпроводимости во всем образце. Данная задача решалась в одномодовом приближении и в грязном пределе [1], последнее соответствует условиям приготовления контакта. В формализме уравнений Узаделя были получены аналитические выражения на критическую температуру трехслойной системы. Были построены зависимости приведенной критической температуры сверхпроводящего перехода от толщин ферромагнитных слоев d_f и $d_{f'}$. В поведении функции $T_c(d_f, d_{f'})$ была обнаружена своеобразная интерференция. Полученные результаты совпали с известными [1] как для симметричной трехслойной системы $F/S/F$, так и в пределе отсутствия одного из ферромагнитных слоев – двухслойной системы F/S . Заметим, что в последнем случае наблюдалась сильная чувствительность к появлению даже малого второго слоя ферромагнетика.

Авторы выражают благодарность грантам РФФИ и ПВНШ за частичную поддержку.

1. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Прошин, М.Г. Хусаинов “Конкуренция сверхпроводимости и магнетизма в гетероструктурах ферромагнетик/сверхпроводник”, УФН, **172** 113 (2002).
2. Yu.N. Proshin, A. Zimin, N.G. Fazleev, M.G. Khusainov “Hierarchy of critical temperatures in four-layered ferromagnet/superconductor nanostructures and control devices”, Phys. Rev (2006)

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НЕОДНОРОДНОЙ КОМПОЗИТНОЙ СТРУКТУРОЙ

Анзулевич А.П., Бычков И.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, 454021, Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129

Исследование композитных сред интересно тем, что можно эффективно управлять коэффициентами отражения и поглощения (КО и КП) электромагнитного излучения (ЭМИ) от таких структур. Для удобства расчётов под неоднородной композитной структурой будем понимать многослойную среду. Объёмная доля вкраплённых в слой частиц зависит от номера слоя q в среде следующим образом: $c = 0.03(q - 1)$. Каждый слой характеризуется эффективными проницаемостями [1], выражаемыми через объёмную долю вкраплённых частиц, проницаемости немагнитной среды ε_1, μ_1 и магнитных вкраплений $\varepsilon_2, \mu_2(\omega)$. Распространение электромагнитной волны (ЭМВ) в такой слоистой среде можно описать методом матрицы переноса [2]. Амплитудные коэффициенты отражения и поглощения непосредственно выражаются через компоненты этой матрицы.

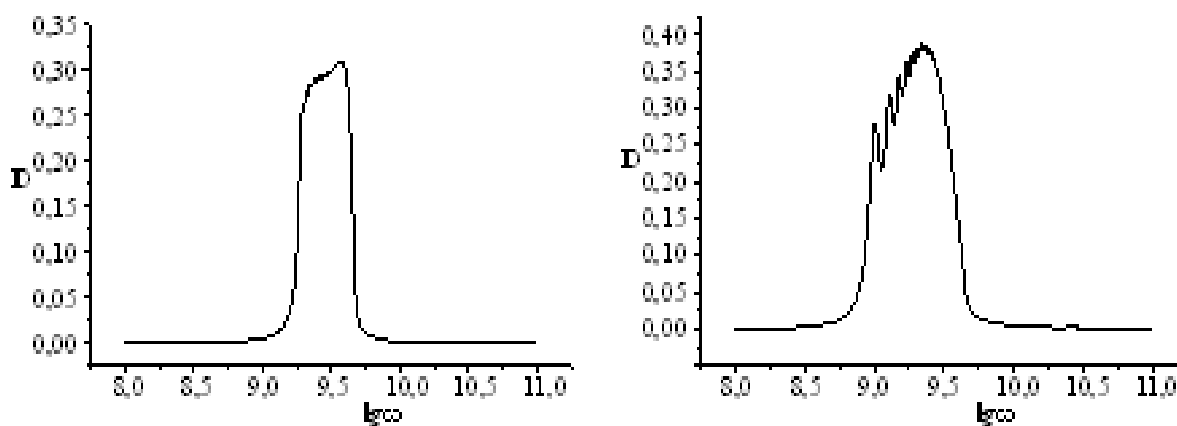


Рис. 1: Частотные зависимости КП ЭМВ неоднородной композитной структурой: толщина слоя $d = 10^{-2}$ см, количество слоёв $n = 30$, $\mu_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 10$, $\omega_r = 10^9$ с $^{-1}$. Слева – падение ЭМВ со стороны меньших c ; справа - падение со стороны больших c .

Было получено, что положение и размеры пиков отражения и поглощения ЭМВ зависят от доли магнитных частиц в композитном слое. Таким образом, для линейно неоднородной композитной структуры можно получить высокий КП вплоть до 40% в заданном диапазоне частот (см. рис. 1).

Диапазон частот задаётся в зависимости от интервала изменения объёмной доли магнитного компонента.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-УРАЛ 07-02-96030.

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред, Наука, Москва (1982).
2. Борн М., Вольф Э. Основы оптики, Наука, Москва (1973).

ОТРАЖЕНИЕ СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИТАМИ С МЕТАЛЛО -
ФЕРРИТОВЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ

Федий А.А., Бычков И.В., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, 454021 Челябинск, Россия
E-mail: bychkov@csu.ru

Радиопоглощающие материалы необходимы в технике и медицине для создания функциональных радиопоглощающих покрытий. Известно, что поглощение и отражение электромагнитного излучения композитными покрытиями определяется, в основном, наполнителем и его геометрией. Достаточно часто применяют в качестве наполнителей порошки металлов, угля, сажи, графита, ферритов или их смеси [1,2].

В работе приводятся экспериментальные результаты исследований влияния на коэффициент отражения R соотношения между компонентами металло-ферритового наполнителя композита в диапазоне 8 - 12 ГГц. Для исследований были взяты в качестве матриц эпоксид, а также порошок 0,6 мкм корунда с насыпной плотностью 0,8 гсм⁻³. Наполнитель – смесь феррита с небольшим количеством алюминиевой пудры. Измерения коэффициента отражения проводились на модели полубесконечного образца.

Установлено, что содержание феррита слабо сказывается на коэффициенте отражения: так при изменении его концентрации от 5 до 35% ϵ' композита на основе эпоксида меняется в пределах 2 – 3,5; R меняется от -5,5 до -7,5 дБ и гораздо сильнее изменяется коэффициент пропускания. В матрице из корунда R изменяется от -15 до -11 дБ при изменении концентрации феррита от 10 до 30%. Добавки Al гораздо существеннее влияют на изменения коэффициента отражения за счет очень сильной концентрационной зависимости ϵ' . Так добавка в образец корунда с 25% феррита 3% Al изменяет R с -11 до -7,5 дБ. В эпоксиде с Al, например, изменение концентрации Al с 2 до 10% увеличивает ϵ' с 4 до 15.

Проведенные исследования показали, что поглотители из композита с металло-ферритовым наполнителем целесообразно делать многослойными. Для согласования импедансов слоев необходимо варьировать содержание примеси Al, а поглощение внутри слоя в большей степени зависит от содержания феррита.

Работа поддержана грантом РФФИ-Урал 07-02-96030.

1. В.С. Пирумов, А.Г. Алексеев, Б.В. Айзикович, Зарубежн. радиоэлектрон., 6, 2 (1994).
2. Н.Е. Казанцева, Н.Г. Рывкина, И.А. Чмутин, РЭ, 48, 196 (2003)

ОТРАЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ ОТ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ С БИГИРОТРОПНЫМИ СЛОЯМИ

Бычков И.В., Селиванова Е.М., Бучельников В.Д.

Челябинский государственный университет, 454021 Челябинск, Россия

В последние годы повысился интерес к слоисто-периодическим структурам на основе тонких пленок металлов, полупроводников и диэлектриков. Данные слоистые периодические среды могут рассматриваться как новый тип искусственных материалов со своими новыми физическими свойствами. Свойствами таких сред можно эффективно управлять с помощью внешних физических воздействий (температура, упругие напряжения, магнитные и электрические поля). Реакция слоистых периодических структур на электромагнитное излучение зависит от электрических и магнитных параметров и толщины слоев. Электрическими и магнитными материальными параметрами каждого слоя являются тензоры электропроводности, диэлектрической и магнитной проницаемостей.

В данной работе приведены результаты численного исследования коэффициентов отражения, прохождения и поглощения электромагнитных волн от поверхности слоистой структуры гиротропный диэлектрик – бигиротропный ферромагнитный диэлектрик при нормальном падении и при варьировании числа слоев и величины частоты релаксации магнитного момента в ферромагнитном диэлектрике, для случаев, когда ферродиэлектрик находится вдали и вблизи точки ориентационного фазового перехода. Также рассчитывается эффект Фарадея для структуры. Распространение электромагнитной волны в такой слоистой среде описывается методом матриц переноса [1]. Амплитудные коэффициенты отражения и поглощения непосредственно выражаются через компоненты матрицы переноса структуры.

Показано, что увеличение числа слоев при неизменной релаксации приводит к возрастанию коэффициентов отражения и поглощения электромагнитных волн в области резонанса, как вдали, так и вблизи фазового перехода. Величина эффекта Фарадея для слоистой структуры зависит как от величины внешнего магнитного поля, так и размеров диэлектрических и ферродиэлектрических слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ-Урал 07-02-96030.

1. М. Борн, Э. Вольф Основы оптики, - М.: Наука (1973).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЯ СВЧ ВОЛН ОТ ТОНКИХ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЁНОК

Беляев Ю.Н., Котов Л.Н., Карпушов Е.Н.

Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский пр., 55

Большое внимание уделяется изучению частотных зависимостей коэффициента отражения $R(f)$ электромагнитных волн от композитных плёнок. В основном эти работы посвящены отражению волн в ИК и оптическом диапазоне. Приведённые расчёты для $R(f)$ получены в предположении, что размер неоднородностей пленки значительно меньше длины волны, но намного больше толщины скин-слоя, т. е. распределение поля волны внутри плёнки неоднородно. Исследованиям же отражения электромагнитных волн сантиметрового диапазона, для которого толщина скин-слоя значительно превышает толщину тонкой пленки, а размер пространственных неоднородностей намного меньше длины волны, уделено значительно меньшее внимание. Тем не менее, именно в этой области, наблюдаются значительные изменения на частотных зависимостях коэффициента отражения $R(f)$ для определённых соотношений проводящей и диэлектрических компонент композитных пленок. Так в [1] при исследовании отражения сантиметровых электромагнитных волн в диапазоне частот 8-25 ГГц от композитных плёнок составов $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$ в интервале частот 19-25 ГГц обнаружен значительный рост коэффициента отражения R (амплитуда скачка достигает 25%) для композитных плёнок составов $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10})_x(Al_2O_3)_{1-x}$. Такая аномальная частотная зависимость $R(f)$ открывает значительные перспективы использования тонкопленочных покрытий для создания новой СВЧ-техники, например, селективных усилителей и поглотителей. Для их внедрения необходимы пленки, которые характеризуются таким скачком в различных СВЧ интервалах. Поэтому настоящая работа посвящена расчётам спектров $R(f)$ композитных плёнок в зависимости от соотношения концентраций проводящей и диэлектрических компонент пленок. При больших концентрациях металлической или диэлектрической компоненты для расчётов $R(f)$ использованы известные формулы для металлических или для диэлектрических плёнок. В области одинаковых концентраций металлической или диэлектрической компонент, для расчётов использованы формулы для полупроводящих сред. Затем все решения для $R(f)$ «сшиты» с учётом структуры плёнок и граничных условий. Описано влияние ферромагнетизма металлической компоненты на спектры $R(f)$. Приведено сравнение данных теоретических расчётов с экспериментальными спектрами $R(f)$ для композитных плёнок.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302.

1. Yu.E. Kalinin *et al.* Изв. РАН. Сер. физ. **69**, 1195 (2005).

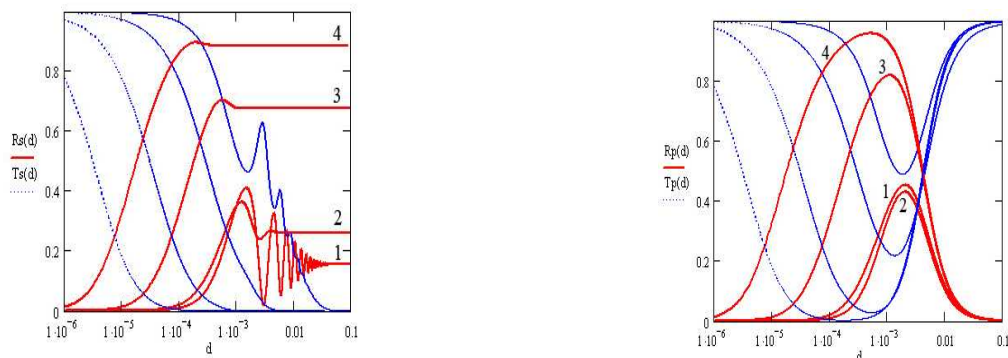
ОТРАЖАЮЩИЕ И ПРОПУСКАЮЩИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ СЛОЕВ И МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ УГЛАХ ПАДЕНИЯ СВЧ ВОЛН

Антонец И.В.¹, Щеглов В.И.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский проспект, 55

²Институт радиотехники и электроники РАН, 125009, Москва ул. Моховая, 11/7

В последние годы, в связи с бурным развитием нанотехнологий, в практику широко входят пленки, толщина которых не превышает длину волны падающего излучения [1-3]. Используя метод усреднения [4], который основан на замене синусоидального распределения волны по толщине пленки линейным, в работе получены граничные условия для тонкого металлического слоя в свободном пространстве, а также структур, состоящих из двух и трех слоев, при произвольном падении продольно и поперечно поляризованной плоской электромагнитной волны. Исследовано поведение коэффициентов отражения, прохождения и поглощения на основе полученных граничных условий в зависимости от толщины слоя, угла падения волны, частоты электромагнитного излучения, толщины подложки, параметров среды. На основании численных примеров изучены электродинамические свойства двухслойной структуры металл-диэлектрик, представляющий собой тонкий слой металла, напыленный на диэлектрическую подложку, также трехслойной структуры типа “сэндвич”, состоящей из двух проводящих тонких слоев, между которыми располагается слой диэлектрика. Для тонких слоев, расположенных в свободном пространстве, получены выражения для тех же коэффициентов прямым методом [5] с целью выявления корректности метода усреднения и определения области его применимости. Выполнено сравнение полученных результатов.



В качестве примера, на рисунке приведены зависимости коэффициента отражения (сплошная линия) и прохождения (пунктир) от толщины тонкого слоя, полученные прямым методом (слева) и методом усреднения (справа) при падении ЭМВ частотой 10^{11} Hz под углом $\pi/4$. Диэлектрическая проницаемость слоя равна 10, а его проводимость составляет $10^{i-1} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$, где i - номер соответствующих кривых.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302

1. А.Е. Каплан, РЭ, **10** (1964).
2. И.В. Антонец *et al.*, ЖТФ, **74**, 3 (2004).
3. И.В. Антонец *et al.*, РЭ, **51**, 12 (2006).
4. М.И. Конторович, А.С. Черепанов, РЭ, **30**, 8 (1985).
5. И.В. Антонец *et al.*, РЭ, **52**, 4 (2007).

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Антонец И.В.¹, Голубев Е.А.²

¹Сыктывкарский государственный университет, 167001, Сыктывкар, Октябрьский проспект, 55,

²Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, 167982, Сыктывкар, ул. Первомайская, 54

Исследованию рельефа тонких металлических пленок, выращенных различными методами и нанесенных на подложки из различных материалов, уделяется значительное внимание [1–6]. Ранее было показано в работах [1–4], что зависимости размеров поверхностных неоднородностей и параметров проводящих, отражающих, электромагнитных свойств тонких пленок в зависимости от толщины коррелируют между собой и, следовательно, могут стать важнейшим инструментом для описания этих характеристик.

В данной работе методом вакуумного осаждения на холодную полимерную подложку при комнатной температуре в условиях неглубокого вакуума выращены рентгеноаморфные пленки серебра, меди, золота, никеля, железа, титана толщиной 3–250 нм, имеющие кластерное строение. Приборы и методика экспериментов описана в [1–3]. Для исследования микрорельефа поверхности подложек и пленок использовался растровый электронный микроскоп JSM–6400 (Jeol), параллельно осуществлялся элементный контроль исследуемых поверхностей методом рентгеноспектрального микроанализа (с помощью анализатора “LINK”, сопряженного с электронным микроскопом). Рельеф поверхности изучался для пленок сравнимой толщины, которая варьировалась от 40 до 60 нм [5]. Выбор таких толщин пленок обусловлен тем, что влияние структуры подложек на структуру тонких пленок проявляется наиболее ярко. При толщинах более 60 нм происходит полное формирование пленок [6].

При помощи методов атомно-силовой и электронной микроскопии показано, что морфологические свойства поверхности подложки оказывают значительное влияние не только на морфологию поверхности, но и на строение металлических пленок и, соответственно, на их проводящие и отражающие свойства. В ходе исследования при одинаковых условиях напыления и равном количестве напыленного материала выявлены отличия в строении пленок, в частности, размерах кластеров, характере их контактов друг с другом. Кроме того, в работе показано, что размер кластеров сильно зависит от толщины пленок [1]. Представлены зависимости среднестатистического размера кластеров от толщины для всех исследуемых пленок. Так, например, для пленок меди и железа при толщинах менее 40 нм этот рост почти линейный, а латеральный размер кластера превышает толщину пленки в полтора-два раза. Однако, начиная с толщин порядка 40–50 нм, рост кластеров замедляется и при толщинах 60–100 нм практически прекращается.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-02-17302

1. И.В. Антонец *et al.*, ЖТФ, **74**, 3 (2004).
2. И.В. Антонец *et al.*, ЖТФ, **74**, 11 (2004).
3. И.В. Антонец *et al.*, РЭ, **49**, 10 (2004).
4. И.В. Антонец *et al.*, РЭ, **51**, 12 (2006).
5. И.В. Антонец *et al.*, Поверхность, **8** (2007).
6. *Технология тонких пленок*. Под ред. Л. Майссела, Р. Глэнга, - М.: Сов. радио (1977).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ МЕДИ С ЛИГАНДАМИ ТЕТРАЗИНОВОГО РЯДА

Швачко Ю.Н.¹, Бухвалов Д.В.¹, Стариченко Д.В.¹, Королев А.В.¹, Курмаев Э.З.¹, Устинов В.В.¹, MacNaughton J.B.², Moewes A.²

¹Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург 620041

²University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada

E-mail: Yurii.Shvachko@imp.uran.ru

Низкоразмерные координационные полимеры на основе трехкатионных комплексов бис-диметилпиразолил-пиридазина (ДМПП) **1** и бис-диметилпиразолил-тетразина (ДМПТ) **2**, обладают необычными магнитными и резонансными (ЭПР) свойствами. Магнитная восприимчивость $\chi(T)$ не описывается законом Кюри-Вейсса, а эффективный магнитный момент $\mu_{\text{эфф}}$ значительно меньше ожидаемого исходя из предложенных химических формул. В **2** уменьшение $\mu_{\text{эфф}}$ наблюдается уже при $T < 150$ К, причем при $T = 10$ К $\mu_{\text{эфф}} \approx 0,4 \mu_B$ в отличие от ожидаемого значения $1,5 \mu_B$.

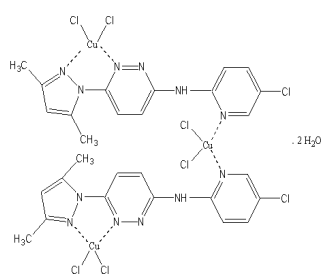


Рис. 1: Структура **1**

Исходя из расчетной структуры, восстановленной по ИК спектрам, магнитные свойства **1** являются еще более необычными. Антиферромагнитное поведение $\chi^{-1}(T)$, с отчетливым максимумом при $T_{\text{ДФМ}} = 150$ К характерно для объемных антиферромагнетиков. При $T < 50$ К в системе появляются свободные локализованные магнитные моменты. Величина намагниченности при 2 К соответствует $2,5 \mu_B$, то есть магнитное поведение ниже 50 К не объясняется неколлинеарностью АФМ решетки. Более вероятно – разрушение всего магнитосвязанного состояния при гелиевых температурах.

Антиферромагнетизм при $T \sim 300$ К в координационных соединениях меди является достаточно необычным, поскольку должен обеспечиваться сильными магнитными взаимодействиями. В представленных низкоразмерных структурах ионы меди слишком удалены друг от друга, чтобы обеспечить такие взаимодействия. Наиболее вероятным представляется гибридизация $3d$ (Cu) - $2p$ (N) состояний, приводящая к поляризации спиновой плотности на лиганде.

Анализ магнитных свойств проводился с учетом спин-поляризованных расчетов электронной структуры, выполненных методом SCIESTA. Корректность данных расчетов проверена путем их сопоставления с K -рентгеновскими эмиссионными (XES) и абсорбционными (XANES) спектрами азота и углерода, полученными на источнике синхротронного излучения ALS (Advanced Light Source, Berkeley).

Работа выполнена в рамках программы сотрудничества УрО и СО РАН, проект № 29, а так же при финансовой поддержке гранта НШ-5869.2006.2.

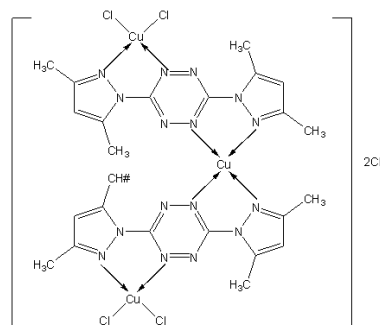


Рис. 2: Структура **2**

ПАРАМАГНИТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА В
МЕЛАНО-ПРОТЕИНОВЫХ ВОЛОКНАХБайтимиров Д.Р.², Стариченко Д.В.¹, Конев С.Ф.², Швачко Ю.Н.¹¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, 620219, ул. С. Ковалевской, 18²Уральский государственный технический университет-УПИ, 620002, ул. Мира, 19,
Екатеринбург

E-mail: Yurii.Shvachko@imp.uran.ru

Фундаментальный интерес к мелано-протеиновым биоволокнам (волос, шерсть, перо) обусловлен их уникальной супрамолекулярной структурой, образующей, в частности, кератиновые нанотрубки. Систематические исследования магнитных свойств белковых нанотрубок важны для создания новых молекулярных магнитоактивных материалов.

В работе сообщается о результатах ЭПР исследований более 200 образцов меланопротеиновых волокон человеческого волоса. Изучены ЭПР сигналы меланина ($\Delta B \approx 4 \div 6$ Гс, $g = 2,004$), гемопропротеиновых остатков ($\Delta B \approx 70 \div 500$ Гс, $g = 4,3$) и цистеиновых радикалов ($\Delta B = 15 \div 70$ Гс, $g_1 = 2,00$ $g_2 = 2,03$ $g_3 = 2,06$). Выделен и исследован неизвестный ЭПР сигнал, включающий несколько компонент: узкую симметричную с $\Delta B(300\text{K}) = 200\text{-}500$ Гс, $g = 2,38$ и более широкую с $\Delta B(300\text{K}) = 400 \div 1000$ Гс, $g \sim 2,2$. Установлено, что соответствующие ЭПР-центры локализованы в кератиновых ассоциатах и не связаны с парамагнитными примесями [1]. Взаимное соотношение амплитуд обоих компонент значительно меняется с температурой, а также при химическом и механическом воздействиях. В отдельных случаях удавалось практически полностью подавить как широкий, так и узкий вклады [2]. Интегральная интенсивность полного спектра не изменяется драматически от образца к образцу и составляет $10^{20} \div 10^{22}$ спин/г. Показано, что спектральные вклады чувствительны к процессам стеклования, плавления и пиролиза протеиновой подсистемы. Характер температурной зависимости для полной интенсивности и аксиально-симметричная форма сигнала указывают на одновременное участие парамагнитных центров различных типов.

В работе экспериментально показано, что изученный парамагнетизм кератиновых волокон возникает в процессе ассоциации тетрамеров в нанотрубки. Гидрофильные аминокислотные остатки с различными донорными и акцепторными свойствами, например семихинонная группа тирозина (Tyr) и аминокислотный остаток аргинин (Arg), образуют магнитоактивные комплексы с переносом заряда (КПЗ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (НШ-5869.2006.2).

1. D. R. Baitimirov, D. V. Starichenko, Yu. N. Shvachko, Book of Abstracts Modern Development of Magnetic Resonance, Kazan, 24-29 September 2007, p. 251.
2. Д.Р. Байтимиров, Т. А. Правишкина, Д.В. Стариченко, С.Ф. Конев, Ю.Н. Швачко, Химические волокна, 2006, №6, с. 49-54.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СМЕЩЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА В ФЕРРОМАГНЕТИКЕ С ЗОННЫМ ЭФФЕКТОМ ЯНА-ТЕЛЛЕРА ТИПА СПЛАВА Ni_2MnGa

Попков А.Ф.¹, Шавров В.Г.², Колецов В.В.², Горячев А.В.³

¹ФГУП « НИИ Физических проблем им. Ф.В.Лукина », Россия
103460, Москва, Зеленоград,

²Институт Радиотехники и Электроники РАН, 125009, Москва, Россия,

³Московский институт электронной техники, Россия 103489, Москва, Зеленоград,
E-mail: popkov@nonlin.msk.ru; shavrov@mail.cplire.ru; andrei.goryachev@mail.ru

Магнитные сплавы Гейслера типа Ni_2MnGa наряду со структурным фазовым переходом и эффектом памяти формы, характеризуются также наличием магнитного упорядочения, что делает возможным обратимо переходить из одной структурной фазы в другую как по температуре, так и магнитному полю. Подобные соединения весьма перспективны для технических приложений в микромеханике. В связи с этим особый интерес представляет детальное изучение механизмов влияния магнитных взаимодействий и внешнего магнитного поля на температуру структурного перехода.

Экспериментальные исследования сплава $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Fe_yGa_{1-y}$, проведенные соавторами доклада вплоть до полей 1 Т, показали линейное смещение критических точек потери устойчивости при мартенсит-аустенитном превращении с ростом поля на несколько градусов. Феноменологическая теория, развитая для сложно-замещенного сплава $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Ga$ достаточно хорошо объясняет особенности фазовых структурных и магнитных превращений в нем вплоть до больших значений концентраций замещения, но не позволяет связать их с особенностями электронного спектра. Расчеты электронного спектра сплава Ni_2MnGa , показывают, что наиболее вероятным механизмом структурных переходов в этом сплаве является зонный эффект Яна-Теллера. Установлен немонотонный характер зависимости температуры мартенситного перехода в узкозонном проводнике в зависимости от положения уровня Ферми вблизи пика энергетической плотности состояний узкой спиновой подзоны электронов. На основе развитой теории проделаны оценочные расчеты изменения температуры мартенситного перехода с магнитным полем $\frac{\partial T_m}{\partial H}$, показавшие его удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для сплава Гейслера $Ni_{2+x}Mn_{1-x}Fe_yGa_{1-y}$. Развитый подход может использоваться и для объяснения концентрационной диаграммы изменения состояний сложно-замещенного сплава.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 06-02-16266, 06-02-39030, 05-02-17152.

Авторский указатель

- Combescot M., 44
- MacNaughton J.B., 188
- Moewes A., 188
- Аввакумов И.Л., 52
- Авдеев М.В., 155
- Агалямова Э.Н., 110
- Агзамова П.А., 146, 148
- Аксенов С.В., 141
- Алеев А.А., 29
- Али-Паша В.А., 111
- Андреев А.И., 22
- Анзулевич А.П., 182
- Анисимов В.И., 56
- Анохин А.О., 24
- Антонец И.В., 169, 186, 187
- Аплеснин С.С., 23, 178
- Аржников А.К., 180
- Асадуллин Ф.Ф., 71, 73, 171, 173
- Асадуллина Н.С., 71, 171
- Байдаков В.Г., 92
- Байтимилов Д.Р., 189
- Бакулина Н.Б., 94
- Банников В.В., 177
- Барабанов А.Ф., 25, 26, 43
- Баранова Е.В., 95
- Бибенин Н.Г., 83
- Безносиков Д.С., 72
- Белемук А.М., 26
- Беленков Е.А., 74, 110–112, 114, 120
- Белозеров А.С., 55
- Беляев Ю.Н., 51, 168, 185
- Беляева А.И., 95
- Березин В.М., 161
- Богданова Х.Г., 142
- Борисов А.Б., 62
- Бострем И.Г., 48, 50, 115
- Боярченков А.С., 115
- Бузиелло Г., 103, 128
- Бузлуков А.Л., 149
- Булатов А.Р., 142
- Бурмистров В.А., 105, 107, 113
- Бутько Л.Н., 162
- Бухвалов Д.В., 188
- Бучельников В.Д., 104, 122, 123, 162, 167, 182–184
- Бычков И.В., 162, 167, 182–184
- Вальков В.В., 21, 27, 28, 32, 40, 45, 135, 141, 154, 179
- Валькова Т.А., 179
- Варенков В.И., 140
- Васильченко А.А., 68
- Васин М.Г., 98
- Ведяев А.В., 151
- Верховский С.В., 149
- Виноградов А.П., 137, 145
- Власов В.С., 71, 73, 125, 170, 171, 174
- Воронин В.И., 108
- Воронцов А.Г., 100
- Гаврилова Т.П., 144
- Газеева Е.В., 103, 128
- Ганьшина Е.А., 152
- Герасимов Е.Г., 108
- Голенищев-Кутузов В.А., 142
- Голов А.В., 175
- Головня А.А., 27
- Голубев Е.А., 187
- Гольчевский Ю.В., 171, 176
- Гончарь Л.Э., 147
- Горячев А.В., 190
- Грановский А.Б., 137, 145
- Гребенников В.И., 89
- Грешняков В.А., 112
- Гуськов Д.А., 135
- Гущин Н.Н., 169
- Дейч Л.И., 145
- Дзедзисашвили Д.М., 28
- Долгушева Е.Б., 124
- Дорофеев А.В., 137
- Дружинин А.В., 140
- Дякин В.В., 166
- Екомасов Е.Г., 70

- Емец В.Н., 167
 Епифанов С.С., 79, 80
 Еремина Р.М., 143, 144
 Ерёмин М.В., 22, 29
 Ерёмин И.М., 22, 29
 Ерохин С.Г., 145
 Ефимец Ю.Ю., 125, 170
 Ефремов А.В., 146
- Жолобова Н.Н., 179
 Журавлев А.К., 49
- Загребин М.А., 104
 Зайнуллина Р.И., 83
 Зайцев Р.О., 31, 39
 Зарубин А.В., 24
 Захарьевич Д.А., 105
 Зинатулина Ю.А., 74
 Зубарев Н.М., 65, 99
 Зубарева О.В., 65, 99
- Ивановский А.Л., 121, 177
 Игнатенко А.Н., 53
 Изюмов Ю.А., 17
 Иноуе М., 137
 Ирхин В.Ю., 24, 53
- Кабанов В.В., 90, 158
 Каблیمان Е.А., 106
 Калашников И.А., 118
 Калинин Ю.Е., 125, 152, 168–170, 174
 Калякин Л.А., 66, 67
 Каримов О.И., 111
 Карпушов Е.Н., 185
 Карькина Л.Е., 130
 Катанин А.А., 53
 Кауль А.Р., 149, 150
 Кобелев А.В., 75, 101
 Кобелев О.А., 101
 Кобелева Р.М., 75
 Кожевников А.В., 56
 Кокин А.А., 61
 Кокорина Е.Е., 42
 Коледов В.В., 71, 190
 Конев С.Ф., 189
 Коровушкин М.М., 21, 32
 Королев А.В., 109, 188
 Коротин Д.М., 56
 Коротин М.А., 55, 56, 108
 Котов Л.Н., 71–73, 125, 168–171, 173–176, 185
 Коуров Н.И., 109
 Кочелаев Б.И., 33
 Кугель К.И., 34
- Кудасов Ю.Б., 91, 153
 Кузьмин Ю.И., 140
 Кулагин Д.В., 163, 164
 Кулеева Н.А., 35
 Кумагаи К., 149
 Кунеш Я., 56
 Куприянов М.Ю., 151
 Куркин М.И., 94, 133
 Курмаев Э.З., 188
 Куц Д.А., 100
 Кучинский Э.З., 19, 35, 36, 42
- Ларин А.В., 146, 147
 Лисянский А.А., 137, 145
 Литвинов И.Е., 149, 150
 Лупицкая Ю.А., 107
 Лучкин Р.Г., 156, 181
 Ляпилин И.И., 134, 165
- Мавринский В.В., 112
 Максимов Л.А., 25, 26
 Мальцев И.А., 96
 Мамин Р.Ф., 90
 Марченков В.В., 108
 Марченкова Е.Б., 109
 Маслов Д.А., 153
 Медведев М.В., 86
 Меженина О.А., 113
 Мельников Н.Б., 69
 Меньшенин В.В., 85, 94, 133
 Мерзликин А.М., 137, 145
 Мигунов В.Е., 152
 Мирзоев А.А., 106, 119
 Мирзоев А.А.И., 96
 Мирмельштейн А., 87
 Миронов Г.И., 37, 38
 Михайлова Ю.В., 39
 Михалев К.Н., 149, 150
 Михеенков А.В., 43
 Мицкан В.А., 40
 Можегоров А.А., 147
 Молчанова М.В., 160
 Москвин А.И., 23
 Москвин А.С., 41, 52
 Муковский Я.М., 143
 Мурзашев А.И., 51
 Муртазаев А.К., 84, 129
 Муртазин Р.Р., 70
- Небогатиков Н.М., 97
 Некрасов И.А., 19, 35, 36, 42
 Некраш Е.В., 114

- Нигаматьянова З.Н., 149, 150
Нигматуллин Р.Р., 30, 78
Никифоров А.Е., 146–148
Николаев В.В., 133
Новокшенов В.Ю., 63
Носихин Е.А., 116, 117
Носов Л.С., 125, 170–175
- Овчинников А.С., 48, 50, 115
- Панов Ю.Д., 41
Патраков А.Е., 165
Перов Н.С., 152
Петраков А.П., 125, 174
Петрунёв С.Н., 169
Пискунова Н.И., 178
Плакида Н.М., 18
Погосов В.В., 44
Полещиков С.М., 71, 171
Попков А.Ф., 190
Попов И.И., 157
Попов К.Г., 93
Попов С.Э., 146
Потапов А.А., 142
Проценко Ю.Л., 75
Прошин Ю.Н., 155–157, 181
Прудников В.В., 116–118
Прудников П.В., 116–118
Пугач Н.Г., 151
Пушин В.Г., 109
Пушкарев М.С., 45
Пхонгхирун С., 152
Пчёлкина З.В., 42, 57
- Раевский В.Я., 166
Рахманов А.Л., 34
Резер Б.И., 69
Рубин П.Э., 46
Рыбаков Ф.Н., 62
Рыльцев Р.Е., 102
- Сабурова Р.В., 126–128
Савченко А.С., 163, 164
Садовский М.В., 19, 35, 36, 42
Садыков Н.Р., 138, 139
Самородов И.В., 103
Сапожникова Т.С., 119
Сбойчаков А.О., 34
Свяжин А.Д., 108
Селиванова Е.М., 184
Синицын В.Е., 48, 50
Ситников А.В., 125, 152, 168–170
Соколовский В.В., 122, 123
- Соловьев А.А., 161
Солонцов А., 87
Сон Л.Д., 102
Стариченко Д.В., 188, 189
Стрельцов С.В., 136
Суетин Д.В., 121
Суслов И.М., 88
- Тарасенко С.В., 163, 164
Таскаев С.В., 104, 122, 123
Тимиргазин М.А., 180
Трокинер А., 149
Трубицын В.Ю., 124
Турков В.К., 125, 170, 174
Туров Е.А., 94
Тутынина О.И., 102
- Уздин В.М., 129, 160
Уздин С.В., 159
Уксусников А.Н., 109
Уляшев А.М., 168
Умергалина О.В., 166
Усманова С.М., 103, 126, 127
Устинов В.В., 83, 188
Устюгов В.А., 172
- Федий А.А., 183
Федоров В.Е., 64
Фурукава Ю., 149
- Хайбутдинова И.Р., 103, 128
Хачай О.А., 76
Хачай О.Ю., 76
Хизриев К.Ш., 129
Хомский Д.И., 20, 136
Хусаинов М.Г., 155–157, 181
Хусаинов М.М., 157
- Царевский С.Л., 155
- Чащин Н.И., 54
Чугунова Г.П., 128
- Шавров В.Г., 71, 73, 190
Шагинян В.Р., 93
Шамсутдинов М.А., 67
Шахова И.В., 120
Швачко Ю.Н., 188, 189
Шеин И.Р., 121, 177
Шерман А.В., 46
Шилов В.Е., 47
Шилова Е.В., 47
Шкляев А.А., 154
Шредер Е.И., 108

Щеглов В.И., 73, 186

Эктов А.В., 55

Энтель П., 104

Юрченко Л.И., 109

Юрьева Э.И., 77

Яковенкова Л.И., 130

Якубовский А.Ю., 149, 150

Яцык И.В., 143

Дополнение

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ПАТТЕРНЫ НА ПОВЕРХНОСТИ ГИДРОСТАТИЧЕСКИ СЖАТОЙ ОБОЛОЧКИ

Киселёв В.В., Долгих Д.В.

Институт физики металлов УрО РАН, 620041 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
E-mail: kiseliev@imp.uran.ru

Цилиндрическая оболочка, сжатая с внешней поверхности жидкостью высокого давления, при определенной величине давления теряет устойчивость формы – совершает “хлопок”. В результате на ее поверхности появляются вытянутые вдоль образующей выпуклости и вмятины, правильно чередующиеся в поперечном сечении оболочки [1]. Важно, что деформации тонкой оболочки при этом остаются упругими и соответствуют в основном ее геометрическому изгибу [2]. Поэтому начальную стадию формоизменения оболочки можно описать в рамках нелинейной теории упругости [3].

Уравнения нелинейной теории упругости [3] учитывают не только геометрическую нелинейность задачи, связанную с нелинейностью тензора деформаций, но и физическую нелинейность, которая характеризует свойства материала и описывается высшими инвариантами тензора деформаций в разложении нелинейно-упругой энергии среды. Корректный учет высших ангармонизмов принципиален, так как эффекты нелинейности приводят к локализации изгибов оболочки. В конечном итоге образование пространственно локализованных узоров из вмятин на поверхности оболочки на начальной стадии ее формоизменения является результатом баланса эффектов нелинейности и дисперсии.

В данной работе предлагается вариант редуктивной теории возмущений, пригодный для решения нелинейных краевых задач, в которых конечная поверхность деформируемой оболочки заранее не известна, а находится в процессе решения задачи. Показано, что первые порядки предлагаемой теории возмущений приводят к классической модели оболочек. Однако для длинных гидростатически сжатых оболочек традиционные нелинейные уравнения оболочек сводятся к линейным уравнениям, поэтому оказываются недостаточными для описания вмятин на поверхностях оболочек. Взаимодействия, ответственные за образование вмятин, полностью проявятся лишь в следующих порядках теории возмущений.

Анализ высших приближений редуктивной теории возмущений упрощается путем введения иерархии переменных для описания разных масштабных уровней деформации оболочки. А именно вводятся: 1) “быстрые” переменные для описания неоднородных деформаций вдоль нормали к поверхности оболочки, 2) “медленные” переменные, ответственные за образование изгибов в ее поперечном сечении, 3) переменные, характеризующие плавные деформации оболочки вдоль образующей. С их помощью выделены взаимодействия тех неустойчивых мод деформации, которые близки к нейтрально-неустойчивой линейной моде, ответственной за формоизменение гидростатически сжатой оболочки. Построена упрощенная модель, описывающая динамику огибающей изгибов оболочки вблизи порога устойчивости ее формы.

На основе полученной модели аналитически описаны солитоноподобные возбуждения (компактоны) и пространственно локализованные узоры из вмятин, которые образуются на начальной стадии формоизменения оболочки.

1. Вольмир А.С. Устойчивость упругих систем, Физматгиз (1963)
2. Погорелов А.В. Геометрические методы в нелинейной теории оболочек, Наука (1967)
3. Murnaghan F.D. Finite Deformation of an Elastic Solid, N. Y.: Willey; London: Chapman and Hall (1951)

ЭФФЕКТ "ПЕРВОГО ИЗМЕРЕНИЯ" И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА $\text{Ni}_{2,19}\text{Mn}_{0,81}\text{Ga}$

Коледов В.В.¹, Ховайло В.В.¹, Шавров В.Г.¹, Кошкидько Ю.С.², Скоков К.П.²

¹Институт радиотехники и электроники РАН, 125009, Москва, ул. Моховая, 11/7
E-mail: v-khovaylo@cplire.ru

²Тверской государственный университет, 170100, Тверь, ул. Желябова, 33
E-mail: Konstantin.Skovov@tversu.ru

Значительный интерес к исследованию магнитокалорического эффекта (МКЭ) обусловлен идеей широкого практического использования твердотельного ("магнитного") холодильника. Ряд работ указывают на то, что большой МКЭ наблюдается, как правило, в сплавах и соединениях, в которых магнитный фазовый переход сопровождается структурным фазовым переходом (см., например, [1,2]). Одним из интерметаллидов, в которых реализуется эта ситуация, является сплав Гейслера $\text{Ni}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{Ga}$, в котором наблюдается фазовый переход ферромагнитный мартенсит – парамагнитный аустенит в композиционном интервале $0,18 \leq x \leq 0,27$ [3]. Магнитокалорические свойства одного из сплавов из этого композиционного интервала, $\text{Ni}_{2,19}\text{Mn}_{0,81}\text{Ga}$, были исследованы экспериментально.

Наряду с изменением магнитной энтропии ΔS , определенной из полевых зависимостей намагниченности, для этого сплава были проведены систематические измерения адиабатического изменения температуры ΔT в окрестности связанного магнитоструктурного перехода. Измерения проводились как при повышении температуры, так и при ее понижении. В обоих случаях температурная зависимость ΔT имеет четко выраженный пик, который наблюдается при температуре магнитоструктурного перехода. Высота пика на температурной зависимости ΔT , измеренной при нагреве оказалась, однако, существенно ниже, чем в случае измерений при охлаждении. Так, пиковое значение ΔT , измеренное при изменении поля от 0 до 18,5 кЭ при нагреве, равно 0,8 К, в то время как эта величина, измеренная при охлаждении, равняется 1,2 К. Более того, значение $\Delta T = 1,2$ К наблюдалось только при первом вводе-выводе магнитного поля; при повторном включении магнитного поля величина адиабатического изменения температуры оказалась значительно меньшей, чем при первом измерении (эффект "первого измерения"). Очевидно, что эффект "первого измерения" связан с выделением скрытой теплоты при фазовом переходе 1-го рода из аустенитного в мартенситное состояние. Наблюдение эффекта "первого измерения" является очень важным и должно быть учтено при конструировании твердотельных магнитокалорических холодильников. Отметим, что в литературе отсутствуют данные о наблюдении этого эффекта в материалах с гигантским магнитокалорическим эффектом. Насколько нам известно, впервые об эффекте "первого измерения" сообщалось в работе Красовского и Факидова [4], в которой исследовался магнитокалорический эффект в магнетите.

1. Gschneidner K.A., Jr., Pecharsky V.K. and Tsokol A.O., Rep. Prog. Phys. **68**, 1479 (2005)
2. Tishin A.M. and Spichkin Y.I., The Magnetocaloric Effect and its Applications, Institute of Physics Publishing (2003)
3. Khovaylo V.V., Buchelnikov V.D., et al., Phys. Rev. B **72**, 224408 (2005)
4. Красовский В.П., Факидов И.Г., ЖЭТФ, **39**, 235 (1960)

Список замеченных опечаток в тезисах «Коуровки - XXXII»

№	Стр.	Напечатано	Должно быть
1	7	<i>Асадуллин Ф.Ф., Котов Л.Н., Власов В.С., Гольчевский Ю.В., Носов Л.С., Полещиков С.М., Асадуллина Н.С.</i>	<i>Асадуллин Ф.Ф., Котов Л.Н., Власов В.С., Полещиков С.М., Асадуллина Н.С., Коледов В.В., Шаеров В.Г.</i>
2			
3			
4			

Ответственный за выпуск — А.В. Кобелев.

Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН. Тираж 200 экз. Заказ № . Объем 6.0
печ. л. Формат А4. 620041 ГСП—170, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18.
